

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA



TRABAJO DE FIN DE GRADO

Grado en Ingeniería Química

**PLANTA DE PRODUCCIÓN DE  
DETERGENTE TIPO LABS**

Antía Gándara Vieito

Noelia López García

Lucía Pardilla Fraguas

Junio de 2025

A nuestras familias, amigos y toda la gente que nos apoyó durante esta etapa.

A nuestra tutora.

Gracias.

# ÍNDICE GENERAL

## DOCUMENTO I. MEMORIA

Anexo I. Balances de materia y energía

Anexo II. Cálculos justificativos

Anexo III. Análisis de viabilidad económica

Anexo IV: Fichas de seguridad <sup>1</sup>

## DOCUMENTO II. PLANOS

## DOCUMENTO III. ESTUDIOS CON ENTIDAD PROPIA <sup>2</sup>

## DOCUMENTO IV. PLIEGO DE CONDICIONES<sup>1</sup>

## DOCUMENTO V. PRESUPUESTO

<sup>1</sup> Las Fichas de Seguridad y el Pliego de Condiciones se adjuntan en el Archivo II del presente proyecto.

<sup>2</sup> Los Estudios con entidad propia se componen por el Estudio de Impacto Ambiental, presente en el archivo I y el Estudio de Seguridad y Salud, disponible en el Archivo II.

DOCUMENTO I.

MEMORIA

## Índice

1	Objeto .....	5
2	Alcance .....	5
3	Justificación del proyecto .....	5
4	Estudio de alternativas.....	6
4.1	Reacción de alquilación .....	7
4.2	Reacción de sulfonación .....	8
4.3	Reacción de neutralización .....	10
4.4	Aditivos.....	11
4.5	Alternativa seleccionada .....	12
5	Materias primas, producto y subproductos.....	12
5.1	Materias primas.....	12
5.1.1	Benceno .....	13
5.1.2	Dodeceno.....	14
5.1.3	Óleum .....	15
5.1.4	Agua .....	15
5.1.5	Hidróxido de sodio 20%.....	16
5.1.6	Aditivos .....	17
5.2	Producto .....	21
5.2.1	Detergente LAS.....	21
5.3	Subproductos .....	22
5.3.1	Disolución de ácido sulfúrico .....	22
6	Análisis de mercado .....	23
6.1	Mercado mundial .....	23
6.2	Principales empresas del sector .....	25
6.2.1	Mercado nacional .....	25
6.2.2	Capacidad de producción empresas españolas .....	25
6.3	Precio promedio de detergentes .....	26
6.4	Mercados alternativos .....	26
6.5	Mercado de las materias primas.....	27
6.5.1	Benceno .....	27
6.5.2	Dodeceno.....	28
6.5.3	Catalizador.....	29
6.5.4	Óleum 22%.....	29
6.5.5	Agua del proceso .....	30
6.5.6	Hidróxido de Sodio.....	30
6.5.7	Aditivos .....	31
6.6	Conclusión.....	31

7	Emplazamiento .....	32
7.1	Suministro de las materias primas .....	32
7.1.1	Obtención del benceno .....	32
7.1.2	Obtención del dodeceno .....	32
7.1.3	Obtención del óleum.....	33
7.1.4	Obtención del hidróxido de sodio.....	33
7.1.5	Obtención de aditivos .....	33
7.2	Localización seleccionada .....	33
7.3	Selección del polígono y parcela .....	34
7.4	Servicios del polígono .....	35
7.5	Medios de transporte y comunicación .....	35
7.5.1	Transporte marítimo .....	35
7.5.2	Red de carreteras .....	35
7.5.3	Red ferroviaria.....	36
7.5.4	Transporte aéreo .....	37
7.5.5	Red de tuberías .....	37
7.6	Posibles compradores y competidores .....	37
7.7	Disponibilidad de mano de obra .....	38
7.8	Climatología .....	38
7.9	Estudio de sismicidad .....	39
8	Análisis de viabilidad técnica .....	40
8.1	Viabilidad de la tecnología .....	40
8.2	Disponibilidad de recursos.....	40
8.2.1	Recursos materiales .....	40
8.2.2	Recursos humanos .....	41
8.2.3	Recursos de infraestructura .....	42
8.3	Seguridad del proceso .....	42
8.4	Viabilidad económica .....	42
9	Descripción del proceso, instalación y equipos .....	43
9.1	Descripción del proceso.....	43
9.2	Descripción de equipos .....	46
9.2.1	Sección 100 .....	46
9.2.2	Sección 200 .....	48
9.2.3	Sección 300 .....	48
9.3	Descripción de la instalación .....	49
9.3.1	Área de almacenamiento .....	49
9.3.2	Edificios auxiliares .....	49
9.3.3	Sistemas externos y utilidades .....	50
10	Control e instrumentación .....	50

10.1	Introducción.....	50
10.2	Definiciones y conceptos básicos de los sistemas de control de procesos.....	50
10.3	Métodos de control .....	51
10.4	Algoritmos de control .....	51
10.5	Nomenclatura empleada .....	53
10.6	Descripción de los lazos de control .....	54
10.6.1	Sección 100.....	54
10.6.2	Sección 200.....	61
10.6.3	Sección 300.....	66
10.7	Válvulas de seguridad.....	70
10.7.1	Válvulas de alivio.....	71
10.8	Alarmas.....	72
11	Seguridad.....	73
11.1	Inventario de sustancias .....	73
11.2	Clasificación según el Reglamento CLP.....	74
11.3	Clasificación de la instalación según la Directiva Seveso .....	77
11.4	Clasificación NFPA .....	79
11.5	Estudio de la reactividad química descontrolada.....	80
11.5.1	Matriz de compatibilidad química.....	80
11.6	Directiva ATEX.....	82
11.7	Antorcha .....	82
11.8	Distancias de seguridad .....	83
11.8.1	Distancias de seguridad entre áreas.....	83
11.8.2	Distancias de seguridad entre equipos .....	84
11.9	Índice DOW de fuego y explosión.....	86
11.9.1	Selección de las unidades pertinentes .....	87
11.9.2	Factor material (FM).....	87
11.9.3	Factor de Riesgos Generales del Proceso.....	88
11.9.4	Factor de Riesgos Especiales del Proceso.....	89
11.9.5	Formularios del Índice DOW de fuego y explosión.....	91
11.9.6	Grado de peligrosidad .....	93
11.9.7	Radio y área de exposición .....	93
11.9.8	Factor de Daño .....	93
12	Legislación aplicable, reglamentos y códigos .....	94
12.1	Legislación general.....	94
12.2	Legislación ambiental.....	94
12.3	Legislación de seguridad e higiene.....	95

12.4	Normas, guías y códigos de diseño.....	96
13	Bibliografía.....	97

## 1 Objeto

El objeto del presente proyecto consiste en el diseño completo de una planta de producción de detergentes líquidos a partir de benceno y 1-dodeceno como materias primas, con una capacidad de producción de 120.000 t/año. La planta opera en continuo 330 días al año durante las 24 horas del día, contando con los días restantes para tareas de mantenimiento de la planta.

La planta se centrará en la producción de dodecilbencensulfonato de sodio teniendo lugar tres reacciones en el proceso; alquilación del benceno con dodeceno, sulfonación del alquilbenceno lineal con óleum y neutralización del ácido dodecilbencensulfónico con sosa cáustica (NaOH).

Por lo tanto, este diseño cuenta con los reactores de alquilación (R-101 A/B), que serán diseñados por la alumna Lucía Pardilla Fraguas, una columna de destilación a vacío (T-102), equipo que diseñará la alumna Noelia López García y el reactor de sulfonación (R-201), que llevará a cabo Antía Gándara Vieito.

El objetivo del presente proyecto se centra en realizar el Trabajo de Fin de Grado con el fin de obtener el título de graduado en Ingeniería Química de la Universidad de Santiago de Compostela.

## 2 Alcance

La complejidad que atañe el diseño riguroso de una planta química provoca la necesidad de una buena organización de los documentos necesarios. El presente proyecto cuenta con cinco documentos y varios anexos, en los que se expondrá la información necesaria para la realización de la planta.

En el Documento I. Memoria, se hará un estudio de las materias primas, productos, posibles alternativas de producción y se justificará la alternativa elegida. Además, se elaborará un estudio de mercado del producto deseado, así como un estudio de viabilidad técnica. Se llevará a cabo el emplazamiento de la planta teniendo en cuenta diversos factores y se implantará la instrumentación necesaria para el funcionamiento y control de la planta, además de llevar a cabo un estudio de seguridad. Todo esto teniendo en cuenta la legislación vigente actualmente.

El Documento II. Planos incluye todos los planos necesarios para realizar el proyecto. En el Documento III. Estudios con entidad se encuentra el estudio de impacto ambiental de la planta y el estudio de seguridad y salud, mientras que en el Documento IV. Pliego de condiciones se encuentra el pliego de condiciones del proyecto.

Por último, se elabora el Documento V. Presupuesto, en el que se encuentra el presupuesto inicial.

## 3 Justificación del proyecto

La elaboración de este proyecto se justifica alegando a distintas razones. La producción de detergentes líquidos es un mercado muy amplio y rentable económicamente, y perspectivas futuras del mercado proclaman buenas cifras respecto a este producto, puesto que la demanda cada vez es mayor.

El sector de los detergentes es un mercado altamente demandado, llegando a alcanzar un valor de mercado mundial de 33.300 millones de euros en 2023. Además, los detergentes aniónicos son cada vez más estudiados, ya que los alquilbencenos lineales son más biodegradables, convirtiéndose en uno de los principales componentes a la hora de la fabricación de detergentes. Además, se ha encontrado amplia información sobre el proceso y sobre la química de este, por lo que es viable y justificado el diseño del proyecto.

Se han estudiado diversas alternativas de procesos de producción, pero debido a la información encontrada se ha decidido continuar con la decisión de realizar la alquilación heterogénea con ácido tungstofosfórico soportado en SiO<sub>2</sub>, una columna de destilación a vacío para separar los hidrocarburos y la sulfonación homogénea con óleum al 22%.

El uso del dodecibencensulfonato de sodio no se limita únicamente al mercado de los detergentes, sino que también se encuentra en la fabricación de pesticidas, cosméticos, así como otros productos de limpieza. Esta variedad de aplicaciones permite el diseño de la planta con perspectivas futuras y la posibilidad de venta del dodecibencensulfonato de sodio para otros sectores.

La capacidad de la presente planta se especifica en 120.000 t/año debido a la actual demanda por parte de la población y teniendo como referencia la producción de otras plantas existentes a nivel nacional, como son la planta de Cepsa (San Roque) y Henkel.

La planta se sitúa en el Polígono Industrial del Norte de Tarragona, una zona altamente especializada en el sector químico, lo que permite su integración inmediata en un entorno industrial. La ubicación facilita el acceso a materias primas como el benceno, y dispone de infraestructuras logísticas eficientes, además de la disponibilidad de mano de obra cualificada.

#### **4 Estudio de alternativas**

Los detergentes son sustancias tensioactivas que se emplean para la limpieza en múltiples ámbitos como el doméstico o el industrial. A nivel químico, los agentes tensioactivos reducen la tensión superficial del agua, permitiendo que esta penetre mejor en las superficies a limpiar, facilitando la eliminación de la suciedad. A diferencia de los jabones tradicionales, de sal sódica de ácidos grasos, los detergentes actuales se formulan con surfactantes sintéticos que ofrecen un mejor rendimiento, estabilidad química y mayor biodegradabilidad. (1, 2)

Hasta la década de 1940 los jabones eran el tensioactivo universal. Pero durante la Segunda Guerra Mundial, por la escasez de aceites y grasas naturales, se empiezan a desarrollar los tensioactivos sintéticos. En la década de 1950 comienza el remplazo progresivo y definitivo del jabón por los tensioactivos de origen petroquímico, destacando inicialmente los sulfonatos de alquilbenceno de cadena ramificada (ABS) y posteriormente los sulfonatos de alquilbenceno lineales (LAS o LABS). (1)

En el diseño de una planta de producción de detergente, la elección del tensioactivo principal determina las materias y operaciones unitarias implicadas, el impacto ambiental y la viabilidad económica del proyecto. Los principales tipos de tensioactivos se pueden clasificar, en función de la naturaleza iónica de su grupo funcional, en cuatro grandes grupos: aniónicos, no iónicos, catiónicos y anfotéricos. (3)

Los tensioactivos aniónicos son los más empelados a nivel mundial en formulaciones de detergentes por su gran capacidad para eliminar grasa y suciedad, por su alta formación de espuma, un bajo coste relativo y disponibilidad de materias primas. Desde mediados de los años 60, el LAS comienza a remplazar progresivamente al ABS, debido principalmente a que su estructura lineal le confiere una biodegradabilidad superior, y por lo tanto una aceptabilidad ambiental mucho mejor. Hoy en día, el LAS es el tipo de sulfonato de alquilbenceno más utilizado por la industria de detergentes y sus aplicaciones están ampliadas a toda una gama de productos formulados. Presenta un rendimiento optimizado en términos de solubilidad, espuma, humectación, capacidad de limpieza y compatibilidad con otros componentes de los detergentes.

Además, cuenta con un marco regulatorio claro y favorable para su uso, pudiendo cumplir con los requisitos actuales de degradación e impacto sobre ecosistemas acuáticos. (1)

Desde el punto de vista del proceso, la producción de LAS parte de la alquilación del benceno con dodeceno para la formación del dodecilbenceno (LAB), seguido de una sulfonación para formar el ácido dodecilbencensulfónico (LABSA), que se neutraliza para la obtención final del dodecilbencenosulfonato de sodio (LAS O LABS). La composición química y el rendimiento en las distintas aplicaciones dependen de dos factores principales, la pureza de la materia prima y la técnica de sulfonación.

#### 4.1 Reacción de alquilación

El LAB determina la propiedad de tensión superficial del LAS. Consiste en una mezcla de isómeros cuya cantidad y tipo dependen del proceso de alquilación seleccionado para su producción. A nivel industrial el LAB se produce mediante la reacción de alquilación del benceno y dodeceno, catalizada por ácidos de tipo Lewis ( $\text{AlCl}_3$ , HF) o catalizadores sólidos ácidos. (1)

Tradicionalmente, la alquilación se realizaba utilizando catalizadores homogéneos como el cloruro de aluminio ( $\text{AlCl}_3$ ) o el ácido fluorhídrico (HF). De los dos, el ácido fluorhídrico es el catalizador homogéneo más utilizado, siendo el proceso de alquilación el que se muestra en la Figura 1. La primera fase es la reacción de alquilación, donde las olefinas se introducen al primer reactor junto con el benceno. La reacción catalizada por HF se lleva a cabo en fase líquida, a presión atmosférica y en un rango de temperatura cercano a los  $50^\circ\text{C}$ . Después se produce la separación de fases mediante un decantador (*settler*), donde se separa la fase ácida (HF) de la orgánica. Estas dos primeras etapas se repiten para mejorar la conversión. También cuenta con una regeneración y separación del HF. Por último, una separación del producto mediante una columna para la extracción del benceno, una columna para las parafinas y una columna para el LAB y los alquilatos pesados (HAB). (1)

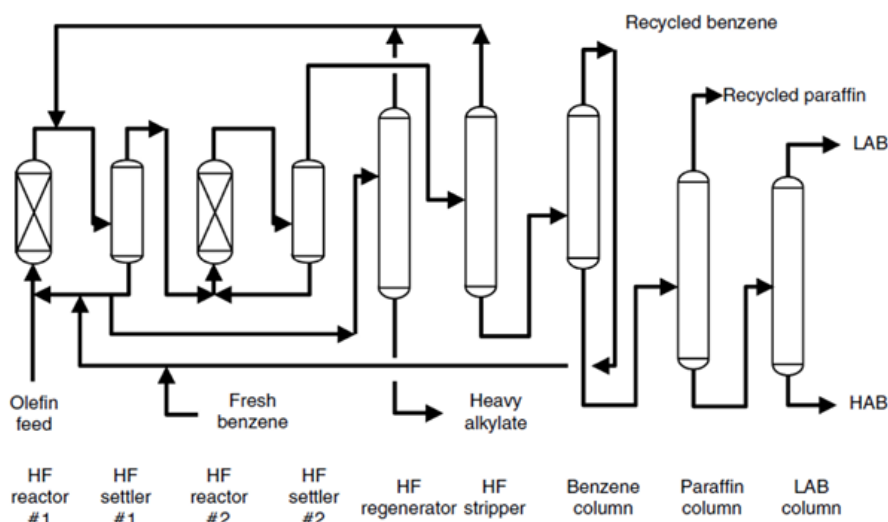


Figura 1. Diagrama del proceso de alquilación con ácido fluorhídrico HF. Fuente: (1)

Actualmente, este proceso presenta importantes desventajas al emplear ácido fluorhídrico como catalizador. Algunas son la alta corrosividad, la generación de residuos peligrosos, la complejidad de separación y reutilización del catalizador, y los riesgos de su manipulación. Por ello, fue impulsada la búsqueda de tecnologías más limpias y sostenibles. Desde 1995, empresas como UOP (*Universal Oil Products*) y Petresa (antigua filial de CEPSA) introducen el uso de catalizadores sólidos ácidos, marcando el inicio de la transición hacia sistemas de catálisis

heterogénea. Entre las principales opciones destacan las arcillas activadas, las zeolitas, los fluoruros de sílice, la alúmina y los heteropoliácidos. Este proceso conocido como Detal se muestra en la Figura 2. (4)

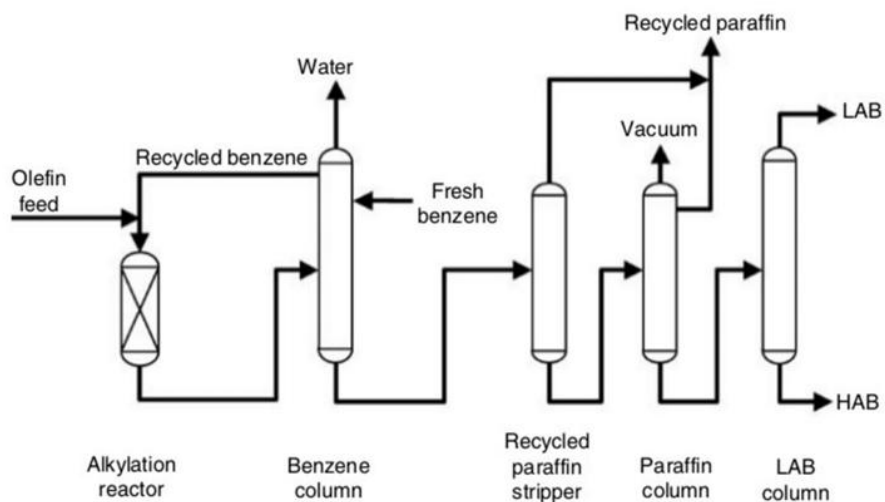


Figura 2. Diagrama del proceso Detal. Fuente:(1)

El proceso Detal cuenta con un reactor de alquilación catalizado por un sólido ácido, que se alimenta con olefinas como el doceno, y con benceno. El segundo equipo es una columna de destilación para recuperar el benceno. También se cuenta con un equipo de *stripping* y una columna que opera al vacío para separar y recircular el dodeceno. Por último, la separación final del LAB de los alquilatos pesados (HAB). (1)

Para la selección del catalizador más adecuado se tiene en cuenta principalmente el grado de conversión global, las condiciones de operación, la facilidad de regeneración y la estabilidad del material. Por ello, se selecciona un catalizador heterogéneo como en el proceso Detal.

En los últimos años, uno de los catalizadores heterogéneos que ha despertado mayor interés es el ácido tungstofosfórico ( $H_3PW_{12}O_{40}$ ) soportado sobre sílice. Este material pertenece a la familia de los heteropoliácidos. Al estar soportado en fase sólida, el catalizador es estable, reutilizable y adecuado para reactores de lecho fijo, logrando una conversión completa y una buena accesibilidad a los sitios activos gracias a su elevada área superficial. (5)

Por estos motivos, en el presente proyecto se selecciona el ácido tungstofosfórico soportado en sílice como catalizador para el reactor de alquilación, en línea con los objetivos de eficiencia, rendimiento y menor impacto ambiental del proceso global de producción de detergente.

## 4.2 Reacción de sulfonación

La sulfonación del dodecibenceno como LAB para obtener ácido dodecibencensulfónico (LABSA) requiere de un agente sulfonante capaz de introducir el grupo sulfonilo ( $-SO_3H$ ). El trióxido de azufre puro ( $SO_3$ ) permite altas conversiones, pero su extrema reactividad, toxicidad y comportamiento fuertemente exotérmico exigen un control muy riguroso, equipos especializados y sistemas de seguridad avanzados. Para moderar estos efectos, se emplea el  $SO_3$  en forma diluida. En la Figura 3 se muestran los principales compuestos diluyentes del trióxido de azufre. (6)

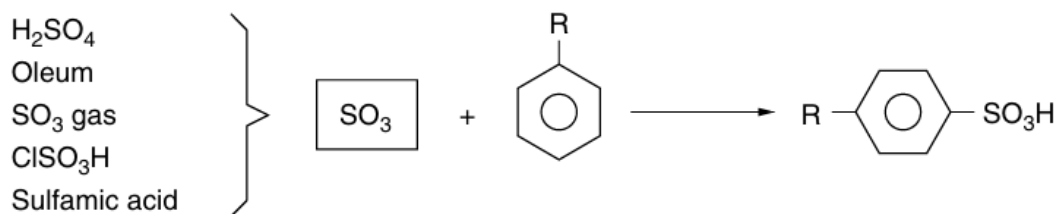


Figura 3. Principales compuestos diluyentes del  $\text{SO}_3$ . Fuente:(1)

Entre los agentes de dilución más comunes se encuentran el amoníaco, el ácido clorhídrico, el agua y el aire seco. Sin embargo, solo dos de las opciones resultan viables para la producción de tensioactivos, el uso de  $\text{SO}_3$  en fase gas diluido en aire seco y el óleum, una solución de  $\text{SO}_3$  en ácido sulfúrico. El uso directo de ácido sulfúrico no es habitual, debido a su baja reactividad, lo que obliga a operar a temperaturas más altas y provoca mayor formación de subproductos. (6)

En la Figura 4 se muestra el proceso de sulfonación con trióxido de azufre en fase gas disuelto en aire seco. El reactor de sulfonación para esta alternativa es un reactor de película descendente multitubular, donde se introduce el dodecilbenceno como materia prima y una corriente de  $\text{SO}_3$  diluido en aire seco como agente sulfonante. Tras la reacción, se emplea un separador de fases gas-líquido y un ciclón. La fase líquida, que contiene el ácido dodecilbencensulfónico (LABSA), pasa a un recipiente de digestión (*aging vessel*), donde se estabiliza el producto. A continuación, se realiza la etapa de neutralización. (7)

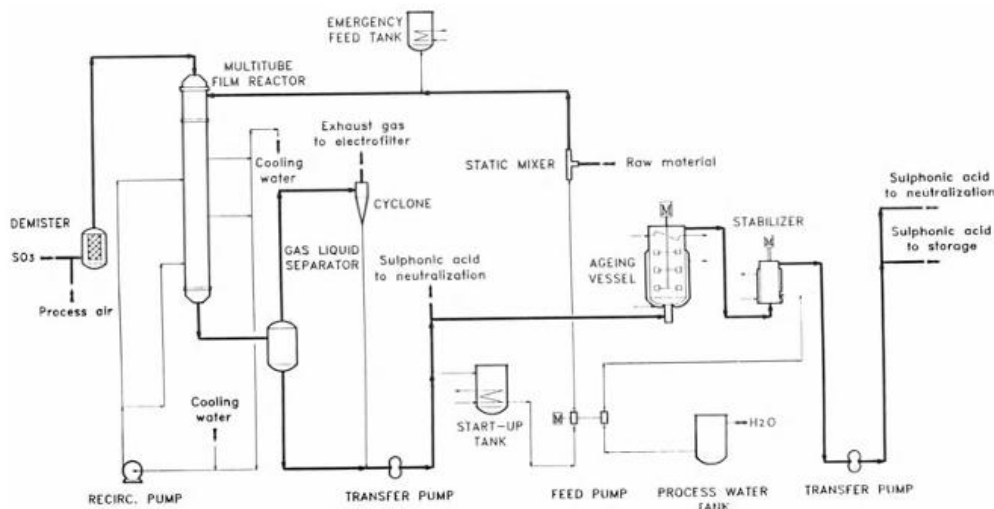


Figura 4. Diagrama del proceso de sulfonación con trióxido de azufre en aire. Fuente: (7)

El proceso de sulfonación con óleum se basa en un sistema de tanque agitado que opera homogéneamente en fase líquida, como se muestran en la Figura 5. El porcentaje másico del óleum puede variar entre el 20 y el 30%. La reacción se lleva a cabo entre el alquilato (dodecilbenceno) y el óleum, una disolución líquida de trióxido de azufre ( $\text{SO}_3$ ) en ácido sulfúrico concentrado. Ambos reactivos se introducen en un reactor de sulfonación agitado, donde la mezcla se mantiene homogénea y bajo refrigeración para controlar la fuerte exotermicidad de la reacción. El producto pasa por un decantador para separar el ácido. Por último, la corriente principal de ácido dodecilbencensulfónico pasa al reactor de neutralización. (6)

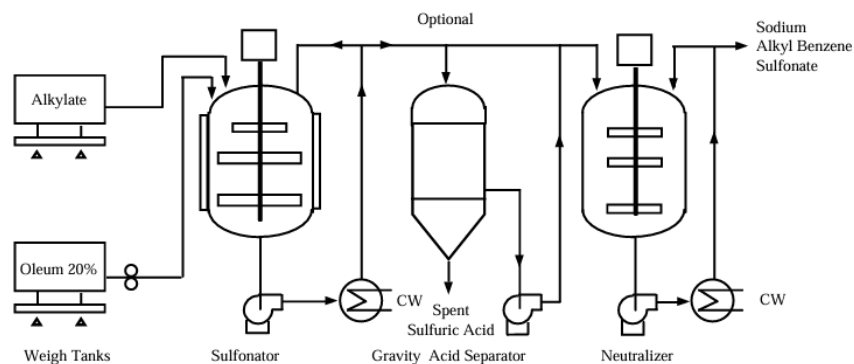


Figura 5. Diagrama del proceso de sulfonación con óleum. Fuente: (6)

Para la selección se tiene en cuenta que el  $\text{SO}_3$  gaseoso es altamente reactivo, tóxico y difícil de dosificar, mientras que el óleum ofrece un mayor control del proceso, ya que puede ser bombeado, almacenado y manipulado con equipos convencionales. La sulfonación con  $\text{SO}_3$  en aire seco también requiere el uso de reactores especializados de película descendente multitubo, con diseños complejos, elevados requerimientos de control térmico y una inversión inicial considerablemente mayor. Por todo ello, el óleum se considera la alternativa más adecuada para este proyecto por su equilibrio entre reactividad, facilidad de manejo, coste y compatibilidad con el diseño del proceso seleccionado, manteniendo al mismo tiempo un alto rendimiento en la producción de LABSA.

### 4.3 Reacción de neutralización

La reacción de neutralización entre un agente alcalino y un ácido orgánico, el LABSA, se produce tras la sulfonación. Entre los agentes neutralizadores más empleados se encuentran la sosa cáustica ( $\text{NaOH}$ ) y el carbonato sódico ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ), mientras que otros, como las soluciones de amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) o las mono- y dietanolaminas (MEA), se utilizan con menor frecuencia. (7)

La selección del agente alcalino adecuado influye directamente en la eficiencia de la reacción, la seguridad operativa y la compatibilidad del producto con el resto de los componentes de la formulación del detergente.

El hidróxido sódico es el agente neutralizante más empleado en la industria de los detergentes, debido a su alta reactividad, bajo coste y una amplia disponibilidad. Permite la obtención directa de la sal sódica del tensioactivo, el LAS, con un alto grado de conversión y sin formación de subproductos secundarios. La desventaja de este agente es que presenta un calor de neutralización elevado, por lo que es necesario incorporar un sistema de control térmico eficiente para evitar sobrecalentamientos durante la reacción. (7)

El carbonato sódico es una alternativa más segura por ser menos exotérmica, pero la reactividad es inferior, dando lugar a una neutralización más lenta. Además, puede generar dióxido de carbono o sales adicionales. (7)

Las soluciones de amoníaco permiten obtener sales amónicas con buenas propiedades espumantes, pero su volatilidad, olor característico y dificultad de control del pH limitan su aplicabilidad. La monoetanolamina presenta un coste mayor y requiere condiciones de manipulación específicas. Su uso se limita más a formulaciones cosméticas. (7)

Tras comparar todas las alternativas, se selecciona el hidróxido sódico ( $\text{NaOH}$ ) como agente neutralizante por su excelente comportamiento en términos de rendimiento, compatibilidad

industrial y coste. Su empleo garantiza la obtención de un producto final de alta calidad, con un proceso robusto y fácilmente integrable en la línea de producción continua de LAS.

En cuanto a la tecnología asociada a este reactor, una mezcla adecuada entre el ácido orgánico y la base es fundamental para favorecer una neutralización rápida y evitar fenómenos indeseados. Esta etapa requiere trabajar con reactores de tanque agitado con sistemas de mezclado adecuados. Además, es necesario un control de temperatura para evitar variaciones térmicas, ya que estas pueden alterar significativamente la estructura reológica de la pasta, originando fenómenos como la formación de geles. Por ello, el control de temperatura durante la neutralización es un aspecto crítico del proceso. (7, 8)

#### 4.4 Aditivos

La formulación final del detergente tipo LABS incorpora una serie de aditivos funcionales que permiten transformar el tensioactivo en un producto de detergente comerciable. Estos aditivos modifican las propiedades físicas del sistema, como la viscosidad, la estabilidad y la claridad. Además, mejoran la eficacia frente a suciedad, grasas y aguas duras. En el caso de los detergentes líquidos es necesario que la mezcla sea homogénea y estable a temperatura ambiente. Los aditivos más importantes son los coadyuvantes tensioactivos, los secuestrantes y dispersantes, los hidrotropos y los alcalinizantes. (9)

Los coadyuvantes tensioactivos no iónicos refuerzan la acción del tensioactivo principal, estabilizan la espuma y regulan la viscosidad del sistema. Para esta formulación se selecciona la dietanolamina de coco, un derivado de ácidos grasos muy empleado en productos domésticos por compatibilidad con los compuestos involucrados y bajo impacto sobre la piel. La dietanolamina de coco es ampliamente recomendada, mientras que otros coadyuvantes como los alcoholes etoxilados pueden ser más caros o generar una espuma excesiva. (1, 2)

Los secuestrantes y dispersantes de tetrapotasio permiten inactivar los iones causantes de la dureza del agua ( $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ) y mantener las partículas de suciedad en suspensión, evitando que se depositen sobre las superficies durante el lavado. Se selecciona el pirofosfato de tetrapotasio, debido a que los pirofosfatos son menos corrosivos que otros secuestrantes como los tripolifosfatos. (1, 9)

Los hidrotropos sirven para mantener en solución los componentes poco solubles, evitando la separación de fases o la cristalización en las formulaciones concentradas. En este caso, se utiliza tolueno sulfonato de potasio, que garantiza la estabilidad y transparencia del producto. Otros hidrotropos, como el xileno sulfonato de sodio, pueden ser menos efectivos en ciertas formulaciones o tener un mayor impacto ambiental. (9)

Los alcalinizantes elevan y estabilizan el pH del medio, mejorando la capacidad limpiadora y la eliminación de grasas. Para esta función, se selecciona el metasilicato de sodio como alcalinizante que además proporciona un efecto anticorrosivo sobre las superficies metálicas. Existen otras bases, pero presentan inconvenientes. El hidróxido de sodio aumenta el riesgo de corrosión, mientras que el carbonato de sodio es menos efectivo en la eliminación de las grasas pesadas. (9)

Por último, la composición final se ajusta a una distribución másica típica que se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1. Composición final del detergente. Fuente:(9)

Compuestos	Composición másica
LAS e impurezas	16,5
Dietanolamina de coco	7,5
Pirofosfato de tetrapotasio	15
Tolueno sulfonato de potasio	7,5
Metasilicato de sodio	4,5
Agua	49

#### 4.5 Alternativa seleccionada

Tras el análisis expuesto de materias primas, rutas de producción y opciones de aditivos, se selecciona una formulación de detergente líquido tipo LABS a partir de la alquilación de benceno con dodeceno, la sulfonación con óleum y la neutralización con una disolución de hidróxido de sodio. Esta opción ofrece un equilibrio entre rendimiento, sostenibilidad y viabilidad técnica.

En la etapa de alquilación, se emplea un catalizador sólido ácido de tipo heteropoliácido (ácido tungstofosfórico  $H_3PW_{12}O_{40}$ ) soportado en sílice, por su elevada conversión, selectividad hacia estructuras biodegradables y bajo impacto ambiental frente a catalizadores tradicionales como HF o  $AlCl_3$ . Para la sulfonación, se selecciona el óleum al 22 % como agente sulfonante, una solución líquida de trióxido de azufre más segura y manejable que el  $SO_3$  en aire seco, y compatible con reactores de tanque agitado y condiciones operativas menos exigentes. La etapa de neutralización se lleva a cabo con hidróxido de sodio al 20 %, por ser el agente alcalino más empleado en la industria por su bajo coste, alta eficiencia y facilidad de integración en procesos continuos.

Por último, se diseña la formulación del detergente líquido incorporando aditivos funcionales para garantizar estabilidad, eficacia y compatibilidad. Se selecciona la dietanolamina de coco como coadyuvante no iónico, el pirofosfato de tetrapotasio como secuestrante de dureza y dispersante de partículas, el tolueno sulfonato de potasio como hidrotropo y el metasilicato de sodio como alcalinizante y protector frente a la corrosión. Esta formulación permite obtener un detergente líquido doméstico de alto rendimiento, fácilmente escalable y con una composición típica de las prácticas industriales actuales.

### 5 Materias primas, producto y subproductos

Una vez seleccionadas las alternativas del proceso, es importante conocer las propiedades y aspectos más importantes de las materias primas, del producto deseado y de los subproductos generados para saber si tienen salida económica.

#### 5.1 Materias primas

Las materias primas del proceso son el benceno y dodeceno que se introducen para la reacción de alquilación, la corriente de óleum 22% para la reacción de sulfonación, el agua para la separación en el decantador y la dilución en el tanque de mezcla final, y el hidróxido de sodio para la reacción de neutralización. Además, para la formulación final del detergente se le añaden los aditivos necesarios.

### 5.1.1 Benceno

El benceno, de fórmula química  $C_6H_6$ , se presenta como un líquido incoloro o ligeramente amarillo, de olor dulce característico, volátil e inflamable. Es uno de los compuestos aromáticos más relevantes a nivel industrial, por emplearse en una gran cantidad de procesos químicos. Estructuralmente está constituido por un anillo hexagonal de carbono. Esta estructura le confiere una estabilidad química denominada como estabilidad aromática. (10, 11)

Está presente de forma natural en el petróleo crudo y se obtiene principalmente como subproducto en los procesos de reformado catalítico y craqueo en refinerías. Su uso industrial más común es de disolvente o compuesto intermedio en la producción de otros compuestos químicos. (10)

#### Propiedades físicas

El benceno presenta una densidad menor que la del agua y es ligeramente soluble en ella, por lo que tiende a flotar en su superficie. Sus vapores son más densos que el aire, por lo que presenta riesgo de acumulación en zonas bajas y mal ventiladas. Es una sustancia peligrosa que puede afectar al sistema nervioso, además es reconocido por la ECHA (Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas) como un compuesto cancerígeno. (11)

Las propiedades físicas más relevantes del benceno se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2. Propiedades físicas del detergente. Fuente: (12)

Propiedad	Valor
Peso molecular, $g/mol$	78,11
Densidad del líquido (25°C), $kg/m^3$	872,16
Viscosidad (25°C y 1,01 bar), $cP$	0,604
Punto de fusión (1,01 bar), °C	6
Punto de ebullición (1,01 bar), °C	80,08
Calor de vaporización, $kJ/kg$	394,2
Calor específico (líquido, 25°C), $kJ/kg \cdot ^\circ C$	1,74
Temperatura crítica, °C	288,9
Presión crítica, $bar$	48,9

#### Propiedades químicas

El benceno es estable químicamente por su estructura resonante, característica del sistema aromático. En condiciones controladas puede reaccionar en sustituciones electrofílicas aromáticas, como la nitración, halogenación, alquilación y acilación. Derivado de estas reacciones, el principal peligro químico del benceno es que reacciona de forma violenta con oxidantes, ácido nítrico y sulfúrico, y con los halógenos. Por lo tanto, genera peligro de incendio y explosión. (11)

#### Aplicaciones

El benceno es una materia prima básica en la industria petroquímica. La principal aplicación de este compuesto es la síntesis para dar lugar a productos intermedios, como puede ser el estireno, el óxido de propileno, polioles o glicoles propilénicos. Las principales industrias que trabajan con benceno son de producción de plásticos, de producción de nylon y de detergentes. (13, 14)

### Almacenamiento y transporte

El benceno se almacena a presión atmosférica a una temperatura de entre 15 y 25°C. Se emplean recipientes metálicos cerrados en un entorno seco, ventilado y alejado de fuentes de ignición, preferiblemente en atmósfera inerte. El transporte puede ser en cisternas por carretera o ferrocarril, por buques o por oleoducto. (11)

#### 5.1.2 Dodeceno

El dodeceno, de fórmula química  $C_{12}H_{24}$ , es un líquido incoloro de olor característico. Puede presentarse como una mezcla de isómeros, aunque el más empleado industrialmente es el 1-dodeceno. Este compuesto presenta un doble enlace terminal que le confiere una alta reactividad en procesos de alquilación. Existen distintas rutas de obtención según su estructura. Los isómeros ramificados suelen producirse por polimerización catalítica del propileno, formando oligómeros como el tetrámero. En cambio, el isómero lineal 1-dodeceno se obtiene por separación con tamices moleculares a partir de querosenos o fracciones del petróleo, por oligomerización de etileno o por craqueo térmico de ceras parafínicas. (1, 15, 16)

#### Propiedades físicas

El dodeceno es insoluble en agua con una densidad inferior, por lo que tiende a flotar en su superficie. Tiene una viscosidad baja y un punto de ebullición elevado, características comunes en hidrocarburos de cadena larga. Las principales propiedades físicas se muestran en la Tabla 3.

Tabla 3. Propiedades físicas del dodeceno. Fuente: (17–19)

Propiedad	Valor
Peso molecular, <i>g/mol</i>	168,32
Densidad del líquido (25°C), <i>kg/m<sup>3</sup></i>	755,21
Viscosidad (25°C y 1,01 bar), <i>cP</i>	1,199
Punto de fusión (1,01 bar), °C	-35
Punto de ebullición (1,01 bar), °C	213
Calor de vaporización, <i>kJ/kg</i>	270,6
Calor específico (líquido, 25°C), <i>kJ/kg·°C</i>	360,7
Temperatura crítica, °C	365
Presión crítica, <i>bar</i>	27

#### Propiedades químicas

El doble enlace terminal del 1-dodeceno hace que sea un compuesto altamente reactivo frente a compuestos electrófilos, por lo que es adecuado para reacciones de alquilación de Friedel-Crafts. Los problemas químicos de este compuesto son que reacciona con oxidantes fuertes, halógenos y ácidos inorgánicos, atacando al caucho, pintura y materiales de revestimiento. (20)

#### Aplicaciones

El uso principal es como compuesto intermedio en la fabricación de detergentes. Pero también se emplea en la producción de lubricantes sintéticos, aditivos para combustibles, agentes plastificantes e intermedios para resinas o perfumes. (20)

### Almacenamiento y transporte

El dodeceno se almacena a presión atmosférica en un rango de temperatura de entre los 10 y 30°C. Se utilizan recipientes metálicos, preferiblemente de acero al carbono o inoxidable. El transporte se realiza en cisternas por carretera, ferrocarril o buques. (20)

#### 5.1.3 Óleum

El óleum, también conocido como ácido sulfúrico fumante o ácido disulfúrico, es un líquido aceitoso, incoloro o ligeramente amarillento. Consiste en la disolución del trióxido de azufre en ácido sulfúrico para disminuir la alta reactividad del SO<sub>3</sub>, y el difícil manejo de este compuesto. Aunque, de igual forma, se presenta como un líquido corrosivo, denso y altamente reactivo, que debe manipularse bajo estrictas condiciones de seguridad debido a su toxicidad y peligrosidad en contacto con la humedad o el agua. (7)

#### Propiedades físicas

El óleum 20-30 % tiene una densidad mayor que la del agua y alta viscosidad. Es completamente miscible con agua, aunque su disolución es fuertemente exotérmica y puede generar vapores más densos que el aire de SO<sub>3</sub> y H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. En la Tabla 4 se muestran las principales propiedades físicas.

Tabla 4. Propiedades físicas del óleum 20-30%. Fuente: (21)

Propiedad	Valor
Peso molecular, <i>g/mol</i>	93,46
Densidad del líquido (25°C), <i>kg/m<sup>3</sup></i>	1.920
Viscosidad (25°C y 1,01 bar), <i>cP</i>	11,7
Punto de fusión (1,01 bar, 20-30% SO <sub>3</sub> ), °C	2-21
Punto de ebullición (1,01 bar, 20-30% SO <sub>3</sub> ), °C	116
Calor específico (líquido, 25°C), <i>kJ/kg·°C</i>	3,08

#### Propiedades químicas

El óleum es un oxidante fuerte que reacciona con compuestos reductores, combustibles y materiales orgánicos. Se descompone por calentamiento produciendo gases tóxicos y corrosivos incluyendo óxidos de azufre. (21)

#### Aplicaciones

La aplicación principal del óleum es la sulfonación orgánica de compuestos, como es el caso de la producción de detergentes. También se emplea en la industria de colorantes, pigmentos, explosivos, en procesos de nitración y en síntesis de ácidos intermedios para fármacos. (22)

#### Almacenamiento y transporte

El óleum se almacena a presión atmosférica y temperatura ambiente, en recipientes cerrados de acero inoxidable o aleaciones resistentes a corrosión. Es fundamental evitar la humedad, ya que el contacto con agua genera una reacción violenta y liberación de trióxido de azufre. Su transporte se realiza en cisternas especiales por carretera o ferrocarril. (22)

#### 5.1.4 Agua

El agua es un líquido incoloro e inodoro, se utiliza como materia prima en el proceso de producción del detergente tipo LABS, formando parte del producto y subproducto.

### Propiedades físicas

Las propiedades físicas estándar del agua industrial se muestran en la Tabla 5.

Tabla 5. Propiedades físicas del agua. Fuente: (23)

Propiedad	Valor
Peso molecular, <i>g/mol</i>	93,46
Densidad del líquido (25°C), <i>kg/m<sup>3</sup></i>	998
Viscosidad (20°C y 1,01 bar), <i>cP</i>	1
Punto de fusión (1,01 bar), °C	0
Punto de ebullición (1,01 bar) °C	100
Calor de vaporización, <i>kJ/kg</i>	2.257
Calor específico (líquido, 25°C), <i>kJ/kg·°C</i>	4,18
Temperatura crítica, °C	374,14
Presión crítica, <i>bar</i>	220,64

### Propiedades químicas

El agua que se emplea debe estar libre de impurezas iónicas y de partículas que interfieran con las materias sensibles. Una alta concentración de iones de  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  o  $\text{Fe}^{3+}$  pueden provocar la precipitación, cambio en el color o disminución del rendimiento del producto. (9)

### Aplicaciones

El agua es una de las materias primas más utilizadas en la industria. Puede formar parte de las reacciones implicadas, en disoluciones, o en sistemas de calentamiento o refrigeración, limpieza, etc. En este proyecto participa como disolvente del producto final, representando el 49% de la composición, y en el decantador para facilitar la separación entre la fase orgánica (LABSA) y el ácido sulfúrico. (9)

### Almacenamiento y transporte

El agua es necesaria para el proceso, para el uso en el decantador y en el tanque de mezcla final, formando parte directa de los productos comerciables. Por lo tanto, el agua debe cumplir especificaciones técnicas controladas. Para ello se emplea agua de la red industrial tratada, suministrada desde la infraestructura general de servicios de planta. En caso de que sea necesario para mantener requisitos de calidad se puede emplear agua desmineralizada para evitar interferencias con tensioactivos o secuestrantes. (9)

#### 5.1.5 Hidróxido de sodio 20%

El hidróxido de sodio, también conocido como sosa cáustica, es una base fuerte de uso extendido en la industria para reacciones de neutralización. En disolución acuosa al 20% en peso se presenta como un líquido incoloro más denso que el agua. La disolución permite una reactividad química alta facilitando la manipulación, el control térmico y la compatibilidad del hidróxido de sodio con el resto de los compuestos. (24)

### Propiedades físicas

La disolución de NaOH al 20% presenta propiedades intermedias entre el agua y el hidróxido de sodio puro. Su manipulación requiere precauciones por su carácter corrosivo, debe manejarse con

condiciones específicas y materiales resistentes a medios alcalinos. En la Tabla 6 se muestran las principales propiedades físicas.

Tabla 6. Propiedades físicas de la disolución de NaOH 20%. Fuente: (25)

Propiedad	Valor
Peso molecular, <i>g/mol</i>	20,24
Densidad del líquido (25°C, 20-30% NaOH), <i>kg/m<sup>3</sup></i>	1.353,00
Viscosidad (25°C y 1,01 bar), <i>cP</i>	1,06
Punto de fusión (1,01 bar, 20-30% NaOH), °C	0,00
Punto de ebullición (1,01 bar, 20-30% NaOH) °C	118,00
Calor específico (líquido, 25°C), <i>kJ/kg·°C</i>	3,50

### Propiedades químicas

El hidróxido de sodio en disolución acuosa está disociado en sus iones Na<sup>+</sup> y OH<sup>-</sup>, por lo que presenta un carácter altamente básico. La disolución al 20% presenta la mayoría de las propiedades reactivas del hidróxido de sodio concentrado, pero con mejor manejo térmico y operacional, minimizando los riesgos de sobrecalentamiento. (25)

### Aplicaciones

La disolución de hidróxido de sodio al 20%, o porcentajes similares, se emplea en diversas aplicaciones industriales donde no es necesario una concentración más alta, ya que se pretende reducir el riesgo de corrosión, y facilitar el proceso y manejo. Se usa en la limpieza de equipos, en la recuperación de disoluciones alcalinas y de metales de residuos industriales, en el tratamiento y neutralización de aguas residuales, y en etapas intermedias de la industria textil, del papel, farmacéutica y de los detergentes. (24)

### Almacenamiento y transporte

El hidróxido de sodio al 20% se almacena a presión atmosférica en depósitos compatibles con soluciones alcalinas, manteniendo la temperatura entre los 10 y los 30°C, para evitar cristalización o evaporación del agua. El transporte se realiza en cisternas o contenedores por carretera o ferrocarril.

#### 5.1.6 Aditivos

Es necesario conocer alguna de las propiedades más importantes de los aditivos de la formulación de detergente seleccionado. A continuación, se presenta cada uno de ellos.

##### 5.1.6.1 Dietanolamina de coco

La dietanolamina de coco, también conocida como cocamida DEA, es un derivado no iónico obtenido por amidación de ácidos grasos del aceite de coco con dietanolamina. Es un líquido viscoso de color ámbar, con olor característico y soluble en agua. En las formulaciones de detergentes se emplea también como un coadyuvante tensioactivo, estabilizante de espuma y espesante, que mejora las propiedades químicas del detergente final. (9)

### Propiedades físicas

La dietanolamina destaca por su alta viscosidad y buena solubilidad en medio acuoso. Las principales propiedades se recogen en la Tabla 7.

Tabla 7. Propiedades físicas de la dietanolamina de coco. Fuente: (26)

Propiedad	Valor
Peso molecular, $g/mol$	288,45
Densidad del líquido (20°C), $kg/m^3$	998,60
Viscosidad (20°C), $cP$	1.357
Punto de fusión (1,01 bar), °C	-7
Punto de ebullición (1,01 bar) °C	269

### Propiedades químicas

La DEA presenta una estructura anfifílica, como se muestra en la Figura 6, contiene una larga cadena hidrocarbonada (de entre 12 y 16 carbonos) y grupos polares funcionales, una amida y dos hidroxilos. Esta estructura le permite actuar como tensioactivo no iónico, compatible con tensioactivos aniónicos como el LABS, estabilizar la espuma gracias a su capacidad de reforzar la película tensioactiva, y de aumentar la viscosidad del sistema mejorando la textura del detergente. Además, presenta respecto a otros aditivos una baja irritabilidad dérmica adecuada para productos de detergencia. (9)

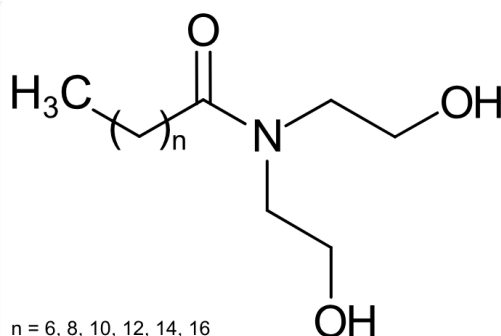


Figura 6. Estructura de la dietanolamina de coco. Fuente: (26)

### Aplicaciones

La DEA se emplea como un aditivo con varias funciones en la industria de los detergentes, de los productos de baño como champús o geles, en la cosmética, limpiadores y lubricantes. (26)

### Almacenamiento y transporte

La DEA se almacena a presión atmosférica en recipientes metálicos o plásticos resistentes, la temperatura recomendada es entre los 15 y los 30°C, para evitar que el producto se vuelva viscoso a temperaturas más bajas. El transporte se realiza en bidones o cisternas según el volumen y no requiere condiciones especiales, aparte de las buenas prácticas para productos químicos.

#### 5.1.6.2 Pirofosfato de tetrapotasio

El pirofosfato de tetrapotasio, con fórmula química  $K_4P_2O_7$ , es una sal inorgánica blanca, cristalina y muy soluble en agua. En soluciones acuosas actúa como agente secuestrante, dispersante y estabilizante, y se emplea en detergentes como aditivo multifuncional que mejora el rendimiento del tensioactivo principal en presencia de agua dura. Su incorporación permite mantener la eficacia del lavado al evitar la precipitación de sales de calcio y magnesio. (27)

### Propiedades físicas

El pirofosfato de tetrapotasio presenta alta densidad y estabilidad térmica. Es altamente soluble en agua, lo que permite su incorporación directa en formulaciones líquidas. En la Tabla 8 se presentan las principales propiedades físicas. Si se calienta por encima de su punto de fusión se descompone en otros fosfatos o forma pirofosfatos condensados, liberando gases como agua o compuestos de fósforo.

Tabla 8. Propiedades físicas del pirofosfato de tetrapotasio. Fuente: FDS (Fichas de Seguridad)

Propiedad	Valor
Peso molecular, $g/mol$	330,33
Densidad (20°C), $kg/m^3$	2.330,00
Punto de fusión (1,01 bar), °C	1.090,00

### Propiedades químicas

El pirofosfato de tetrapotasio es una sal de ácido pirofosfórico neutra, con buena estabilidad química y térmica, cuya estructura se muestra en la Figura 7. En disolución libre, los iones pirofosfato  $P_2O_7^{4-}$  actúan como quelantes de cationes multivalentes, lo que implica que se evita la formación de incrustaciones y precipitados que interfieren en la acción de tensioactivos.

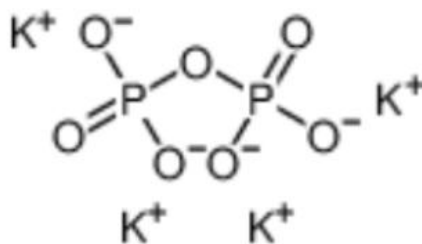


Figura 7. Estructura del pirofosfato de tetrapotasio. Fuente: (27)

### Aplicaciones

El pirofosfato de tetrapotasio se usa como secuestrante, emulsionante y regulador de pH. En la industria alimentaria se emplea para mejorar la textura de productos cárnicos, mariscos y productos procesados. También en la industria de los detergentes y limpiadores para mejorar la eficacia de limpieza y prevenir depósitos minerales. Además, en el tratamiento de aguas se usa para ablandarlas y evitar incrustaciones. También tiene aplicaciones en cosmética y farmacia. (28)

### Almacenamiento y transporte

El pirofosfato de tetrapotasio se almacena en contenedores herméticos en forma de sólido. Debe estar en un lugar fresco, seco y bien ventilado, para estar protegido de la humedad. El transporte se realiza en sacos o contenedores a granel evitando el contacto con agua o ambientes húmedos.

#### 5.1.6.3 Tolueno sulfonato de potasio

El tolueno sulfonato de potasio es la sal potásica del ácido p-toluensulfónico. Es un sólido cristalino de color beige y soluble en agua. Su uso facilita la formulación de detergentes líquidos

concentrados, evitando la precipitación o separación de fases en presencia de altas cargas de tensioactivos o sales. (29)

### Propiedades físicas

El tolueno sulfonato de potasio es un sólido orgánico de baja peligrosidad, estable y con buena compatibilidad con los componentes de la formulación del detergente. En la Tabla 9 se muestran las principales propiedades.

Tabla 9. Propiedades físicas del tolueno sulfonato de potasio. Fuente: FDS

Propiedad	Valor
Peso molecular, $g/mol$	210,30
Densidad (20°C), $kg/m^3$	1.340
Punto de fusión (1,01 bar), °C	227

### Propiedades químicas

Es una sal orgánica estable, no oxidante, no inflamable, con alta solubilidad en agua y un pH neutro en disolución diluida. No reacciona peligrosamente con los componentes habituales del detergente. Su grupo sulfonato ( $-SO_3^-$ ) le permite interaccionar con tensioactivos, mientras que el anillo aromático le confiere cierta hidrofiliidad intermedia, que favorece su función como intermediario de solubilidad. (29)

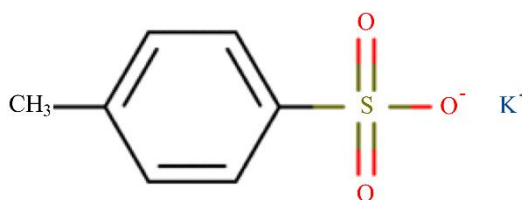


Figura 8. Estructura del tolueno sulfonato de potasio. Fuente:(29)

### Aplicaciones

Se emplea en la industria de los detergentes como hidrótopo, como agente que mejora la solubilidad y estabilidad. Su función principal es evitar la separación de fases logrando una formulación homogénea. Además, contribuye a mantener una viscosidad adecuada y facilitar la claridad del producto final. También se usa en la industria de la cosmética, productos de limpieza y en la farmacéutica. (9, 29)

### Almacenamiento y transporte

El tolueno sulfonato de tetrapotasio se almacena en forma sólida en envases bien cerrados resistentes a la humedad y ubicados en un lugar fresco y ventilado. Se transporta en sacos o bidones asegurando que se mantenga seco durante todo el trayecto.

#### 5.1.6.4 Metasilicato de sodio

El metasilicato de sodio ( $Na_2SiO_3$ ) es una sal inorgánica soluble en agua. Es un sólido en forma de polvo blanco que presenta un fuerte carácter alcalino. Por ello, se emplea en la formulación de detergentes como agente alcalinizante, reforzador de limpieza e inhibidor de corrosión. (9)

### Propiedades físicas

El metasilicato de sodio es un material estable, de alta densidad y solubilidad en agua. Las propiedades físicas más relevantes se presentan en la Tabla 10.

Tabla 10. Propiedades físicas del metasilicato de sodio. Fuente: FDS

Propiedad	Valor
Peso molecular, $g/mol$	112,06
Densidad (20°C), $kg/m^3$	2.610
Punto de fusión (1,01 bar), °C	1.090

### Propiedades químicas

El metasilicato de sodio, como se menciona, es un compuesto fuertemente alcalino. En disolución libera iones silicato y sodio, generando un entorno básico ideal para la acción de tensioactivos aniónicos como el LABS. Esta alcalinidad favorece la saponificación de grasas, la desnaturalización de proteínas y la dispersión de sólidos. Además, su contenido en silicio le permite formar capas pasivadas sobre metales como el acero, reduciendo la corrosión. Se muestra su estructura química en la Figura 9. (30, 31)

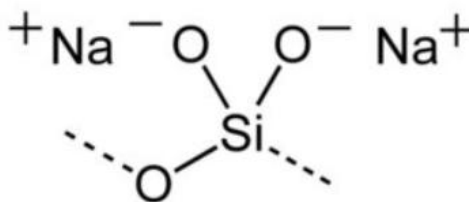


Figura 9. Estructura del metasilicato de sodio. Fuente:(31)

### Aplicaciones

El metasilicato de sodio se emplea en la industria de los detergentes, en la industria petrolera para la preparación de lodos en la perforación de pozos, en la industria minera para la flotación de minerales, y también en la fabricación del papel para mejorar propiedades como el brillo. (30)

### Almacenamiento y transporte

El metasilicato de sodio se almacena de forma sólida en sacos o contenedores resistentes a la humedad y ubicados en un lugar fresco y ventilado. Se transporta en sacos o bidones asegurando que se mantenga seco durante todo el trayecto.

## 5.2 Producto

### 5.2.1 Detergente LAS

El producto final de este proyecto es un detergente líquido formulado a base de dodecilsulfonato de sodio y aditivos funcionales. El sistema contiene una mezcla equilibrada de tensioactivos, secuestrantes, hidrótopos, alcalinizantes y coadyuvantes no iónicos disueltos en agua, formulado para ofrecer elevada eficacia de limpieza, buena formación de espuma, estabilidad y compatibilidad dermatológica. (9)

### Propiedades físicas

Es un líquido de color ligeramente amarillento, con olor característico y viscosidad media-alta, estable en condiciones ambientales normales. Se muestran sus propiedades en la Figura 19.

Tabla 11. Propiedades físicas del detergente tipo LABS. Fuente: (9)

Propiedad	Valor
Peso molecular, <i>g/mol</i>	348,49
Densidad (20°C), <i>kg/m<sup>3</sup></i>	1.100
Viscosidad (20°C), <i>cP</i>	1.100

### Propiedades químicas

La formulación final contiene como principio activo el tensioactivo LAS o LABS, que es biodegradable. También cuenta con dietanolamina de coco como coadyuvante tensioactivo, pirofosfato de tetrapotasio como secuestrante, tolueno sulfonato de potasio como hidrótrofo y metasilicato de sodio como alcalinizante. Esta composición permite una humectación rápida en las superficies, una emulsión de las grasas y aceites, la suspensión de partículas y solubilización de la suciedad. Además, confiere estabilidad a la mezcla final en un amplio rango de temperaturas y también de dureza del agua. (9)

### Aplicaciones

El detergente líquido tipo LAS formulado, está diseñado para uso en el ámbito doméstico para la limpieza y lavado de ropa. Además, el dodecibencenosulfonato de sodio se emplea en la fabricación de geles de lavado, productos de eliminación de tintes o desengrasante.

### Almacenamiento y transporte

El detergente líquido tipo LABS se almacena a presión atmosférica en tanques cerrados o contenedores plásticos en ambientes secos, protegidos de la luz solar directa y a una temperatura ambiente de entre 10 y 30°C. El transporte tras el envasado se realiza por carretera o ferrocarril.

## 5.3 Subproductos

En el proceso de producción del detergente tipo LABS está diseñado con un enfoque en el que prácticamente no se generan corrientes residuales, ya que la mayoría de los reactivos se consumen o recirculan al proceso. La única corriente destacable es la de la salida del decantador tras la sulfonación. Es una corriente de ácido sulfúrico concentrado que no se considera residuo, sino un subproducto valorizable que puede ser comercializado como materia prima para otras industrias, contribuyendo a la economía circular y reduciendo el impacto ambiental del proceso.

### 5.3.1 Disolución de ácido sulfúrico

La disolución concentrada de ácido sulfúrico es al 92,4% en masa, una pureza suficiente para ser considerada un subproducto valorizable.

### Propiedades físicas

La disolución de ácido sulfúrico es un líquido denso, incoloro e inodoro, con un comportamiento fuertemente ácido. Sus propiedades físicas principales se muestran en la Tabla 12.

Tabla 12. Propiedades físicas de la disolución de ácido sulfúrico. Fuente: FDS

Propiedad	Valor
Peso molecular, <i>g/mol</i>	91,68
Densidad (20°C), <i>kg/m<sup>3</sup></i>	1.810
Punto de ebullición (1,01 bar), °C	300

### Propiedades químicas

Desde un punto de vista químico esta corriente presenta unas propiedades muy similares al ácido sulfúrico concentrado, un compuesto inorgánico ácido y con una fuerte capacidad deshidratante. Se comporta como ácido fuerte con alta reactividad frente a compuestos orgánicos e inorgánicos. Presenta una estabilidad térmica y elevada compatibilidad con procesos industriales. Es una sustancia corrosiva. (32)

### Aplicaciones

Debido a su estabilidad y compatibilidad, la disolución de ácido sulfúrico es una materia prima en numerosos sectores de fabricación de productos químicos, como la industria de fertilizantes, y también en el tratamiento de aguas. (32)

### Almacenamiento y transporte

La disolución de ácido sulfúrico al 92,4% se almacena en tanques cerrados de acero inoxidable, acero al carbono o materiales plásticos resistentes a la corrosión. Puede almacenarse a condiciones ambientales mientras no se exponga directamente al sol y sea un entorno ventilado. Su transporte puede realizar en cisternas o contenedores certificados.

## 6 Análisis de mercado

El detergente es un agente tensioactivo ampliamente utilizado en todo el mundo. Sus propiedades fisicoquímicas permiten dispersar en agua u otros líquidos sustancias sólidas, permitiendo así eliminar la suciedad de diversas superficies.

Existen distintos tipos de detergentes clasificados según su forma, base y función, entre otros criterios. No obstante, este estudio de mercado se enfoca en el sector de detergentes líquidos de uso doméstico. Se analizará su demanda a nivel global y nacional, considerando la producción de empresas líderes en el sector, como Henkel y Procter & Gamble.

### 6.1 Mercado mundial

En 2023 el mercado mundial de detergentes líquidos alcanzó los 33.300 millones de euros y, según el grupo IMARC, se espera que en 2032 alcance los 54.300 millones de euros, con una tasa de crecimiento anual para el período 2024-2032 de un 5.5%. En base a estos datos, este estudio busca evaluar la viabilidad de atender tanto el mercado nacional como, eventualmente, el global. (33)

El mercado de los detergentes líquidos se está viendo impulsado actualmente debido a una serie de factores y necesidades. En primer lugar, la situación vivida en 2020 debida al COVID-19 produjo un aumento en la necesidad extrema de higiene, lo que produjo un considerable aumento de la demanda en el sector de productos de limpieza. Por otra parte, el estilo de vida ajetreado de

la sociedad conlleva a una mayor preferencia sobre los detergentes líquidos debido a su facilidad de uso.

Respecto a la distribución geográfica del mercado, este sector presenta una amplia distribución. Según se puede observar en el análisis regional de informe EMR, las principales regiones consumidoras son América del Norte, Europa y Asia-Pacífico, seguidas por América Latina y Medio Oriente y África. Esta amplia distribución muestra la necesidad de producción de este tipo de productos para abastecer la demanda global. (34)



Figura 10. Distribución geográfica del mercado de detergentes. Fuente: (34)

Los países más industrializados cuentan con una amplia capacidad de producción, tanto para abastecer el mercado regional como para la exportación de estos bienes. En Europa, la industria de detergentes está impulsada por estrictas regulaciones ambientales que fomentan la innovación y sostenibilidad.

El mercado de detergentes se segmenta en base a distintos criterios: tipo de detergente (enzimático y no enzimático), forma (líquido, en polvo, cápsulas y otros), aplicación (doméstica e industrial) y canal de distribución (hipermercados, supermercados, tiendas de conveniencia, comercio en línea, entre otros). (33)

Según un estudio sobre las preferencias de los consumidores al seleccionar detergentes para la ropa, los factores más influyentes son la forma (líquido o en polvo), el olor, el precio y el tamaño del envase entre otros. Los resultados indican que los clientes prefieren cada vez más los detergentes líquidos a la opción en polvo. Esta preferencia se debe a diferentes causas; como la facilidad de uso, rapidez a la hora de actuar en la ropa y capacidad de disolverse en agua fría. (35)

Otro aspecto clave es el creciente interés en la fabricación de detergentes ecológicamente respetables. Empresas como Henkel han implementado estrategias para reducir su huella ambiental, apostando por la innovación en I+D para desarrollar productos que permitan reducir la temperatura de lavado sin comprometer su eficacia. (36)

Las principales tendencias futuras sobre el mercado señalan un enfoque hacia la sostenibilidad y los productos ecológicos, centrándose en el comercio electrónico y el desarrollo de nuevas fórmulas más eficientes. (37)

## 6.2 Principales empresas del sector

Las cuatro multinacionales líderes en la producción de detergente son Procter&Gamble, Unilever, Iglesia y Dwight y Henkel, contando con su presencia en aproximadamente 200 países. Estas empresas cuentan con marcas comercializadas mundialmente como pueden ser Tide y Ariel (Procter&Gamble), OMO y surf (Unilever) o Persil y Purex (Henkel).

### 6.2.1 Mercado nacional

Según datos oficiales, en 2023 el volumen de producción de preparaciones para lavar ascendió a 1,84 millones de toneladas. En la Figura 11 se observa la tendencia de la fabricación de productos de limpieza e higiene. (38, 39)

Además, el Instituto Nacional de Estadística (INE) indica que la productividad del sector de jabones, detergentes y productos de limpieza ha crecido en los últimos años, alcanzando un valor de 6,475% en 2023. Este crecimiento refleja una mejora en la eficiencia productiva, lo que permite optimizar costos y mejorar la competitividad del mercado. (38)



Figura 11. Tendencias del mercado en la fabricación de detergentes. Fuente: (38)

Como se determina en la Figura 11, el INE reporta que en diciembre de 2023 el índice de cifras de negocios del sector alcanzó 137,856, un incremento del 37,856% respecto al promedio mensual de 2015. Este crecimiento confirma la elevada demanda de productos de limpieza e higiene en España, consolidando al sector como una oportunidad atractiva para inversiones industriales. En este contexto, la producción de detergentes líquidos resulta una estrategia viable, alineada con las tendencias de consumo y el desarrollo de tecnologías más sostenibles.

### 6.2.2 Capacidad de producción empresas españolas

Unilever España ocupa la primera posición del sector en España, con un volumen de fabricación de 567 millones de euros en 2016. Por otra parte, Henkel, con presencia en España desde 1961, es la segunda compañía líder del sector y actualmente produce más de 200.000 toneladas al año de detergentes, detergente líquido y adhesivos, exportando a más de 60 países y empleando a más de 500 personas. (40)

La empresa LINASA, ubicada en Murcia, registra un valor de producción de más de 1.500 toneladas al día de detergente líquido, mientras que una tercera parte de detergente en polvo. Otro fabricante importante es el grupo español de empresas Inquiba, que también es un gran productor de productos de limpieza, contando con la producción de productos de limpieza, detergencia, cápsulas e higiene personal. Cuenta con una capacidad de producción de 300.000 toneladas al año en las diversas ramas de productos. (41, 42)

Analizar la capacidad productiva a nivel nacional permite obtener una visión integral del mercado y evaluar la viabilidad de nuevas líneas de producción. Por lo tanto, se observa que el nivel de producción de los detergentes líquidos y productos de higiene personal en España es elevado, justificando así la capacidad de producción de la planta y posteriores posibilidades de acondicionar la planta en caso de explorar mercados relacionados.

### **6.3 Precio promedio de detergentes**

Un buen estudio de mercado también debe analizar los precios del producto en el mercado actual. Por lo tanto, a continuación, se analizan diversos detergentes junto a sus características y propiedades y el precio en el que se vende. Al ser un producto ampliamente disponible, se analizan las tres marcas mejor valoradas del mercado. Según la OCU, el mejor detergente del mercado es Ecover Universal Honeysuckle & Jasmine, debido a su capacidad de eliminar manchas y su capacidad de conservación del color original de la ropa. Este detergente se vende en la web de la OCU por 8,22€/l, conteniendo 20 dosis, cada una de ellas a 0,50€. (43, 44)

Por otra parte, Seventh Generation Free&Clear Sensitive, se posiciona como uno de los mejores en el mercado, con un precio de 9,95€ por 40 dosis, obteniendo un precio de 0,25€ por lavado. Mantiene los colores vivos de las prendas y se menciona su conciencia con el medio ambiente. (45)

Por otra parte, el más económico de los tres, Carrefour Expert Optimal Clean destaca por su eficacia en la eliminación de las grasas, sin embargo, no obtiene muy buenos resultados respecto al lavado de ropa de colores vivos. Su precio se encuentra en 10,05€ por 4,5 litros, es decir, 0,12€ por lavado. (46)

Debido a la variabilidad de los precios disponibles en el mercado, optaremos como un precio estimado una media de estos, de manera que el detergente sea asequible y rentable económicamente para la planta.

### **6.4 Mercados alternativos**

Siendo la principal aplicación del dodecibencenosulfonato de sodio su uso para la fabricación de detergentes y productos de limpieza, el análisis de mercado se encarga de evaluar su uso para la aplicación a otras posibles industrias.

Encontramos así que el dodecibencenosulfonato de sodio tiene una amplia presencia en diferentes sectores. Su uso se encuentra en la fabricación de geles de lavado, agentes desengrasantes para la industria del cuero, productos para la eliminación de tintes en los procesos textiles, como aditivos inclusores de aire para hormigón y morteros de cemento, en productos fitosanitarios y en procesos de polimerización en emulsión. (47)

Esta amplia gama de aplicaciones asegura que, aunque la producción estimada de detergente anualmente sea excesiva para el consumo por parte de los compradores, existirán mercados alternativos a los que abastecer con la producción directa de dodecibencenosulfonato de sodio.

Además, durante el proceso de producción surge una corriente residual acuosa que contiene ácido sulfúrico al 92,4%. Se estudia por tanto el valor al que se podría comercializar esta corriente en el mercado, incrementando así el beneficio bruto de la empresa. Analizando los precios de mercado disponibles se estima el precio de venta en 0,138€/kg. (48)

## 6.5 Mercado de las materias primas

Para llevar a cabo un análisis económico completo es importante el estudio de las materias primas implicadas en el proceso, tanto la disponibilidad a nivel de producción, como el precio medio del mercado y las principales empresas productoras.

Las materias primas no presentan un precio fijo, ya que depende de diversos factores económicos que hacen que su precio fluctúe. En este estudio se mostrarán datos promedio e índices para evaluar esta fluctuación.

### 6.5.1 Benceno

El benceno, una de las principales materias primas de este proceso, es un producto altamente demandado en la industria como precursor de posteriores productos pertenecientes a los sectores de plásticos, resinas, fibras sintéticas, caucho, detergente etc.

Uno de los principales sectores en los que se utiliza el benceno es en la construcción, para fabricar gasolina, aditivos para aceites y plásticos para automóviles. El valor del mercado de la construcción se prevé que alcance un valor de 39.352,08 mil millones de euros en 2031.(49)

El interés por parte de los diferentes sectores de construcción que emplean el benceno en sus procesos de producción implica que la oferta de benceno será amplia y competitiva, por lo que se consigue obtener benceno por parte de los proveedores a precios competitivos.

Según Fortune Business Insights, en 2020, el mercado mundial de benceno y sus derivados alcanzó un valor de 25.400 millones de dólares y se proyecta que crecerá de 34.600 millones de dólares en 2021 a 53.500 millones de dólares en 2028, con una tasa compuesta anual del 6,4% durante ese período. La región de Asia-Pacífico lideró el mercado en 2020, con una participación del 24,41%. [10] (49)

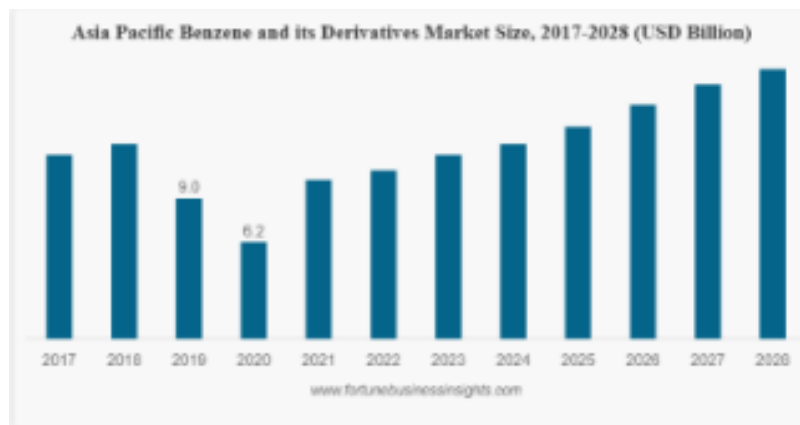


Figura 12. Mercado del benceno. Fuente: (49)

En 2024, el mercado chino del benceno registró variaciones en el precio del benceno, tal y como se muestra en la Figura 12. Durante un período de tres meses, la fluctuación del precio del benceno con una pureza del 99,9% osciló entre un máximo de 6859 RMB/ton y un mínimo de 5405 RMB/ton, lo que equivale a 0,6514€/kg-0,8267€/kg tras la conversión a euros. (50)

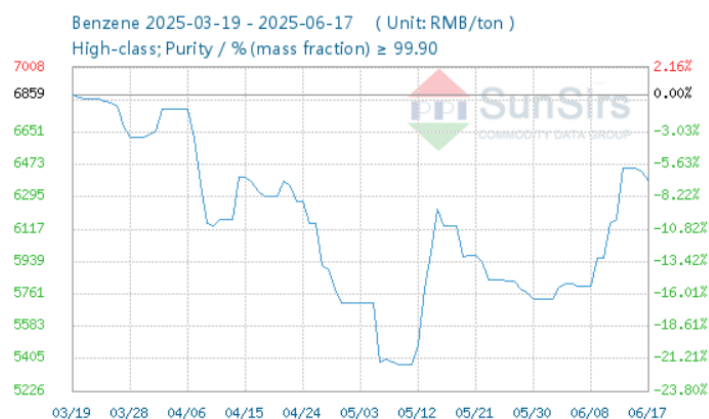


Figura 13. Fluctuación en el precio del benceno en el mercado. Fuente: (50)

Por otra parte, a nivel nacional, el BOE establece el precio sin impuestos teórico del benceno en el segundo bimestre en 1,0834€/kg, según se muestra en la Figura 14. (51)

Bimestre	Tipo de cambio \$/€	Cotización internacional \$/Tm	Flete (Fb) \$/Tm	Coste de comercialización (CCb) c€/kg	Coste de la materia prima (CMPb) c€/kg	Precio sin impuestos teórico (PSIb) c€/kg	Precio sin impuestos (PSIb) c€/kg
2024/5	1,092813	537,0200	17,30	53,5858	50,7241	104,3099	103,8418
2024/6	1,100517	585,6100	17,00	53,5858	54,7570	108,3428	108,3428

Figura 14. Precio del benceno según el BOE. (51)

Las tendencias del mercado del benceno se posicionan en la región Asia-Pacífico principalmente, representando más de un 40% de la demanda mundial.

Un factor importante a tener en cuenta es que, debido a la peligrosidad y las restricciones ambientales, el benceno puede sufrir limitaciones en cuanto a su uso por parte de los gobiernos, en busca de una sociedad e industria concienciada con la salud pública y el medioambiente. Además, se están buscando nuevas alternativas de producción de benceno ya que actualmente se obtiene del petróleo, lo que podría alterar los precios del mercado del benceno significativamente. (52)

A nivel mundial, las empresas líderes en producción de benceno son las siguientes; Repsol (España), Hefei Home Sunshine Pharmaceutical Technology Co., Ltd. (China) y hengzhou Alfa Química Co., Ltd (China). (53)

El proveedor obtenido del portal web Alibaba Dongying establece un precio de 812,52€/tonelada si se obtienen más de 50 toneladas. (54)

## 6.5.2 Dodeceno

El 1-Dodeceno, la otra principal materia prima del proceso es un compuesto orgánico clasificado como alfa-olefina, y cuenta con diferentes aplicaciones. Su uso es variado, apareciendo en el campo del petróleo y gas, en la producción de polímeros, como agente de limpieza, lubricantes y como fluido funcional. Además, es una de las principales materias primas en la producción de detergentes. (55)

Respecto a las tendencias actuales del mercado se pronostica un crecimiento de un 4,3% en el período de 2021 a 2028 debido a su demanda para la producción en diferentes industrias. (37)

En el panorama global América del Norte se posiciona como dominante del mercado del 1-Dodeceno, mientras que la región de Asia-Pacífico espera experimentar un rápido crecimiento durante el período de 2021 a 2028, como se observa en la Figura 15.



Figura 15. Mercado global del dodeceno. Fuente: (37)

El precio del 1-Dodeceno varía en función de diversos factores, como el grado de pureza, la región de compra y el volumen adquirido. El 1-Dodeceno con una pureza del 96% está disponible a través de Thermo Fisher Scientific por un precio de 75,30 €/500 g (consultado el 17/06/2025), lo que equivale a 150,60 €/kg. (55)

En Alibaba, el proveedor Dowpol Chemical International Corp ofrece 1-Dodeceno con una pureza superior al 95% en cantidades industriales, con un rango de precios entre 0,8742 y 2,63 €/kg (consultado el 17/06/2025), lo que lo convierte en una opción más rentable para la producción a gran escala. (56)

Para el 1-Dodeceno con una pureza del 99%, el precio es de 1,311 €/kg con un pedido mínimo de 1 tonelada. Se estima que el consumo mensual requerido es de 832 toneladas. (57)

En cuanto a los proveedores, el 1-Dodeceno puede adquirirse en empresas como Merck Millipore, Cymit Química, Sigma-Aldrich, INEOS, entre otras. La disponibilidad de múltiples proveedores permite optimizar la logística de abastecimiento mediante diversas opciones de transporte y distribución.

### 6.5.3 Catalizador

El catalizador empleado en los reactores R-101 A/B se trata de un heteropoliácido en estado sólido. La composición de dicho catalizador se especifica en un 77% en peso en gel de sílice y 23% de ácido tungstofosfórico pero, debido a la poca disponibilidad de información, se obtuvieron datos comerciales del ácido tungstofosfórico puro.

Se obtiene un precio de 8,75€/kg para el compuesto en forma sólida al 99% de pureza, mientras para el soporte de sílice se estima un precio promedio de 0,6994€/kg. (58, 59)

Con el objetivo de aumentar la rentabilidad del proceso, se encarga la fabricación de dicho catalizador a una empresa externa especializada en la fabricación de catalizadores ácidos, como Tokyo Chemical Industry Co., Ltd. en China, o MDPI en Suiza. [r31 (60)

### 6.5.4 Óleum 22%

El óleum, materia prima esencial del proceso, es una solución de SO<sub>3</sub> en ácido sulfúrico concentrado. En este proyecto se emplea una disolución al 22% en peso de SO<sub>3</sub>.

Este reactivo se puede obtener de diversos fabricantes especializados en derivados del ácido sulfúrico. Algunos proveedores internacionales incluyen Emarc Global Industries, Rohan Dyes & Intermediates Limited y Golden Fine Chemicals. Además, existen productores a nivel nacional como BASF o INEOS Sulphur Chemicals. (61)

El precio de mercado estimado para óleum líquido al 22% en peso se sitúa en torno a 0,40€/kg. (62, 63)

### 6.5.5 Agua del proceso

El suministro principal de agua al proceso se empleará en dos equipos, el decantador y el tanque de mezcla final. Por tanto, se debe realizar una estimación del precio de agua, tanto para estimar el precio de las corrientes necesarias en el proceso como para las utilidades y servicios en la planta.

Al estar ubicada la planta en el Polígono Petroquímico Norte de Tarragona, se estima el precio del agua en base a las tarifas de EMATSA (Empresa Municipal Mixta d'Aigues de Tarragona). Se obtienen por tanto precios para las cuotas fijas y variables, siendo de 41,2616€/bimestre y 3,016661 €/m3 para servicios industriales, en base al consumo de agua de la planta. (64)

### 6.5.6 Hidróxido de Sodio

El hidróxido de sodio, o sosa cáustica, ha aumentado su demanda después de que en el año 2020 el sector de los productos de limpieza se viese más demandado. La sosa cáustica es una de las principales materias primas en el proceso de fabricación de detergentes y jabones, debido a que es un agente ideal para romper los depósitos de aceite, grasa y proteínas. Participa en la producción de tensioactivos aniónicos, componente principal de los detergentes. En la siguiente Figura 16 se observa la demanda de productos de limpieza en los hogares desde el año 2017 a 2021.

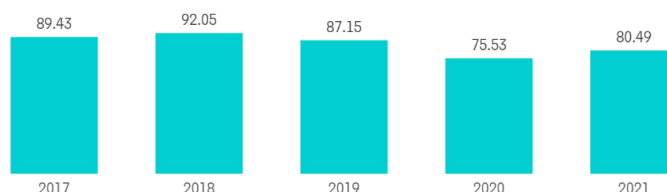


Figura 16. Demanda de productos de limpieza en 2017. Fuente:(65)

Los principales fabricantes de sosa cáustica son los que se muestran en la siguiente Figura 17;



Figura 17. Principales fabricantes de NaOH. Fuente: (65)

Respecto al mercado global se espera que la región Asia-Pacífico experimente un crecimiento, siendo China actualmente el mayor productor y consumidor de soda cáustica a nivel mundial.

El precio del hidróxido de sodio depende de diferentes factores, principalmente el nivel de pureza requerido y el estado en el que se vende. El proveedor Vadequímica vende la disolución de hidróxido de sodio al 25% en IBCs de 1.000l. El precio de la tonelada será de 1.950€. (66)

### 6.5.7 Aditivos

El precio industrial de los aditivos necesarios en la fabricación del detergente final se obtiene de diversos proveedores, y se muestra un resumen en la Tabla 13.

*Tabla 13. Precio de los aditivos. (67-70)*

Aditivo	Precio (€/kg)	Flujo másico (kg/h)	Coste total (€/h)
Dietanolamina de coco	1,40	1136,36	1591,91
Pirofosfato de tetrapotasio	1,42	2272,72	3 227,28
Tolueno sulfonato de potasio	0,17	1136,36	199,09
Metasilicato de sodio	0,28	490,91	137 11
Agua	0,003	4164,96	18,10

## 6.6 Conclusión

El análisis de mercado realizado sobre las materias primas necesarias para la producción de dodecibencensulfonato de sodio y el mercado de detergentes líquidos ha permitido identificar tendencias clave y oportunidades en el sector.

En primer lugar, el mercado de las materias primas presenta una dinámica altamente dependiente de factores económicos globales, con fluctuaciones en los precios del benceno y el 1-Dodeceno. Sin embargo, la disponibilidad de estos compuestos a nivel mundial y la presencia de proveedores en distintas regiones aseguran la posibilidad de obtenerlos a precios competitivos. La sosa cáustica, otro componente esencial, mantiene una fuerte demanda a nivel global.

Por otro lado, el mercado de detergentes líquidos ha mostrado un crecimiento constante. Empresas líderes en el sector han desarrollado estrategias de innovación y sostenibilidad, lo que marca una tendencia clara hacia la fabricación de detergentes con menor impacto ambiental.

En el contexto nacional, el mercado español muestra un nivel de producción elevado, con actores clave como Unilever, Henkel y LINASA liderando el sector. Este alto nivel de producción justifica la viabilidad de establecer nuevas líneas de producción, con posibilidades de expansión tanto en el mercado nacional como en el internacional.

Adicionalmente, se ha identificado la existencia de mercados alternativos para el dodecibencensulfonato de sodio, ampliando las oportunidades de comercialización más allá de la producción de detergentes. Su aplicación en sectores como la industria textil, la construcción y los productos sanitarios garantiza la diversificación de la demanda y reduce el riesgo asociado a la dependencia de un solo mercado.

En conclusión, el estudio confirma que la producción de dodecibencensulfonato de sodio es una estrategia industrialmente viable y económicamente atractiva, respaldada por un mercado en crecimiento y una amplia gama de aplicaciones industriales. Las oportunidades de negocio no solo radican en el abastecimiento de la industria de detergentes, sino también en la comercialización de subproductos y la exploración de mercados complementarios. A pesar de la

volatilidad en los precios de las materias primas, una estrategia de adquisición eficiente permitirá minimizar los riesgos y optimizar la rentabilidad del proceso productivo.

## 7 Emplazamiento

En este apartado se realizará el estudio de la localización óptima para la implantación de la planta de producción de detergente tipo LABS. El emplazamiento de la planta es un factor clave para que su actividad se lleve a cabo de manera exitosa. Para la toma de esta decisión existen varios factores que hay que tener en cuenta.

Uno de los factores determinantes a la hora de seleccionar una localización es el suministro de las materias primas. Hay que tener en cuenta la disponibilidad de recursos, así como minimizar los gastos de transporte de las materias primas y productos. Por tanto, se buscará una localización lo más cercana posible de los proveedores de materias primas y de los posibles compradores del producto.

Otro aspecto fundamental es la red de comunicaciones, se requiere de un emplazamiento con buenas conexiones y vías de transporte rápidas. Se busca poder acceder de manera rápida mediante varios medios de transporte, como pueden ser ferrocarril, barco, avión, carretera... Esto resulta imprescindible tanto para transportar las materias primas y productos, como para el acceso de los trabajadores a las instalaciones.

Asimismo, otros aspectos a tener en cuenta son la disponibilidad de mano de obra cualificada, los servicios auxiliares disponibles en el polígono, la disponibilidad y tamaño del terreno y el clima de la zona.

Primeramente, se decide emplazar la planta en España. La selección de este país se debe a que presenta un mercado consolidado dentro del sector de la limpieza y a la disponibilidad de materias primas de alta calidad. Asimismo, España se encuentra estratégicamente situado para comercializar con otros países, especialmente con Europa. También es importante tener en cuenta que presenta un entorno normativo favorable para la industria.

### 7.1 Suministro de las materias primas

Las principales materias primas del proceso de producción de detergente tipo LABS son el benceno, el dodeceno, el óleum y el hidróxido de sodio. Asimismo, para obtener el detergente, se añaden al LAS los siguientes aditivos: dietanolamina de coco, pirofosfato de tetrapotasio, tolueno sulfonato de potasio, metasilicato de sodio y agua. A continuación, se estudiará la localización de los principales suministradores de estas materias primas.

#### 7.1.1 Obtención del benceno

El benceno es un hidrocarburo aromático que se obtiene principalmente a partir de procesos petroquímicos de refinado de petróleo, por lo que los principales suministradores de este producto son las refinerías. Entre las refinerías más destacadas en España están Repsol Cartagena, Repsol A Coruña, Repsol Puertollano, Repsol Tarragona, Repsol Bilbao, CEPSA Gibraltar-San Roque, CEPSA La Rábida y BP Castellón. (71-73)

#### 7.1.2 Obtención del dodeceno

Los principales productores de 1-dodeceno se encuentran en China, India y Norteamérica. Mientras que en España no se produce el dodeceno a gran escala, solamente lo comercializan ciertas empresas distribuidoras de productos químicos. Entre los principales distribuidores de 1-

dodeceno es España se encuentra Fisher Scientific, ubicado en Madrid; Sabic, en Cartagena y Cymit Química, en Barcelona. (74–77)

### 7.1.3 Obtención del óleum

El principal productor de óleum a escala industrial en España es INEOS Sulphur Chemicals, ubicada en Bilbao. Por otro lado, hay otras empresas dedicadas principalmente a la producción de ácido sulfúrico, pero que también fabrican óleum, aunque en menores cantidades. Entre esas empresas destaca Atlantic Copper, en Huelva y Asturiana de Zinc Glencore, en Asturias.(78–80)

### 7.1.4 Obtención del hidróxido de sodio

Varias empresas españolas comercializan hidróxido de sodio en disolución al 20%. El principal fabricante de NaOH es Ercos, que cuenta con 10 fábricas en el país, distribuidas en Cataluña, Aragón, Comunidad Valenciana y Madrid. Asimismo, existen otras empresas distribuidoras de químicos que comercializan también sosa cáustica, entre ellos Quimipur y Thermo Fisher Scientific, ambos en Madrid y EMSA Tecnología Química, en Barcelona. (81–83)

### 7.1.5 Obtención de aditivos

Los aditivos requeridos para la fabricación de este tipo de detergente son la dietanolamina de coco, el pirofosfato de tetrapotasio, el tolueno sulfonato de potasio y el metasilicato de sodio. La dietanolamina de coco se vende en cantidades industriales principalmente por T3 Química, una empresa de productos químicos para laboratorio, farmacia e industria. Asimismo, el pirofosfato de tetrapotasio se puede obtener de FactorChem y de la misma empresa que la dietanolamina de coco, T3 Química; ambas localizadas en Barcelona. El tolueno sulfonato de potasio se puede comprar en Vadequímica, situado en Barcelona también. Finalmente, el metasilicato de sodio se puede obtener de las empresas ya mencionadas Vadequímica y T3 Química. (84–88)

## 7.2 Localización seleccionada

Analizando las localizaciones de los principales suministradores de materias primas necesarias en este proceso, se concluye que la mayor parte de estas sustancias se pueden obtener en la comunidad autónoma de Cataluña, a excepción del óleum. El benceno se comercializa en Tarragona por la empresa Repsol y el dodeceno, hidróxido de sodio y los aditivos se pueden adquirir en Barcelona. Mientras que, para la adquisición del óleum, la mejor opción sería su transporte desde Bilbao, puesto que es la empresa que lo fabrica a mayor escala y que se encuentra a menor distancia del resto de suministradores de materias primas. Para tener una visión más clara se muestra en la Figura 18 un mapa con las localizaciones de dichas empresas.



Figura 18. Ubicación de los principales suministradores de materias primas. Fuente: (89)

Debido a que el benceno es una sustancia altamente peligrosa que requiere de altas medidas de seguridad para su transporte, se decide ubicar la planta lo más próxima posible a la refinería de Repsol, en Tarragona. Por tanto, el emplazamiento seleccionado será en una parcela dentro de un polígono de Tarragona. Asimismo, cabe destacar que Tarragona se trata de una ciudad bien comunicada, tanto a nivel nacional como europeo y, debido a esto, cuenta con una cuarta parte de la industria química nacional. (90)

### 7.3 Selección del polígono y parcela

Se decide ubicar la planta en el Polígono Petroquímico Norte de Tarragona, perteneciente al Complejo Petroquímico de Tarragona, mostrado en la Figura 19. Este complejo se sitúa en los municipios de Trébol, La Canonja, Vilaseca, Reus, Salou, Constantí, El Morell y la Poble de Mafumet. El Complejo Petroquímico de Tarragona se considera el polo petroquímico más importante del sur de Europa, contando con varias multinacionales como Repsol, Dow y Basf en el Polígono Norte. (90)

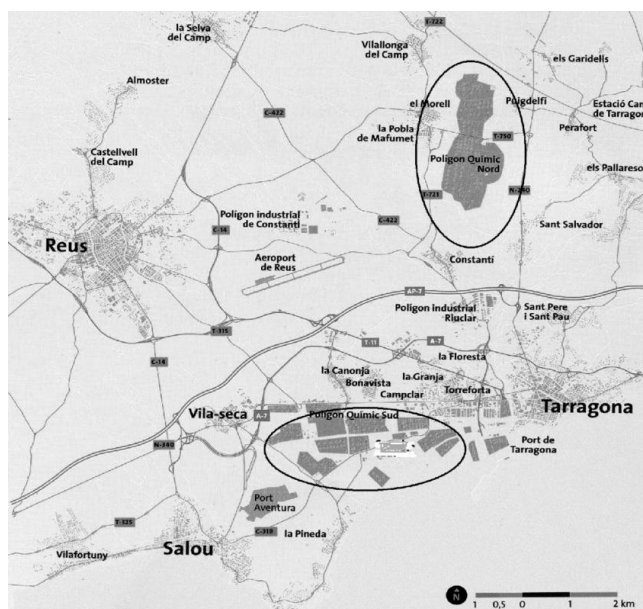


Figura 19. Complejo Petroquímico de Tarragona. Fuente:(91)

El principal motivo por el que se selecciona este polígono es que cuenta con una red de tuberías que permite la conexión por oleoducto con la refinería de Repsol, obteniendo de esta manera el benceno que entra al proceso. Además, presenta una ubicación estratégica, ya que cuenta con conexiones al puerto de Tarragona y con la red ferroviaria.

La parcela seleccionada se encuentra entre el municipio de El Morell y La Poble de Mafumet, a pocos metros de Repsol. Se trata de un terreno con calificación para gran industria que cuenta con 102.194 m<sup>2</sup>, cuya referencia catastral es 1629103CF5612H0001BI. Asimismo, este terreno es apto para el uso del sector petroquímico, permitiendo industrias de 1º, 2º, 3º, 4º y 5º categoría. Se muestra en la Figura 20 la extensión de la parcela seleccionada, que cuenta con un precio de 15.635.687 €. (92)



Figura 20. Parcela seleccionada. Fuente: Elaboración propia a partir de (93)

## 7.4 Servicios del polígono

El Polígono Petroquímico Norte de Tarragona cuenta con los servicios básicos como suministro de agua, de energía eléctrica, recogida de residuos, fibra óptica, alumbrado público y red de saneamiento. También dispone de suministro de servicios auxiliares, tales como agua refrigerante, vapor de calefacción y aire comprimido. Además, tiene instalaciones para el tratamiento de aguas residuales, así como equipos de seguridad y emergencia para casos de incendio. Asimismo, las diferentes empresas que conforman el polígono se encuentran muy integradas, disponiendo de conexiones entre ellas que permiten sinergias industriales. (92, 94)

## 7.5 Medios de transporte y comunicación

La ubicación estratégica de Tarragona es uno de los factores clave para la selección del emplazamiento de la planta, encontrándose en el cruce entre el Valle del Ebro y el Corredor del Mediterráneo. Destacando principalmente por el puerto de Tarragona, que recibe buques de cualquier calado a nivel internacional y conectado con el sistema ferroviario de mercancías. (95)

### 7.5.1 Transporte marítimo

El puerto de Tarragona es considerado uno de los principales del mar Mediterráneo y de los más importantes a nivel nacional. Este presenta una localización estratégica y además abarca una gran superficie. En este puerto, se transportan principalmente productos agrícolas, cereales, productos sólidos a granel, vehículos y derivados de la industria petroquímica. (96)

El puerto cuenta con conexiones al polígono seleccionado mediante una red de tuberías. Además, dispone de un sistema ferroviario interno que comunica todos los muelles y enlaza con la red ferroviaria nacional e internacional. También cuenta con acceso directo a la red de carreteras. (96)

### 7.5.2 Red de carreteras

La red viaria de Tarragona está conformada por las siguientes autopistas, autovías y carreteras:

- AP-7: El principal eje del Corredor Mediterráneo, que enlaza Tarragona con Barcelona y Valencia.
- A-7: Autovía del Mediterráneo, que transcurre paralela a la costa.
- C-32: Autovía que conecta Barcelona con El Vendrell y la Costa del Garraf.
- T-11: Autovía que enlaza Tarragona con Reus y facilita el acceso a la AP-7. (97)
- AP-2: Autopista que conecta Zaragoza con Tarragona. (98)

- N-240, N-340 y N-420: Las carreteras nacionales que enlazan con el resto del Estado. (99)

En la Figura 21 se muestra un mapa de Tarragona con la red viaria explicada anteriormente y en la Figura 22 se aprecian las conexiones de Tarragona con la red de carreteras nacional.

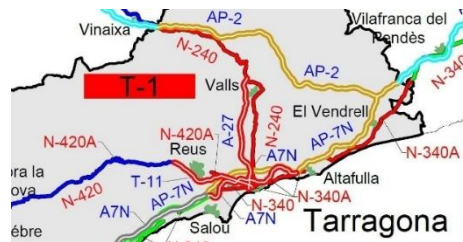


Figura 21. Red de carreteras de Tarragona. Fuente:(100)



Figura 22. Red de carreteras de España. Fuente:(101)

### 7.5.3 Red ferroviaria

La red ferroviaria de Tarragona destaca a nivel nacional por ser una de las más avanzadas y por su conexión con el puerto de Tarragona y con el polígono petroquímico. El puerto dispone de accesos ferroviarios que conectan con las líneas dirección Zaragoza-Madrid, Valencia y Barcelona. Asimismo, el puerto presenta 46 km de vías internas con acceso tanto para ancho ibérico como ancho mixto, como se muestra en la Figura 23. (102)



Figura 23. Mapa de la red ferroviaria dentro del Puerto de Tarragona. Fuente:(103)

En Tarragona existen dos estaciones de tren, una ubicada en el centro de la ciudad, por donde circula la línea de alta velocidad de Barcelona-Alicante y otras líneas de servicios de mercancías y regionales. La segunda estación, Camp de Tarragona, pertenece a la red AVE y conecta Tarragona con Madrid. En la Figura 24 se muestra la red ferroviaria española, donde se pueden apreciar las conexiones con Tarragona. (99)



Figura 24. Mapa de la red ferroviaria de España. Fuente:(104)

Actualmente se están llevando a cabo las obras para adaptar el ancho de las vías al ancho internacional en el tramo Tarragona-Sant Vicenç de Calders, para el desarrollo del Corredor Mediterráneo enlazando Tarragona con la frontera francesa.(105)

#### 7.5.4 Transporte aéreo

En cuanto al transporte aéreo en Tarragona, a 7 km del centro de la ciudad está el aeropuerto de Reus. Este aeropuerto está conectado con 7 países y cuenta con 25 destinos, sin embargo, está dedicado especialmente al transporte de pasajeros. (99, 106)

Sin embargo, a 85 km de distancia de Tarragona se encuentra el Aeropuerto Barcelona-El Prat, el segundo aeropuerto internacional más importante de España. Actualmente vuela a 212 destinos repartidos en 62 países diferentes.(107)

Asimismo, en el Aeropuerto de Barcelona trabaja con un elevado tráfico de mercancías que sigue en aumento. Entre las dos terminales de este aeropuerto, se sitúa el Centro de Carga Aérea de Barcelona, que cuenta con casi 40 hectáreas. Se prevé que este año 2025 el aeropuerto incremente su carga aérea hasta 177.000 toneladas. (108, 109)

#### 7.5.5 Red de tuberías

Otra forma de transporte empleada en Tarragona entre el complejo petroquímico y el puerto es la gran red de tuberías gestionada por Rack Dixquímics. Esta asociación cuenta con 4.700 metros de longitud y 3 pisos de tubería, que se encargan del transporte bidireccional de sustancias químicas entre el puerto de Tarragona y el Clúster petroquímico. Esta infraestructura permite el transporte rápido y eficiente de las materias primas y productos y la reducción del volumen de transporte por carretera, aumentando la seguridad y disminuyendo el impacto ambiental. (110)

### 7.6 Posibles compradores y competidores

A la hora de seleccionar el emplazamiento de una planta es importante analizar los posibles compradores del producto y la existencia de competidores. Las principales empresas productoras de detergente en España son:

- Henkel, en Montornés del Vallés (Barcelona) (111)
- Linasa, en Murcia y Málaga (112)
- Persán, en Sevilla (113)
- Inquiba, en Guareña (Badajoz) (114)

Cabe destacar que, a excepción de Henkel, la mayoría de las empresas de detergentes están localizadas en el sur peninsular. Esto implica la necesidad de descentralizar esta industria, situando la planta en el norte de España, concretamente en Tarragona.

A pesar de que ya exista una gran empresa fabricante de detergentes en Cataluña, su actividad se centra en comercializar únicamente con algunas marcas como Dixan, Perlan, Wipp y Micolor. El mercado del detergente es muy amplio y está en continuo crecimiento, lo que facilita la entrada a nuevos competidores. (111)

Los potenciales compradores de este producto podrían ser cadenas de distribución y supermercados, que no producen el detergente, pero lo venden con el nombre de su propia marca. Asimismo, otra opción sería la venta a distribuidores de productos de limpieza, que compran en cantidades industriales los productos. Asimismo, la localización estratégica de Tarragona facilita la distribución nacional, especialmente con el norte peninsular, y la exportación al sur de Europa o norte de África.

### 7.7 Disponibilidad de mano de obra

Para llevar a cabo la operación normal de la planta se requerirá de personal cualificado. Tarragona contaba en 2024 con una población de 141.018 habitantes. Asimismo, durante el primer cuatrimestre de 2025, la tasa de paro de Cataluña ha sido del 8,9%. Con estos datos se puede garantizar la disponibilidad de mano de obra para la planta. (115, 116)

Respecto a las instituciones educativas cercanas, en Tarragona se ubica la Universitat Rovira i Virgili, donde se imparten grados como Ingeniería Química, Ingeniería Mecánica, Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Informática o Ingeniería Electrónica Industrial y Automática. Asimismo, en esta misma universidad se ofertan ciertos estudios de postgrado relacionados con la industria química. Cabe destacar también la existencia de centros de formación profesional orientados al ámbito industrial y químico en la ciudad de Tarragona. (117)

### 7.8 Climatología

A la hora de diseñar las unidades del proceso es importante tener en cuenta las condiciones climatológicas de la zona donde se va a instalar la planta. De esta manera se pueden adaptar los equipos a estas condiciones y aumentar la seguridad para climas extremos.

La ciudad de Tarragona presenta un clima mediterráneo, el cual se caracteriza por inviernos suaves y veranos calurosos. La temperatura suele variar entre los 5°C y los 29°C a lo largo del año. En la Figura 25 se muestra un promedio de la variación de las temperaturas máximas y mínimas de la zona. (118, 119)

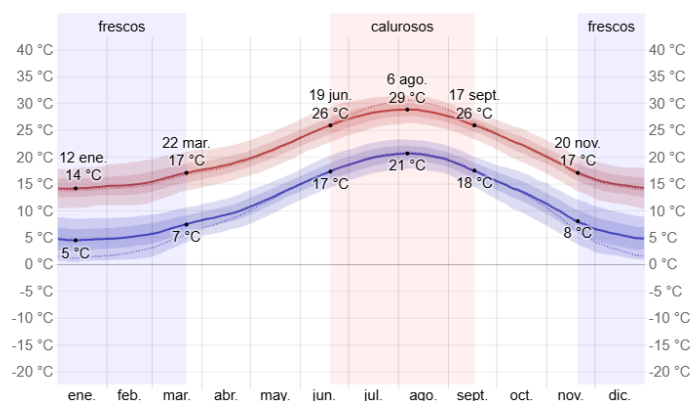


Figura 25. Temperaturas máximas y mínimas promedio en Tarragona. Fuente: (119)

En referencia a las precipitaciones en Tarragona, su probabilidad fluctúa en función de los meses. Octubre se trata del mes con más lluvias, mientras que julio es el mes más seco del año. En la Figura 26 se muestra el promedio de lluvia acumulada por meses en Tarragona. (119)

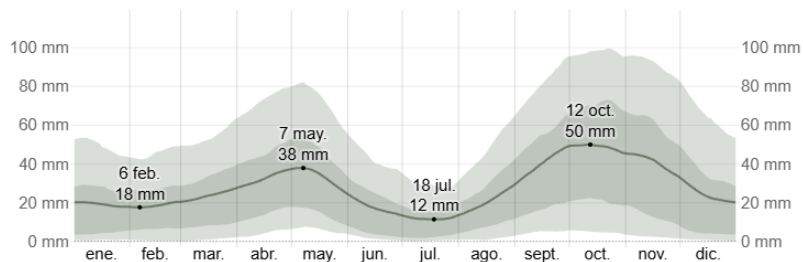


Figura 26. Promedio mensual de lluvia en Tarragona. Fuente:(119)

Al igual que las precipitaciones, la velocidad del viento fluctúa abundantemente durante el año. Diciembre se trata del mes más ventoso, contando con una velocidad promedio de 17,2 km/h. Mientras que entre abril y octubre se presentan bajas velocidades de viento, con una velocidad media de 12,6 km/h. La velocidad máxima histórica registrada en Tarragona es de 120 km/h. (119, 120)

## 7.9 Estudio de sismicidad

Otro aspecto relevante en la selección de la zona donde se ubicará la planta de producción de detergente tipo LABS es el riesgo sísmico de la zona. Puesto que, si el riesgo es alto, esto podría comprometer la estabilidad de las estructuras e instalaciones y habría que tenerlo en cuenta en el diseño de estas.

Para el caso de Tarragona, el riesgo sísmico es considerablemente bajo, con solamente un 2% de probabilidades de que se produzca un terremoto potencialmente dañino en los próximos 50 años. En la Figura 27 se muestra un mapa de peligrosidad sísmica de España, donde se puede apreciar que el riesgo en Tarragona es bajo. (121)

Por tanto, la baja sismicidad de la zona es una ventaja significativa desde el punto de vista constructivo y económico, puesto que se reduce la complejidad del diseño de los equipos e infraestructuras. Asimismo, garantiza mayor seguridad y estabilidad de las instalaciones.

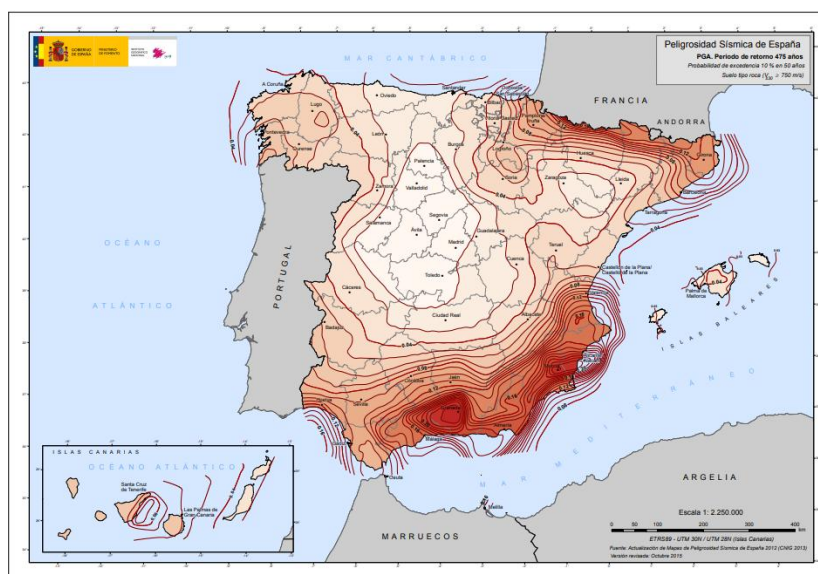


Figura 27. Mapa de peligrosidad sísmica de España. Fuente:(122)

## 8 Análisis de viabilidad técnica

Es fundamental analizar si es viable llevar a cabo el proyecto mediante la alternativa seleccionada. Para estudiar la viabilidad del proyecto, es necesario comprobar la disponibilidad de diversos recursos. Entre estos recursos destaca principalmente la disponibilidad de materias primas y catalizador, personal cualificado, un terreno con capacidad suficiente, infraestructuras, servicios y tecnología.

Asimismo, resulta imprescindible verificar que el proyecto sea rentable desde el punto de vista económico, y que se trata de un proceso seguro y respetuoso con el medio ambiente.

En este apartado se evaluarán todos estos factores con el objetivo de determinar la viabilidad técnica de la planta de producción de detergente tipo LABS.

### 8.1 Viabilidad de la tecnología

Es necesario realizar una evaluación de la tecnología implicada en el proceso para comprobar la disponibilidad e implantación a escala industrial.

La producción de detergente tipo LABS implica tres etapas principales: la alquilación del benceno con dodeceno para formar dodecibenceno (LAB), la sulfonación del LAB para obtener ácido dodecibencensulfónico (LABSA) y su posterior neutralización para generar el producto final, el alquilbencenosulfonato de sodio (LAS o LABS). A pesar de que existen algunas rutas tradicionales, como el uso de catalizadores homogéneos (HF o  $\text{AlCl}_3$ ) o la sulfonación en fase gas con  $\text{SO}_3$ , en el presente proyecto se opta por tecnologías basadas en catálisis heterogénea, para la alquilación, y operación en fase líquida, para la sulfonación. Estas tecnologías permiten simplificar el diseño de planta, mejorar la seguridad del proceso y cumplir con las exigencias ambientales actuales.

Para la etapa de alquilación, se adopta el proceso Detal con un catalizador sólido ácido, concretamente ácido tungstofosfórico soportado en sílice. El proceso Detal está ampliamente implantado a nivel industrial. En la sulfonación, se selecciona como agente sulfonante el óleum al 22 % debido a que permite trabajar con reactivos líquidos más fáciles de manipular y con equipos convencionales como reactores de tanque agitado. Esta elección mejora la seguridad, reduce la inversión en equipos especiales y mantiene un alto rendimiento de sulfonación. Finalmente, en la etapa de neutralización se opta por el uso de hidróxido sódico (NaOH), el agente más comúnmente empleado a nivel industrial, por su alta reactividad, bajo coste y amplia disponibilidad. El proceso se realiza en un reactor agitado equipado con control térmico, necesario para disipar el calor generado por la reacción y mantener la estabilidad del producto final. (1)

Con base en toda la información recopilada, puede concluirse que el proceso de producción del detergente tipo LABS propuesto en este proyecto es técnicamente viable, ya que todas las tecnologías seleccionadas se encuentran industrialmente desarrolladas, son accesibles, escalables, seguras y alineadas con las Mejores Técnicas Disponibles (MTD) del sector químico y detergente.

### 8.2 Disponibilidad de recursos

Para estudiar la viabilidad técnica de un proyecto se requiere comprobar la disponibilidad de los recursos descritos a continuación.

#### 8.2.1 Recursos materiales

La disponibilidad de las materias primas resulta un factor clave para que se lleve a cabo el proceso productivo de la planta con normalidad. La alternativa de producción del detergente seleccionada

requiere como materias primas principales benceno y dodeceno. En el apartado 7.1 Suministro de las materias primas se analiza este tema, donde se concluye que existe disponibilidad suficiente de todas las materias primas requeridas en el proceso.

Además de las materias primas, se necesita disponibilidad del catalizador empleado en los reactores R-101 A/B, ácido tungstofosfórico soportado en sílice. Sin embargo, este catalizador no se suele comercializar directamente en formato industrial. Por tanto, como sus componentes, sílice mesoporosa y ácido tungstofosfórico, sí que están disponibles en el mercado, se encargará su preparación a una empresa especializada. Empresas como Sigma Aldrich comercializan estos componentes. (123)

Sin embargo, las materias primas no son el único recurso material necesario para la operación de la planta. También se necesitan las utilidades del proceso, tales como vapor de baja y alta presión, agua de refrigeración y electricidad. Al estar la planta ubicada en el Polígono Petroquímico Norte de Tarragona, este dispone de todos los servicios necesarios. Asimismo, el polígono cuenta con una red de tuberías que comunica con el puerto de Tarragona y con las demás empresas del polígono. Esto permitirá, por ejemplo, administrar el benceno al proceso por medio de tuberías provenientes desde Repsol.

Otro recurso material necesario serán los equipos del proceso, entre ellos destacan los reactores, columnas de destilación y un decantador. Asimismo, se requieren otros equipos como bombas, intercambiadores de calor, válvulas y sistemas de control. También será necesario un tanque de mezclado y tanque de almacenamiento de las materias primas y productos. Algunos de estos equipos se pueden seleccionar directamente por catálogo a través de medidas estándar, mientras que otros, requieren de un diseño específico y ser fabricados a medida. De todas formas, se ha comprobado que todos los equipos necesarios para el proceso son ampliamente utilizados en la industria y, por tanto, están disponibles en el mercado.

Finalmente, se concluye que existe disponibilidad suficiente de todos los recursos materiales requeridos para que sea viable técnicamente llevar a cabo este proyecto.

### **8.2.2 Recursos humanos**

Referido a los recursos humanos, en el apartado 7.7 Disponibilidad de mano de obra se asegura la existencia de personal cualificado próximo a la zona suficiente para garantizar la operación normal de la planta.

Tarragona se trata de una ciudad con una elevada densidad poblacional y un entorno industrial altamente consolidado, destacando especialmente en el sector petroquímico. Asimismo, cuenta con la Universitat Rovira i Virgili, donde se imparten diversos grados dentro del ámbito de la ingeniería, y centros de formación profesional con ciclos orientados a la industria de procesos.

Por tanto, se concluye que la región de Tarragona presenta una sólida formación en el campo de la ingeniería, lo que asegura suficiente personal cualificado para el funcionamiento habitual de la planta de producción de detergente tipo LABS.

En el *Anexo III. Análisis de viabilidad económica* en el apartado 4. 1. 5 *Coste de mano de obra*, se realiza una estimación del número de operarios necesarios para llevar a cabo la operación habitual de la planta. El resultado obtenido son 15 operarios, por lo que se asegura que hay mano de obra suficiente para operar la planta en la zona.

### **8.2.3 Recursos de infraestructura**

Es de vital importancia asegurar la disponibilidad de un terreno suficientemente amplio y que cumpla con todas las necesidades del proyecto. El terreno seleccionado se sitúa en el Polígono Petroquímico Norte de Tarragona, donde se garantiza la accesibilidad a todos los servicios básicos del polígono. Entre estos servicios destacan las utilidades del proceso, energía eléctrica, red de saneamiento, equipos de seguridad y emergencia e instalaciones para el tratamiento de aguas residuales.

Asimismo, se dispone de una parcela con espacio suficiente para poder instalar la planta, pues dispone de 102.194 m<sup>2</sup>. Estas dimensiones se consideran suficientes para albergar todas las unidades del proceso, servicios auxiliares, zonas de almacenamiento de materias primas y productos, salas de control, estaciones de carga y descarga, oficinas, quedando espacio disponible para posibles ampliaciones en el futuro.

## **8.3 Seguridad del proceso**

La seguridad de la planta es un factor clave para poder determinar la viabilidad técnica del proyecto. La planta de producción de detergente tipo LABS opera con sustancias inflamables, tóxicas y corrosivas, por lo que cobran gran relevancia las medidas de seguridad de la planta.

En el apartado 11. Seguridad se realizará un estudio detallado de la seguridad del proceso. En dicho apartado, se clasifica la planta como establecimiento afectado de nivel superior según la Directiva Seveso. Esto significa que la planta deberá cumplir las medidas y presentar la documentación exigida para accidentes graves clasificados de nivel superior según el Real Decreto 840/2015.

Asimismo, se calcula el índice DOW del reactor de alquilación R-101 A/B, determinándose un grado de peligrosidad intermedio. También se analiza la compatibilidad química de los compuestos involucrados en el proceso, identificándose sustancias con potencial de reaccionar violentamente al entrar en contacto con otros compuestos presentes. Esto justifica la necesidad de implementar un estricto sistema de control en toda la planta.

Por otro lado, la disposición de la planta es un punto crítico para garantizar la seguridad del proceso. Una disposición adecuada permite minimizar el riesgo de propagación en caso de explosión o incendio, que se consigue estableciendo distancias de seguridad entre los equipos y las áreas de la planta.

En conclusión, el proyecto es técnicamente viable desde el punto de vista de la seguridad, siempre que se apliquen las medidas de protección adecuadas. El análisis detallado de la seguridad de la planta y las medidas requeridas se detallarán en el apartado 11. Seguridad.

## **8.4 Viabilidad económica**

Comprobar que un proyecto es viable económicamente es fundamental. Para ello se plantea un primer análisis fundamental que consiste en asegurarse de que se consiguen beneficios de venta del producto. Para ello se calcula el beneficio bruto teniendo en cuenta los precios del análisis de mercado para las materias primas y el precio de venta del producto y subproducto.

En la Tabla 14 se muestran los precios de las materias primas y su coste total teniendo en cuenta las cantidades necesarias.

Tabla 14. Coste de las materias primas. Fuentes: Elaboración propia

<b>Materia prima</b>	<b>Flujo másico (kg/h)</b>	<b>Coste anual (€/año)</b>
Benceno	536,41	4.602.681,02
Dodeceno	1.156,2	12.004.963,3
Óleum 22%	2.524,19	7.996.633,92
NaOH 20%	1.830,29	28.266.998,8
H <sub>2</sub> O	5.998,79	143.322,821
Dietanolamina de coco	1.136,36	12.599.959,7
Pirofosfato de tetrapotasio	2.272,72	25.560.030,7
Tolueno sulfonato de potasio	1.136,36	1.576.794,95
Metasilicato de sodio	490,91	1.508.224,02
<b>Coste anual materias primas (€/año)</b>		<b>94.259.609,23</b>

En la Tabla 15 se muestran los ingresos por ventas anuales teniendo en cuenta la cantidad anual producida y el precio de productos.

Tabla 15. Ingresos por ventas anuales. Fuente: Elaboración propia

<b>Producto</b>	<b>Cantidad producida (t/año)</b>	<b>Precio (€/t)</b>	<b>Beneficio (€/año)</b>
Detergente	120.000,00	1.333,33	160.000.000 €
Ácido sulfúrico (92,4%)	16.800,94	138,00	2.318.528,84 €
<b>Ingresos por ventas anuales (€/año)</b>			<b>162.318.528,84</b>

El beneficio bruto se calcula como la diferencia entre el valor económico del producto generado y el coste de las materias primas necesarias sin tener en cuenta el resto de los gastos. Se obtiene un valor de 68.058.919,61 €/año.

Es necesario realizar un análisis más riguroso para comprobar la rentabilidad, se detalla en el *Anexo III. Análisis de viabilidad económica*.

## 9 Descripción del proceso, instalación y equipos

### 9.1 Descripción del proceso

A continuación, se llevará a cabo la descripción detallada del proceso de producción de detergente tipo LABS del presente proyecto. El proceso de producción se divide en tres grandes secciones, en función de la reacción que tenga lugar.

#### Sección 100: Reacción de alquilación

En la primera sección del proceso se lleva a cabo la alquilación del benceno con dodeceno para producir dodecibenceno (LAB) y la separación de estos productos mediante dos columnas de destilación.

El benceno y dodeceno (corrientes 1 y 2) entran al proceso en estado líquido y en condiciones de presión y temperatura de 1,01 bar y 25°C, siendo impulsadas por las bombas P-101 A/B y P-102 A/B respectivamente hasta el tanque de mezcla TM-101.

En el tanque de mezcla TM-101 se homogeneizan las corrientes 1 y 2 con las corrientes de salida superior de las columnas T-101 y T-102 (corrientes 11 y 16 respectivamente). La corriente 5, salida del tanque de mezcla, se encuentra a 35,70°C y presión atmosférica, y está formada por benceno, dodeceno y una pequeña cantidad de dodecibenceno. Dicha corriente 5 se impulsa mediante las bombas P-103 A/B de forma que la corriente de entrada al reactor R-101 A/B se encuentre a 10 bar. Asimismo, la corriente de salida de la bomba (corriente 6) se alimenta al intercambiador de calor E-101 aumentando su temperatura hasta 125°C.

La corriente 7 se alimenta al reactor R-101 A/B en las condiciones de operación (125°C y 10 bar), donde tendrá lugar la reacción de alquilación. La corriente de salida del reactor (corriente 8) presentará el dodecibenceno formado, benceno en exceso y dodeceno no reaccionado a una temperatura de 147,17°C. Esta mezcla se dirige a la sección de separación, cuyo objetivo es la recuperación del benceno y dodeceno no reaccionados para su recirculación al tanque de mezcla TM-101, así como la obtención de LAB con la pureza deseada para su posterior sulfonación.

La separación se lleva a cabo en una secuencia de dos columnas de destilación operando a vacío, lo que reduce las temperaturas de operación, con el objetivo de aumentar la seguridad en planta y permitir la utilización de vapor de agua como utilidad en las calderas. La primera columna, T-101, consiste en una columna de rectificación que opera a 0,2 bar, donde el componente más volátil (benceno) se separa en la corriente de cabezas. La segunda columna, T-102, consiste en una columna de agotamiento que opera a 0,1 bar, y que tiene la finalidad de eliminar el dodeceno de la corriente 13, con el objetivo de conseguir una corriente de colas prácticamente pura. Las corrientes de cabezas de ambas columnas se recirculan al tanque de mezcla TM-101 para el acondicionamiento previo a la entrada a los reactores R-101 A/B, lo que mejora significativamente la eficiencia del proceso y reduce tanto el consumo de materias primas como la generación de residuos.

La corriente 8 pasa por la válvula VLV-101, que se utiliza para mantener el vacío en las columnas de destilación T-101 y T-102, actuando como frontera. La corriente de salida de la válvula (corriente 9), se encontrará a 0,2 bar y 36,47°C, con una fracción de vapor de 0,56. Dicha corriente se introduce a la columna de destilación T-101, la cual opera a vacío, con una presión de 0,2 bar. La corriente de salida del condensador de la columna E-102, compuesta únicamente por benceno, se encuentra a 35,38°C y pasa al tambor de reflujo V-101. La bomba de vacío VP-101 A/B se encuentra conectada al tambor de reflujo. La corriente de salida superior de la torre (corriente 10) se impulsa mediante la bomba P-104 A/B para que llegue a presión atmosférica al tanque de mezcla TM-101, recirculando así el benceno no reaccionado. La caldera de la columna, E-103, calienta hasta 248,6°C. La corriente de salida inferior de la columna (corriente 12) compuesta por dodeceno y dodecibenceno pasa por el intercambiador de calor E-104 para enfriar hasta 216,04°C (corriente 13).

La corriente 13 se alimenta a la columna de *stripping* T-102, que opera a 0,1 bar. La corriente de salida superior de la columna (corriente 14) se encuentra a 230,91°C y en fase vapor, por lo que se hace pasar por el intercambiador de calor E-105 para condensarla. La corriente de salida del intercambiador (corriente 15) se encuentra en fase líquida y 152,2°C y se alimenta a un tanque de condensado, el cual está conectado a la bomba de vacío VP-102 A/B. La salida del tanque de condensados V-102, se impulsa mediante las bombas P-105 A/B hasta el tanque de mezcla TM-101 a presión atmosférica, recirculando así el dodeceno no reaccionado. Asimismo, la caldera (E-

106) calienta el dodecilbenceno hasta 238,40°C. La corriente de salida inferior de la torre (corriente 17) se dirige a la sección 200 para el acondicionamiento del LAB para la sulfonación.

### **Sección 200: Reacción de sulfonación**

En la segunda sección del proceso se lleva a cabo la reacción de sulfonación del dodecilbenceno (LAB) con óleum para obtener ácido dodecilbencensulfónico (LABSA). Se desea que esta reacción transcurra a 40°C y presión atmosférica, por lo que será necesario un acondicionamiento previo del LAB. Al final de esta sección, tiene lugar la separación del LABSA del ácido sulfúrico en un decantador utilizando agua como disolvente.

La corriente 17, salida de la columna T-102, está compuesta por dodecilbenceno y una mínima cantidad de dodeceno y se encuentra a 0,11 bar y 238,40°C. Por tanto, es necesario aumentar su presión mediante la bomba P-201 A/B para que llegue al reactor de sulfonación a presión atmosférica. La corriente de salida de la bomba (corriente 18) se enfría en el intercambiador de calor E-201 hasta 40°C. Por otro lado, el óleum 22%, almacenado a condiciones atmosféricas (corriente 20), se impulsa mediante las bombas P-202 A/B (corriente 21) y se aumenta su temperatura hasta 40°C (corriente 22) mediante el intercambiador de calor E-202.

Se introducen al reactor R-201 las corrientes 19 y 22 en las condiciones de operación. La corriente de salida del reactor de sulfonación (corriente 23) se encuentra igualmente a 40°C y está compuesta por el LABSA formado y por el LAB, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, SO<sub>3</sub> y dodeceno sin reaccionar.

La corriente 23 se impulsa hasta el decantador D-201 mediante las bombas P-203 A/B. A su vez, el agua almacenada (corriente 25) se impulsa al proceso mediante las bombas P-204 A/B (corriente 26) y se calienta en el intercambiador E-202 hasta 40°C (corriente 27). La corriente 27 se divide en dos, la corriente 28, que se introduce al decantador, y la 38. En el decantador D-201 se separan dos fases, la fase acuosa (corriente 29) compuesta por el ácido sulfúrico y parte del agua, y la fase orgánica. La fase orgánica (corriente 30) contiene el dodecilbenceno, el ácido dodecilbencensulfónico, y una pequeña cantidad de agua y ácido sulfúrico. Cabe destacar que el trióxido de azufre que entra al decantador reacciona al entrar en contacto con el agua, dando lugar a más ácido sulfúrico.

Finalmente, la corriente 29, al tratarse de una disolución de ácido sulfúrico con una composición del 92,4%, se almacena para vender como subproducto. Mientras que la corriente 30 se dirige a la sección 300.

### **Sección 300: Reacción de neutralización**

La sección 300 corresponde a la neutralización del ácido dodecilbencensulfónico con una disolución de hidróxido de sodio para obtener el dodecilbencenosulfonato de sodio (LAS). Finalmente, se mezcla el LAS con los aditivos necesarios y se diluye en agua para obtener el detergente con la composición deseada.

La reacción de neutralización se quiere llevar a cabo a 50°C y 1 atm, por lo que será necesario acondicionar las corrientes de alimentación al reactor. Primeramente, la corriente 30, salida del decantador, se impulsa mediante la bomba P-301 A/B (corriente 31) y se calienta hasta 50°C con el intercambiador de calor E-301. Por otro lado, la disolución de NaOH 20% a condiciones atmosféricas (corriente 33) se impulsa mediante la bomba P-302 A/B (corriente 34) y se calienta hasta 50°C con el intercambiador de calor E-302 (corriente 35).

El reactor de neutralización R-301 dispone de dos entradas, la corriente 35 y la corriente 30. Ambas corrientes entran a condiciones de presión y temperatura de 1,01 bar y 50°C, de acuerdo con las condiciones establecidas para que tenga lugar la reacción de neutralización. En este reactor

tienen lugar dos reacciones, la neutralización del LABSA con NaOH dando lugar al LAS, y a su vez, el  $H_2SO_4$  aún presente en la corriente 35 reacciona con NaOH produciendo sulfato de sodio. Por tanto, la salida del reactor (corriente 36) está compuesta principalmente por dodecilsulfonato de sodio y agua, pero además contiene sulfato de sodio, hidróxido de sodio, LABSA, LAB y dodeceno.

La corriente 36, producto de la reacción de neutralización, se impulsa mediante la bomba P-303 A/B (corriente 37) hasta la entrada al tanque de mezcla TM-301, donde tiene lugar la homogeneización del producto final a condiciones de operación de 1,01 bar y 50°C. En dicho tanque se encuentran como corrientes de entrada, además de la corriente 37, las corrientes 40, 42, 43, 44 y 45, formadas por agua, dietanolamina de coco, pirofosfato de tetrapotasio, tolueno sulfonato de potasio y metasilicato de sodio respectivamente. Cabe destacar que el pirofosfato de tetrapotasio, el tolueno sulfonato de potasio y el metasilicato de sodio, al tratarse de componentes sólidos, se desplazan mediante cintas transportadoras. Las cantidades se introducen en función de la formulación final del detergente deseada, la cual determina las propiedades del producto final. Una vez mezcladas, se obtiene el detergente final, que sale como corriente 47 y puede dirigirse a operaciones posteriores de almacenamiento, envasado o distribución.

## 9.2 Descripción de equipos

### 9.2.1 Sección 100

#### 9.2.1.1 R-101A/B

Los reactores R-101 A/B, los cuales llevan a cabo la reacción de alquilación, se encuentran diseñados de manera detallada en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte B*.

Los reactores 101 A/B se tratan de reactores de lecho fijo, en los que se produce una reacción de alquilación entre el benceno y dodeceno en presencia de un catalizador sólido ácido, concretamente ácido tungstosulfúrico soportado en sílice, con el objetivo de obtener dodecilsulfonato (LAB). Dicha reacción es de naturaleza exotérmica y el modo de operación es adiabático, por lo que el reactor estará recubierto por un aislante.

La conversión de la reacción es del 95% respecto al dodeceno y se alimenta el benceno en exceso con una relación molar 20:1 respecto al dodeceno con el objetivo de evitar que se produzcan reacciones secundarias. La presión de operación del reactor R-101 A/B es de 10 bar y la temperatura de alimentación es de 125°C, mientras que la temperatura final es de 147,17°C.

Se denomina R-101 A/B debido a que se requieren dos reactores conectados en paralelo. Esto se debe a que el catalizador empleado, cada 400 horas pierde actividad catalítica y, por tanto, necesita ser regenerado. De esta manera, una vez se desactiva uno de los lechos, este se pondrá a regenerar y operará el otro reactor.

#### 9.2.1.2 T-102

El diseño riguroso de la columna de destilación T-102 se encuentra en el *Anexo II: Cálculos justificativos Parte C* del presente documento. Se trata de una columna de agotamiento, en la cual el vapor ascendente arrastra el dodeceno contenido en el líquido descendente, permitiendo así su salida por la corriente de cabezas en fase vapor.

El objetivo principal de esta columna es obtener una corriente de dodecilsulfonato con una pureza del 99,98% por el fondo, destinada a optimizar la etapa posterior de sulfonación.

La columna cuenta con 21 platos de tipo perforado, con una separación de 0,4m entre ellos. El diámetro externo es de 0,36 m, un espesor de carcasa de 5,96 mm y una altura total de 9,44 m sin incluir los cabezales.

Al ser la presente una columna *stripping*, no contará con condensador, al no existir una corriente de reflujo, pero se requiere el uso de una caldera. El sistema de vacío se crea con una bomba de vacío VP-102 A/B, la cual está conectada al tanque de condensados V-102, donde se acumula el líquido condensado procedente de la corriente de cabezas. Este sistema permite mantener la columna operando a 0,1 bar.

Dado que la columna trabaja a temperaturas elevadas, cuenta con un sistema de aislamiento térmico para reducir las pérdidas de calor. El espesor del aislante será de 76,2 mm.

### 9.2.1.3 Equipos generales

Tabla 16. Descripción de los equipos de la sección 100. Fuente: Elaboración propia

Sección 100		
Identificación	Equipo	Función
P-101 A/B	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 1 de 1,01 bar a 3,5 bar
P-102 A/B	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 3 de 1,01 bar a 2,5 bar
TM-101	Tanque de mezcla	Mezcla las corrientes 1,3,11 y 16 y sale la 5 a 35,70°C y 1,01 bar
P-103 A/B	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 5 de 1,01 bar a 10,80 bar
E-101	Intercambiador de calor	Aumenta la temperatura de la corriente 6 de 35,70°C a 125,00°C
R-101 A/B	Reactor	Se alimenta la corriente 7 y lleva a cabo la reacción de alquilación saliendo la corriente 8 como producto
VLV-101	Válvula	Mantiene el vacío en las columnas de destilación T-101 y T-102
T-101	Columna de destilación	Separa la corriente 9, saliendo el benceno por la parte superior y el dodeceno y LAB por la parte inferior, opera a 0,2 bar
VP-101 A/B	Bomba de vacío	Mantiene la presión de operación de la columna T-101 en 0,2 bar
E-102	Intercambiador de calor	Condensador total de la columna de destilación T-101, su función es condensar completamente la salida superior de la columna
V-101	Tanque de reflujo	Almacena la corriente condensada en el E-102, tiene 2 salidas, el reflujo que entra a la columna y la que sale como destilado
E-103	Intercambiador de calor	Caldera parcial de la columna de destilación T-101, busca vaporizar parcialmente la corriente líquida que sale por colas
P-104	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 10 de 0,19 bar a 2 bar
E-104	Intercambiador de calor	Disminuye la temperatura de la corriente 12 de 248,60°C a 216,04°C
T-102	Columna de destilación	Torre de <i>stripping</i> que separa la corriente 13, saliendo dodeceno por la parte superior y dodecibenceno por colas
VP-102 A/B	Bomba de vacío	Mantiene la presión de operación de la columna T-102 en 0,1 bar
E-105	Intercambiador de calor	Disminuye la temperatura de la corriente 14 de 230,91°C a 152,20°C y la condensa
V-102	Tanque de condensados	Almacena la corriente condensada por el intercambiador E-105
P-105	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 15 de 0,10 bar hasta 3,5 bar
E-106	Intercambiador de calor	Caldera parcial de la columna T-102, busca vaporizar parcialmente la corriente líquida que sale por colas

## 9.2.2 Sección 200

### 9.2.2.1 R-201

En el reactor R-201 se lleva a cabo una reacción homogénea, la sulfonación del dodecilbenceno (LAB) con óleum 22%. Es un reactor de tanque agitado que cuenta con una camisa de refrigeración debido a la naturaleza exotérmica de la reacción y que el modo de operación es isotérmico. Este reactor se diseña en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte D*.

La conversión de la reacción es del 95% respecto al dodecilbenceno y se alimenta el trióxido de azufre presente en el óleum en un mínimo exceso con una relación molar 1,01:1 respecto al dodecilbenceno. Las condiciones de operación son de presión atmosférica y 40°C, con el fin de evitar reacciones secundarias y generación de subproductos no deseados.

### 9.2.2.2 Equipos generales

Tabla 17. Descripción de los equipos de la sección 200. Fuente: Elaboración propia

Sección 200		
Identificación	Equipo	Función
P-201	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 17 de 0,11 bar a 2 bar
E-201	Intercambiador de calor	Disminuye la temperatura de la corriente 18 de 238,40°C a 40°C
P-202	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 20 de 1,01 bar a 3 bar
E-202	Intercambiador de calor	Aumenta la temperatura de la corriente 21 de 25°C a 40°C
R-201	Reactor	Hace reaccionar las corrientes 19 y 22 saliendo la 23 como producto
P-203	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 23 de 1,01 bar a 2 bar
D-201	Decantador	Se alimenta por las corrientes 24 y 28 y separa la fase orgánica (corriente 30) y acuosa (corriente 29)
P-204	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 25 de 1,01 bar a 2 bar
E-203	Intercambiador de calor	Aumenta la temperatura de la corriente 26 de 25°C a 40°C

## 9.2.3 Sección 300

Tabla 18. Descripción de los equipos de la sección 300. Fuente: Elaboración propia

Sección 300		
Identificación	Equipo	Función
P-301	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 30 de 1,01 bar a 1,8 bar
E-301	Intercambiador de calor	Aumenta la temperatura de la corriente 31 de 44,31°C a 50°C
R-301	Reactor	Reacciona la corriente 32 con la corriente 35 y sale como producto la corriente 36
P-302	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 33 de 1,01 bar a 2,5 bar
E-302	Intercambiador de calor	Aumenta la temperatura de la corriente 34 de 25°C a 50°C
P-303	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 36 de 1,01 bar a 1,5 bar
TM-301	Tanque de mezcla	Mezcla las corrientes 37, 40, 43, 44, 45 y 46, saliendo la corriente 47, producto final del proceso
P-304	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 38 de 1,2 bar a 2 bar
E-303	Intercambiador de calor	Aumenta la temperatura de la corriente 39 de 40°C a 50°C
P-305	Bomba	Aumenta la presión de la corriente 41 de 1,01 bar a 2,4 bar
E-304	Intercambiador de calor	Aumenta la temperatura de la corriente 42 de 25°C a 50°C

### 9.3 Descripción de la instalación

La descripción de la instalación comprende la disposición general de las unidades de proceso, almacenamiento y servicios. Esta distribución busca optimizar la operación, reducir costos y facilitar el mantenimiento. Se consideran para ello aspectos técnicos, de seguridad y espacio disponibles. El diseño de la instalación se adapta a las necesidades y condiciones del proceso. (124)

#### 9.3.1 Área de almacenamiento

En primer lugar, la planta cuenta con una zona de almacenamiento para las materias primas implicadas en el proceso, así como para los productos obtenidos. Para definir las condiciones de almacenamiento y el tipo de instalación necesaria, se han considerado las propiedades físicas y químicas de cada compuesto estudiadas en el apartado 5. Materias primas, producto y subproductos.

Esta zona se ha ubicado en el plano de implantación lo más cerca posible de la zona de proceso, con el objetivo de minimizar tiempos de transporte y operación.

#### 9.3.2 Edificios auxiliares

Se definen como edificios auxiliares aquellos necesarios en las instalaciones para desarrollar operaciones complementarias a las unidades principales del proceso. A continuación, se identifican los diferentes edificios presentes en la planta:

- **Vestuario:** Se dispone de vestuarios destinados al cambio de ropa y los correspondientes equipos de protección individual (EPIs). Se dividen en áreas separadas por género y cuentan con taquillas individuales.
- **Cafetería/comedor:** Espacio destinado al descanso y consumo de alimentos. Dispone de máquinas de venta y servicio de comedor.
- **Oficinas administrativas:** Son los edificios relacionados con la gestión, administración y recursos humanos.
- **Laboratorio:** Se dispondrá de un laboratorio de I+D+I, aplicada a la mejora del desarrollo del producto con el objetivo de mejorar las rutas de producción y la sostenibilidad del proceso.
- **Laboratorio de control de calidad:** Destinado a la realización de ensayos y análisis especializados tanto al producto final como a los productos intermedios con el objetivo de proporcionar confiabilidad y seguridad, así como el cumplimiento de especificaciones siguiendo las normas establecidas.
- **Sala de control:** Es el área destinada a la supervisión y operación remota de los procesos mediante sistemas de control automáticos establecidos en los equipos a través de programas informáticos especializados.
- **Taller de mantenimiento:** En el taller de mantenimiento se encuentran el cuarto de mantenimiento y herramientas, que tiene la función de almacenar las herramientas necesarias para la producción y la zona del taller, en la que se llevarán a cabo tareas de mantenimiento.
- **Almacén general:** Se dispone de un almacén general para guardar los elementos necesarios en planta pero que no están directamente implicados en el proceso de fabricación.
- **Instalaciones médicas:** Se dispone de una sala de primeros auxilios mínimos, de acuerdo con los peligros potenciales del presente proyecto.

### 9.3.3 Sistemas externos y utilidades

- Estacionamientos: Consiste en el espacio destinado para el estacionamiento de los vehículos individuales de trabajadores de manufactura, empleados de oficina y visitantes. Se sitúa en la entrada a las instalaciones.
- Instalaciones de carga y descarga: Área habilitada para la recepción de materias primas y expedición de productos terminados.
- Zona de utilidades: Áreas destinadas para los equipos y sistemas de soporte necesarios para la operación del proceso, tales como sistemas de generación de vapor, agua de enfriamiento, electricidad etc.
- Zona de tratamiento: Es la zona dedicada al tratamiento y gestión de los efluentes líquidos. Se dispone de una depuradora para el tratamiento de las aguas residuales del proceso y de los diferentes servicios auxiliares.

## 10 Control e instrumentación

### 10.1 Introducción

El principal objetivo de este apartado es describir los mecanismos de control necesarios en la planta de producción de detergente tipo LABS.

Cualquier sistema de control tiene como objetivo mantener una operación segura y estable de la planta. Durante el funcionamiento de una planta química, esta está sujeta a perturbaciones, por lo que es necesario vigilar continuamente el proceso y actuar constantemente para corregir las desviaciones detectadas. (126)

Para mantener la seguridad en la planta es de vital importancia que determinadas variables de operación, tales como temperaturas, presiones, niveles o composiciones, no superen unos determinados valores límite. (126)

### 10.2 Definiciones y conceptos básicos de los sistemas de control de procesos

Desde el punto de vista del control, las variables que describen el comportamiento dinámico del proceso se pueden clasificar en dos grupos, variables de entrada y de salida. Las variables de entrada representan los efectos de los alrededores en el proceso. Las variables de salida representan los efectos del proceso en los alrededores, y se pueden clasificar en medidas, si se pueden medir directamente, o no medidas, si no pueden ser medidas directamente. (126)

A su vez, las variables de entrada se pueden clasificar en variables manipuladas o de perturbación. Las variables manipuladas son aquellas que pueden ser modificadas libremente por un operario o por el sistema de control. Mientras que, las variables de perturbación son aquellas que no son alteradas por un operario o sistema de control, sino por el medio. Algunas perturbaciones son fácilmente medibles, pero otras requieren instrumentos muy caros o no se pueden medir con la precisión necesaria en tiempo real. (126)

Es necesario conocer conceptos como el de variable controlada, punto de consigna y variable manipulada. La variable controlada es la variable que se busca mantener en un valor deseado. Este valor deseado es el punto de consigna o *set-point*. La variable manipulada es la variable del proceso empleada para corregir el efecto de las perturbaciones. (126)

Otros conceptos de importancia son los elementos básicos de un sistema de control automático de proceso, se describen a continuación:

- Sensores, son los instrumentos encargados de medir las variables a controlar, las perturbaciones medibles y otras variables secundarias. Su funcionamiento se basa en medir un fenómeno físico cuya magnitud esté relacionada con la variable a medir. (126)
- Transmisores, encargados de convertir la magnitud medida por el sensor en una señal estándar eléctrica, neumática o digital, que pueda transmitirse al controlador sin ser perturbada y entendida por el controlador. (126)
- Controlador, este recibe la señal del transmisor correspondiente a la variable medida y calcula la acción de control. Esta acción de control se calcula mediante un algoritmo de control, que puede ser de varios tipos. Se distinguen entre controladores analógicos y digitales. (126)

Los controladores analógicos reciben, procesan y envían señales eléctricas continuas en el tiempo. Mientras que, los controladores digitales disponen de convertidores analógico-digital (AD) y digital-analógico (DA). (126)

- Actuador, se encarga de la manipulación de la variable de proceso según la acción calculada por el controlador. Los actuadores, o también conocidos como elemento final de control, más comunes son las válvulas de control. (126)

### 10.3 Métodos de control

Existen principalmente dos tipos de estrategias de control, el control secuencial y el control continuo. El control secuencial se basa en el seguimiento del estado de las variables del proceso, sin considerar su valor cuantitativo. En este enfoque las señales son de tipo binario, es decir, las respuestas son sí/no, encendido/apagado o abierto/cerrado, lo que permite establecer secuencias lógicas de operación. Este tipo de control es fundamental para automatizar operaciones, como arranque y parada de equipos o la activación de alarmas, mediante autómatas programables conocidos como PLC (*Programmable Logic Controller*). Este control se implementa en los reactores R-101 A/B como se explica más adelante.

El control continuo se interesa por el valor numérico de las variables, que presentan una evolución constante en el tiempo. Existen diferentes estrategias de control continuo, pero las empleadas en el diseño del sistema son dos, los lazos *feedback* y el control en cascada. (126)

### 10.4 Algoritmos de control

Un algoritmo de control es un conjunto de instrucciones lógicas matemáticas que determinan cómo debe actuar el controlador frente a perturbaciones. Los tres tipos básicos de algoritmos de control son el proporcional (P), el proporcional e integral (PI) y el proporcional, integral y derivativo (PID). (126)

El control proporcional P es el algoritmo más sencillo. Su objetivo es reducir las oscilaciones de la variable controlada, pero no logra devolverla exactamente al valor de consigna o *setpoint*, por lo que siempre existe un error denomina *offset*. Su principal ventaja es que ofrece una respuesta rápida en comparación con otros algoritmos más complejos.

El control proporcional e integral (PI) permite devolver al proceso a estado estacionario eliminando el *offset* y devolviendo la variable controlada al *setpoint*. Al combinar la acción proporcional con la integral se obtiene una respuesta rápida.

El control proporcional, integral y derivativo (PID) incorpora la acción derivativa que hace que el controlador se pueda anticipar al comportamiento del sistema, mejorando la estabilidad y velocidad del sistema. Por lo tanto, se genera una respuesta rápida y sin *offset*. Su principal desventaja consiste en que la acción derivativa puede amplificar el ruido del sistema.

Para la selección de los controladores de cada lazo es necesario tener en cuenta que las generalidades dan una idea, pero esta no es suficiente, se debe de trabajar delante del proceso. La selección del controlador real sólo se puede llevar a cabo mediante el ajuste del controlador al proceso.

El lazo de control más empleado en la planta es el *feedback*. El funcionamiento de este lazo es el más simple. Si sobre el proceso actúa una perturbación (P) que afecta a la variable controlada (VC), es medida por el medidor-transmisor, esta variable medida (Vm) se compara con el *setpoint* (SP) y si el controlador detecta cierta diferencia entre ambos valores, un error (E), manda una señal (Sc) que llega al actuador para que cambie la variable manipulada (VM), devolviendo la variable controlada al *setpoint*. En la Figura 28 se muestra el esquema.

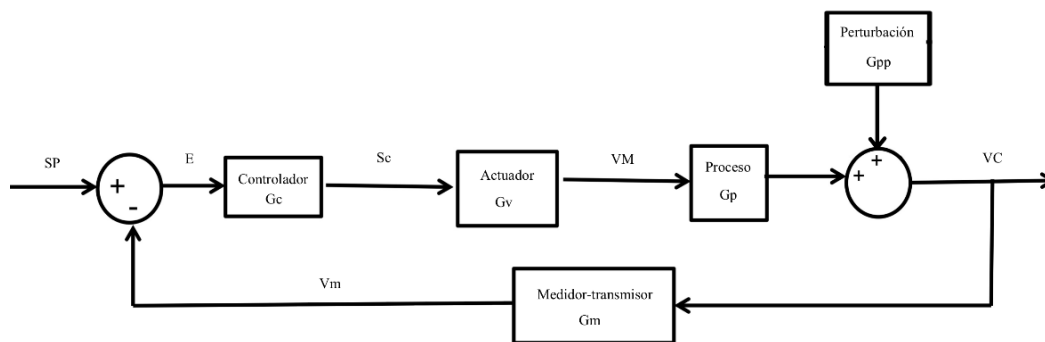


Figura 28. Esquema del lazo de control feedback. Fuente: Elaboración propia

El otro lazo que se emplea en la planta es en cascada. Es un control avanzado, con estrategias más complejas con el fin de conseguir asegurar la seguridad de la variable controlada. Los lazos en cascada utilizan la medida de variables internas para la rápida detección de perturbaciones. Su principal característica es que cuenta con dos controladores, el primario o principal y el secundario. Si sobre el proceso actúa una perturbación (P) que afecta a la variable controlada principal (VC1), esta es medida por el sensor-transmisor primario y esta variable medida (Vm1) se compara con el valor del *setpoint* (SP1). Si el controlador primario detecta diferencia entre ambos valores (E1) manda una señal al controlador secundario. El controlador primario fija el *setpoint* del controlador secundario (SP2). El sensor-transmisor secundario también mide la variable secundaria controlada (VC2), la variable medida (Vm2) se compara con el *setpoint* (SP2). Si el controlador secundario detecta una diferencia (E2) manda una señal (Sc2) al actuador que cambia el valor de la variable manipulada (VM) para devolver a la variable controlada principal (VC1) al *setpoint* (SP1). En la Figura 29 se muestra el esquema.

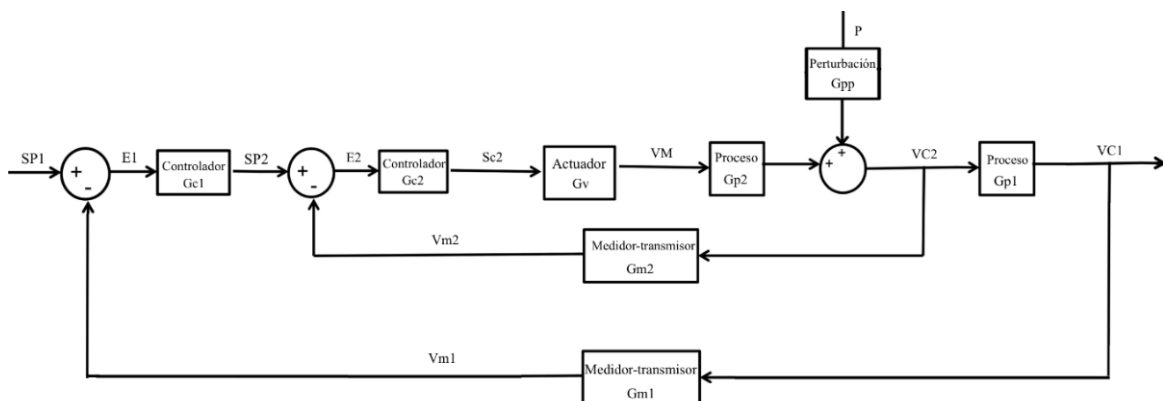


Figura 29. Esquema del lazo de control en cascada. Fuente: Elaboración propia

### 10.5 Nomenclatura empleada

Para la identificación de los elementos de los lazos de control se emplea la nomenclatura internacional estándar ISA-5.1-2009. Los elementos se identifican por un código alfanumérico formado por tres letras y tres números. La letra en primera posición indica la variable controlada por el sistema y las sucesivas letras indican el instrumento utilizado para el control. En la Tabla 19 se muestra la nomenclatura empleada y su significado.

Tabla 19. Nomenclatura empleada en los lazos de control. Fuente:(127)

Letras	Primera posición		Sucesivas posiciones		
	Primera letra	Modificador	Función de lectura pasiva	Función de salida	Modificador
A	Composición		Alarma		
C	Libre		Control		
D	Densidad/peso específico	Diferencial			
F	Caudal	Relación			
H	Manual		Alto		
I	Intensidad		Indicador		
L	Nivel		Luz piloto		
P	Presión/vacío		Punto prueba		
R	Radiación		Registrador		
S	Velocidad	Seguridad	Interruptor		
T	Temperatura		Transmisor		
V	Vibración		Válvula		
Y			Conversor		

La simbología empleada para representar dónde se encuentran los instrumentos en planta se muestran en la Figura 30. El primero según función es un elemento discreto y según localización es un equipo montado en planta. El segundo según función es el elemento que realiza la función de control y según localización es un equipo montado en la sala de control.

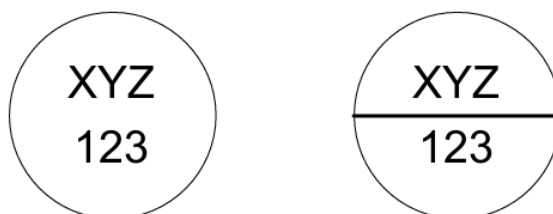


Figura 30. Simbología de la localización de los instrumentos. Fuente: Elaboración propia

Por última, existe una simbología, basada en patrones de línea, relacionada con las conexiones entre los equipos de planta. Se muestra en la Figura 31.

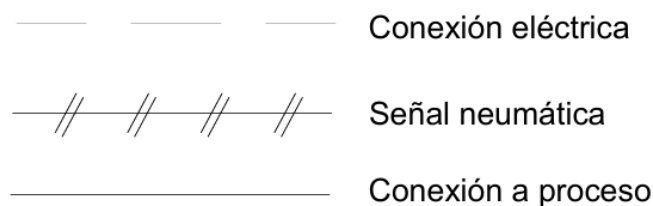


Figura 31. Simbología de las conexiones. Fuente: Elaboración propia

## 10.6 Descripción de los lazos de control

En este apartado se explica cada uno de los lazos implementados, dividiendo el análisis por secciones. Es importante señalar que el control de presión en las bombas se limita a aquellos casos en los que resulta estrictamente necesario mantener una presión de descarga precisa. Por ello, se implementa únicamente en aquellas corrientes de alimentación asociadas a equipos cuya operación requiere una presión de entrada específica y constante. Las conexiones de las señales transmisor y controlador son eléctricas. Estas conexiones son las más empleadas a nivel industrial. Todas las válvulas son neumáticas, ya que son adecuadas para el proceso y presentan un coste más económico frente a las eléctricas, por lo que se emplean transductores de señal eléctrica a neumática.

### 10.6.1 Sección 100

El objetivo de esta sección es mantener las condiciones deseadas para la reacción de alquilación y las condiciones para la secuencia de separación, que incluye una columna de destilación para el benceno y un *stripping* para el dodeceno y dodecilbenceno, trabajando ambas al vacío. También se analiza el control para el correcto funcionamiento de los equipos implicado en esta sección.

Cabe mencionar que, los reactores R-101 A/B no requieren de un sistema de control, ni de temperatura ni de presión, dado que operan en régimen adiabático y no intervienen fases gaseosas. Bajo estas condiciones, la evolución térmica del sistema depende únicamente de la reacción química, sin necesidad de intervención externa. Por tanto, se considera suficiente la instalación de alarmas que actúen ante posibles desviaciones respecto a los límites de seguridad establecidos. Para el cambio entre cada uno de los reactores se emplea un sistema de control mediante PLC (Control Lógico Programable), para una vez alcanzado el tiempo de vida del catalizador, introducir la alimentación al segundo reactor y poner el primero a regenerar.

La columna T-101 y el *stripping* T-102 usan bombas de vacío VP-101 A/B y VP-102 A/B. Estas bombas están conectadas, en el caso de la columna al tambor de reflujo y en el del *stripping* a el tanque de condensados. Para asegurarse de que, a la salida de las bombas de vacío, el aire no arrastre compuestos y los libere a la atmósfera, se instalan detectores de carbono orgánico total AT-105 y AT-111. En el caso de que se detecten fracciones de los compuestos se llevan a combustión mediante la antorcha.

#### Lazo LIC-101

En el tanque de mezcla TM-101 es necesario controlar el nivel del líquido, por ello se implementa el lazo de control LIC-101. Es un lazo *feedback*, donde la variable controlada es el nivel del líquido en el tanque TM-101 y la variable manipulada el caudal de salida de este, la corriente 5. El lazo funciona de forma que, el transmisor LT-101 mide el nivel del tanque y el controlador LIC-101 compara este valor con el de referencia o *setpoint*. Si detecta un aumento o disminución envía una señal eléctrica que pasa por el transductor LT-101 para convertirse en una señal

neumática. Esta señal neumática llega a la válvula LCV-101 y provoca que esta se abra o cierre, permitiendo el paso de un mayor o menor caudal de salida, y devolviendo el nivel del tanque al *setpoint*. Los sistemas de control de nivel suelen ser de tipo P, y como en este caso el *offset* no supone un problema se decide seleccionar este tipo. Sin embargo, hay que hacer constar que la correcta selección del algoritmo de control sólo se puede hacer mediante el ajuste del controlador al proceso. Por lo tanto, en este y los próximos lazos de control, la sugerencia del algoritmo debe de ser comprobada mediante técnicas de ajuste. Los elementos del lazo de control se muestran en la Tabla 20.

Tabla 20. Lazo LIC-101. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-101	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel en el interior del tanque TM-101
LIC-101	Controlador indicador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LCV-101
LY-101	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-101 a neumática para accionar la válvula LCV-101
LCV-101	Válvula de control de nivel	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente 5, la salida del tanque TM-101

### Lazo PIC-102

El lazo PIC-102 se basa en el control de la presión a la salida de las bombas P-103 A/B. El objetivo del lazo es mantener una presión estable en la corriente 6 que es alimentada a los reactores de alquilación R-101 A/B. El control se realiza indirectamente mediante la manipulación del caudal de retorno implementado a la salida de las bombas, con el controlador de presión PIC-102. Se emplea un lazo *feedback*, donde el transmisor PT-102 mide la presión a la salida de la bomba, y el controlador e indicador PIC-102, que compara el valor medido con el valor del *setpoint*, envía una señal con instrucciones en caso de que no se cumpla la igualdad. Esta señal que es eléctrica pasa por el transductor PY-102, y llega como señal neumática a la válvula de control PCV-102 para modular la apertura en la corriente de recirculación. Una desviación en la presión que entra en el reactor modifica las condiciones de reacción y el producto deseado. Un aumento brusco de la presión interna del reactor es peligroso, por lo que, para mantener la seguridad y rendimiento de producto, se emplea un controlador PID de rápida respuesta que elimina el *offset*. Los elementos del lazo de control se muestran en la Tabla 21.

Tabla 21. Lazo PIC-102. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
PT-102	Transmisor de presión	Mide y transmite el valor de presión en la corriente de salida de las bombas P-103 A/B
PIC-102	Controlador indicador de presión	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control PCV-102
PY-102	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por PIC-102 a neumática para accionar la válvula PCV-102
PCV-102	Válvula de control de presión	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de recirculación de las bombas P-103 A/B

### Lazo TIC-103

El lazo TIC-103 es necesario para controlar la temperatura de salida del intercambiador de calor E-101, ya que la mezcla líquida posteriormente es introducida en los reactores R-101 A/B. La variable manipulada de este lazo es el caudal de fluido calefactor, mientras que la variable controlada es la temperatura de la corriente de salida 7. Se implementa un lazo *feedback*, en el que, si se detecta un cambio en la temperatura de la corriente 7, gracias al sensor TT-103, el controlador TIC-103 envía instrucciones a la válvula TCV-103 para que manipule el caudal de fluido térmico, aumentando o disminuyéndolo. El reactor R-101 A/B no cuenta con un sistema de control de temperatura por lo que aumenta la importancia del control de la temperatura de alimentación, para asegurarse de que las condiciones de operación se cumplen. Se decide, a falta de comprobar delante del proceso el correcto funcionamiento, implementar un control PID para asegurarse de que la respuesta sea rápida y no genere *offset*. En la Tabla 22 se observan los elementos del lazo TIC-103.

Tabla 22. Lazo TIC.103. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-103	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-101
TIC-103	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-103
TY-103	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-103 a neumática para accionar la válvula TCV-103
TCV-103	Válvula de control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido calefactor del intercambiador E-101

### Lazo PIC-104

El lazo PIC-104 se implementa para controlar la presión que sale de la válvula VLV-101 y entra a la columna T-101. La variable controlada es la presión de corriente 9 y la variable manipulada el caudal de recirculación de la válvula VLV-101. Es un lazo *feedback* con control PI, control frecuentemente utilizado en los lazos de presión. Las etiquetas se muestran en Tabla 23. (125)

Tabla 23. Lazo PIC-104. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
PT-104	Transmisor de presión	Mide y transmite el valor de la presión en la corriente de salida de la válvula VLV-101
PIC-104	Controlador indicador de presión	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control PCV-104
PY-104	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por PIC-104 a neumática para accionar la válvula PCV-104
PCV-104	Válvula control de presión	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de recirculación de la válvula VLV-101

### Lazo PIC-105

El lazo PIC-105 sirve para controlar la presión en la columna manipulando el caudal de recirculación de la bomba de vacío VP-101 A/B. Es un lazo *feedback* con un control PI. En la Tabla 24 se muestran los elementos del lazo.

Tabla 24. Lazo PIC-105. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
PT-105	Transmisor de presión	Mide y transmite el valor de presión en la corriente de cabezas de la columna T-101
PIC-105	Controlador indicador de presión	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control PCV-105
PY-105	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por PIC-105 a neumática para accionar la válvula PCV-105
PCV-105	Válvula control de presión	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de recirculación de la bomba de vacío VP-101 A/B

### Lazo LIC-106

En el tambor de reflujo V-101 del caudal condensado se implementa el lazo LIC-106. La variable controlada es el nivel de líquido y la variable manipulada la corriente de salida del tambor de reflujo. Es un lazo *feedback* con algoritmo recomendado de control P. En la Tabla 25 se muestran los elementos del lazo.

Tabla 25. Lazo LIC-106. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-106	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel en el interior del tambor de reflujo V-101
LIC-106	Controlador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LCV-106
LY-106	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-106 a neumática para accionar la válvula LCV-106
LCV-106	Válvula control nivel	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente 10, la salida del tambor de reflujo V-101

### Lazo TIC-107

El lazo TIC-107 controla la temperatura en cabezas de la columna T-101 mediante la manipulación del caudal de reflujo. Cuando el controlador TIC-107 compara el valor proporcionado por el transmisor TT-107 con el *setpoint*, y estos valores no son iguales manda una señal eléctrica que se convierte a neumática al pasar por el transductor TY-107, y llega a la válvula de control TCV-107 que modifica su apertura devolviendo el valor de temperatura al *setpoint*. Es un lazo de tipo *feedback* con control tipo PID que evite cambios bruscos y proporcione una respuesta rápida para eliminar el *offset*. En la Tabla 26 se muestran los elementos del lazo.

Tabla 26. Lazo TIC-107. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-107	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-102
TIC-107	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-107
TY-107	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-107 a neumática para accionar la válvula TCV-107
TCV-107	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido refrigerante del intercambiador E-102

### Lazo LIC-108

La columna de destilación T-101 necesita también mantener una cantidad de líquido en su fondo para prevenir problemas como la inundación o el vaciado no deseado. Para asegurar este control, se implementa un lazo de tipo *feedback*, el LIC-108, donde la variable controlada es el nivel en la columna y la variable manipulada es el caudal de salida de esta. Al igual que los lazos de nivel descritos anteriormente se recomienda un control P. Los componentes de este lazo de control se detallan en la Tabla 27.

Tabla 27. Lazo LIC-108. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-108	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel en el interior de la columna de destilación T-101
LIC-108	Controlador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LCV-108
LY-108	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-108 a neumática para accionar la válvula LCV-108
LCV-108	Válvula control nivel	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente 12, la salida por colas

### TIC-109

La columna de destilación del benceno T-101 también cuenta con una caldera E-103. El lazo TIC-109 controla la temperatura de la corriente de colas que retorna a la columna, manipulando el caudal del fluido calefactor de la caldera E-103. Es un lazo *feedback* que, al igual que el TIC-107, tiene un control PID debido a la importancia de la temperatura, medida indirecta de la composición. En la Tabla 28 se mencionan los elementos del lazo y sus funciones.

Tabla 28. Lazo TIC-109. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-109	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de recirculación de colas a la columna T-101
TIC-109	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-109
TY-109	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-109 a neumática para accionar la válvula TCV-109
TCV-109	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido calefactor del intercambiador E-103

### Lazo TIC-110

El lazo TIC-110 es necesario para controlar la temperatura de salida del intercambiador de calor E-104, ya que la corriente 13 es posteriormente es introducida en la columna de *stripping* T-102. La variable manipulada de este lazo es el caudal del fluido refrigerante, mientras que la variable controlada es la temperatura de salida de la corriente 13. Se implementa un lazo *feedback*, en el que, si se detecta un cambio en la temperatura de la corriente de salida del intercambiador, gracias al sensor TT-110, el controlador TIC-110 envía instrucciones a la válvula TCV-110 para que manipule el caudal de fluido refrigerante. El control es de tipo PI ya que no es tan sensible al ruido como un PID. En la Tabla 29 se observan los elementos del lazo TIC-110.

Tabla 29. Lazo TIC-110. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-110	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-104
TIC-110	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-110
TY-110	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-110 a neumática para accionar la válvula TCV-110
TCV-110	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido refrigerante del intercambiador E-104

### Lazo PIC-111

El lazo PIC-111 es igual que el PIC-105. La variable controlada es la presión de la corriente de cabezas de la columna de *stripping* T-102, y la variable manipulada la recirculación de las bombas de vacío VP-102 A/B. Es un lazo *feedback* con un control PI. En la Tabla 30 se muestran los elementos del lazo.

Tabla 30. Lazo PIC-111. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
PT-111	Transmisor de presión	Mide y transmite el valor de la presión en la corriente de salida de la bomba de vacío VP-102 A/B
PIC-111	Controlador indicador de presión	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control PCV-111
PY-111	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por PIC-111 a neumática para accionar la válvula PCV-111
PCV-111	Válvula control de presión	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de recirculación de las bombas de vacío VP-102 A/B

### Lazo LIC-112

Al igual que el lazo LIC-106 de la columna de destilación, en el *stripping* se implementa un control de nivel en el tanque de condensados V-102, el lazo LIC-112. La variable controlada es el nivel de líquido y la variable manipulada la corriente de salida del tanque de condensados. Es un lazo *feedback* de control P, que es el control más común para los lazos de nivel. En la Tabla 31 se muestran los elementos del lazo.

Tabla 31. Lazo LIC-112. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-112	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel en el interior del tanque de condensado V-102
LIC-112	Controlador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LCV-112
LY-112	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-112 a neumática para accionar la válvula LCV-112
LCV-112	Válvula control nivel	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de salida del tanque de condensado V-102

### Lazo LIC-113

El lazo LIC-113 es igual que el lazo LIC-108. La columna de rectificación T-102 también necesita mantener una cantidad de líquido y para asegurar este control, se implementa un lazo de tipo *feedback* LIC-113, donde la variable controlada es el nivel de líquido en T-102 y la variable manipulada la corriente de salida del equipo. Al igual que los lazos de nivel descritos el controlador también es P, teniendo en cuenta la importancia de seleccionar finalmente el controlador mediante el ajuste del controlador al proceso. Los componentes de este lazo de control se detallan en la Tabla 32.

Tabla 32. Lazo LIC-113. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-113	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel en el interior de la columna de rectificación T-102
LIC-113	Controlador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LCV-113
LY-113	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-113 a neumática para accionar la válvula LCV-113
LCV-113	Válvula control nivel	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de la salida por colas

### Lazo TIC-114

El lazo TIC-114 es el mismo que el lazo TIC-109 pero aplicado a la columna T-102. Se controla la temperatura de la corriente de colas que retorna a la columna, manipulando el caudal del fluido calefactor de la caldera E-106. Es un lazo *feedback* con un control PID debido a la importancia de la temperatura como medida indirecta de la composición. En la Tabla 33 se mencionan los elementos del lazo y sus funciones.

Tabla 33. Lazo TIC-114. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-114	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de recirculación de colas a la columna T-102
TIC-114	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-114
TY-114	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-114 a neumática para accionar la válvula TCV-114
TCV-114	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido calefactor del intercambiador E-106

### 10.6.2 Sección 200

El objetivo de esta sección es obtener las condiciones deseadas para la reacción de sulfonación R-201 a partir de la corriente que proviene de la sección 100 y de la corriente de óleum 22% almacenado. El reactor opera en régimen isotérmico, por lo que cuenta con una camisa de refrigeración, se estudia el control del equipo. También se analiza si el decantador D-201 necesita control.

#### Lazo PIC-201

Se trata del lazo que garantiza que la corriente 18 que sale de la bomba P-201A/B llegue al reactor R-201 con la presión requerida. El control se realiza mediante la manipulación del caudal de retorno, supervisado por el controlador de presión PIC-201. Se emplea un lazo *feedback* con control PI. Los elementos del lazo de control se muestran en la Tabla 34.

Tabla 34. Lazo PIC-201. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
PT-201	Transmisor de presión	Mide y transmite el valor de la presión en la corriente de salida de las bombas P-201 A/B
PIC-201	Controlador indicador de presión	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control PCV-201
PY-201	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por PIC-201 a neumática para accionar la válvula PCV-201
PCV-201	Válvula control presión	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de recirculación de las bombas P-201A/B

### Lazo TIC-202

El lazo TIC-202 controla la temperatura de salida del intercambiador de calor E-201, ya que la mezcla líquida posteriormente es introducida en el reactor R-201. La variable manipulada de este lazo es el caudal de fluido de refrigeración, mientras que la variable controlada es la temperatura de salida de la corriente 19. Se implementa un lazo *feedback* con control PID debido a la sensibilidad del reactor R-201 a la temperatura, por lo que se requiere una respuesta rápida que elimine el *offset*. Se asume que en el proceso no existe ruido, dado que en caso de que exista se descartaría este tipo de controlador y se implementaría un control PI. Los elementos del lazo de control se muestran en la Tabla 35.

Tabla 35. Lazo TIC-202. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-202	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-201
TIC-202	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-202
TY-202	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-202 a neumática para accionar la válvula TCV-202
TCV-202	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido calefactor del intercambiador E-201

### Lazo PIC-203

El lazo PIC-203 es igual que el PIC-201. Se trata del lazo que garantiza que la corriente 21 que sale de la bomba P-202A/B llegue al reactor R-201 con la presión requerida. Se trata de un control *feedback* con control PI, donde la variable controlada es la presión de salida de la bomba y la variable manipulada el caudal de retorno de la bomba implementado. Los elementos del lazo de control se muestran en la Tabla 36.

Tabla 36. Lazo PIC-203. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
PT-203	Transmisor de presión	Mide y transmite el valor de presión en la corriente de salida de las bombas P-202 A/B
PIC-203	Controlador indicador de presión	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control PCV-203
PY-203	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por PIC-203 a neumática para accionar la válvula PCV-203
PCV-203	Válvula control presión	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de recirculación de las bombas P-202 A/B

### Lazo TIC-204

El lazo TIC-204 es como el TIC-202, ya que ambos se encargan de controlar que la temperatura de la mezcla líquida introducida en el reactor R-201 es la correcta. La variable manipulada de este lazo es el caudal de fluido de calefacción, mientras que la variable controlada es la temperatura de salida de la corriente 22. Se implementa un lazo *feedback* con control PID y los elementos del lazo se muestran en la Tabla 37.

Tabla 37. Lazo TIC-204. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-204	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-202
TIC-204	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-204
TY-204	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-204 a neumática para accionar la válvula TCV-204
TCV-204	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido calefactor del intercambiador E-202

### Lazo TIC-205 A y B

El reactor R-201 es un reactor continuo de tanque agitado que opera en régimen isotérmico y cuenta con una camisa de refrigeración. Se decide implementar un lazo de tipo cascada para controlar la temperatura en el interior del reactor, ya que es uno de los parámetros críticos de operación. Si ocurre una variación de temperatura pueden iniciarse reacciones secundarias, lo que implica formación de subproductos y la pérdida de la calidad deseada de producto. El control en cascada cuenta con dos controladores, el primario o principal TIC-205 A y el lazo secundario TIC-205 B. La variable controlada principal es la temperatura de operación del reactor R-201. La variable controlada secundaria es la temperatura del refrigerante de entrada a la camisa del reactor. De esta forma, cualquier perturbación relacionada con esta temperatura es compensada por el lazo secundario, manipulando el caudal de refrigerante a la entrada, antes de que afecte a la temperatura del reactor. De esta forma el control se acerca más a un control ideal que lo que correspondería a un simple lazo *feedback*. Cualquier otra perturbación es compensada por el lazo principal, mediante el cambio del *setpoint* del lazo secundario.

Asumiendo un bajo nivel de ruido, se proponen dos algoritmos PID, un control avanzado con respuesta muy rápida, debido a la exotermicidad de la reacción que puede dar lugar a cambios en la temperatura y comprometer tanto la calidad del producto como la seguridad de la planta. Se muestran los elementos del lazo en la Tabla 38.

Tabla 38. Lazo TIC-205 A/B. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-205 A	Transmisor de temperatura primario	Mide y transmite el valor de temperatura en el interior del reactor R-201
TT-205 B	Transmisor de temperatura secundario	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de entrada de la camisa de refrigeración
TIC-205 A	Controlador indicador primario de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y define el valor de consigna del controlador secundario TIC-205 A/B
TIC-205 B	Controlador indicador secundario de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna definida por el controlador primario TIC-205 A y actúa sobre la válvula TCV-205
TY-205	Transductor	Convierte la señal eléctrica de TIC-205 B a neumática para accionar la válvula TCV-205
TCV-205	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido de refrigeración de la camisa del reactor R-201

### Lazo LIC-206

En el reactor R-201 también se implementa un lazo de control del nivel, debido a que un aumento o disminución de este afecta directamente a la integridad del sistema de agitación y de la mezcla reaccionante. El lazo LIC-206 es tipo *feedback*, siendo la variable controlada el nivel en el reactor y la variable manipulada el caudal de la corriente de 23 de salida del reactor. El funcionamiento consiste en que en el caso de que ocurra alguna perturbación, el controlador de nivel LIC-206 compara el *setpoint* con el valor medido por el transmisor de nivel LT-206, y manda una señal eléctrica. Esta señal pasa por el transductor TY-206 que la transforma en neumática para que la válvula de control de nivel LCV-206 se accione para eliminar la perturbación mediante la manipulación del caudal de salida del reactor. Se implementa un control P por ser el más común para los lazos de nivel. En la Tabla 39 se muestran los elementos del lazo.

Tabla 39. Lazo LIC-206. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-206	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel en el interior del reactor R-201
LIC-206	Controlador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LCV-206
LY-206	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-206 a neumática para accionar la válvula LCV-206
LCV-206	Válvula control nivel	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente 23, la salida del R-201

### Lazo TIC-207

El lazo TIC-207 se encargan de controlar que la temperatura del agua que se va a introducir en el decantador D-201 es la adecuada. Siendo, por lo tanto, la variable controlada la temperatura del agua y la variable manipulada de este lazo es el caudal de fluido de calefacción del intercambiador E-203. Se implementa un lazo *feedback* con un control PI. En la Tabla 40 se encuentran explicados los elementos del lazo.

Tabla 40. Lazo TIC-207. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-207	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-203
TIC-207	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-207
TY-207	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-207 a neumática para accionar la válvula TCV-207
TCV-207	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido calefactor del intercambiador E-203

### Lazo LIC-208 y LIC-209

En el decantador se implementan dos lazos de control de nivel, uno para cada una de las fases. Se controla el nivel de la fase superior, la orgánica, mediante el lazo LIC-208 y el de la fase acuosa con el lazo LIC-209. Las variables manipuladas son la corriente de salida de orgánicos en el caso del LIC-208, y la corriente de salida de fase acuosa para el LIC-209. Ambos son lazos *feedback* y su funcionamiento consiste en que si el controlador (LIC-208, LIC-209) detecta una variación respecto al *setpoint* mediante el transmisor de nivel (LT-208 o LT-209), manda una señal eléctrica. La señal pasa por el transductor (LY-208 o LY-209) que la convierte en neumática para que la válvula (LCV-208 o LCV-209) compense la perturbación. El control para los lazos de nivel es tipo P. En la Tabla 41 y en la Tabla 42 se muestran los elementos de los lazos.

Tabla 41. Lazo LIC-208. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-208	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel de fase orgánica en el decantador
LIC-208	Controlador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LCV-208
LY-208	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-208 a neumática para accionar la válvula LCV-208
LCV-208	Válvula control nivel	Aumenta o disminuye el caudal de salida de orgánicos

Tabla 42. Lazo LIC-209. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-209	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel de fase acuosa en el decantador
LIC-209	Controlador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LCV-209
LY-209	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-209 a neumática para accionar la válvula LCV-209
LCV-209	Válvula control nivel	Aumenta o disminuye el caudal de salida de fase acuosa

### 10.6.3 Sección 300

En la sección 300 se estudia la implementación de sistemas de control para el acondicionamiento de las corrientes de entrada al reactor de neutralización R-301, y el propio control del reactor. También se estudia la necesidad de un control para el tanque de mezcla TM-301 y sus corrientes de alimentación.

#### Lazo PIC-301

El lazo PIC-301 garantiza que la corriente 31, que sale de la bomba P-301A/B, llegue al reactor R-301 con la presión requerida. El control se realiza mediante la manipulación del caudal de retorno de las bombas, supervisado por el controlador de presión PIC-301. Se emplea un lazo *feedback* con control PI. Los elementos del lazo de control se muestran en la Tabla 43.

Tabla 43. Lazo PIC-301. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
PT-301	Transmisor de presión	Mide y transmite el valor de presión en la corriente de salida de las bombas P-301 A/B
PIC-301	Controlador indicador de presión	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control PCV-301
PY-301	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por PIC-301 a neumática para accionar la válvula PCV-301
PCV-301	Válvula control presión	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de recirculación de las bombas P-301A/B

#### Lazo TIC-302

El lazo TIC-302 controla la temperatura de salida del intercambiador de calor E-301, la corriente 32, que es una de las entradas a el reactor R-301. La variable manipulada de este lazo es el caudal de fluido de calefacción, mientras que la controlada es la temperatura de salida del intercambiador, la corriente 32. Se implementa un lazo *feedback* con control PID debido a la sensibilidad del reactor R-301 a la temperatura, por lo que se requiere una respuesta rápida que elimine el *offset*. En el caso de que exista ruido el algoritmo es PI. Los elementos del lazo de control se muestran en la Tabla 44.

Tabla 44. Lazo TIC-302. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-302	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-301
TIC-302	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-302
TY-302	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-302 a neumática para accionar la válvula TCV-302
TCV-302	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido calefactor del intercambiador E-301

### Lazo PIC-303

El lazo PIC-303 es igual que el PIC-301. Se trata del lazo que garantiza que la corriente que sale de la bomba P-302A/B llegue al reactor R-301 con la presión requerida. Se trata de un control *feedback* donde la variable controlada es la presión de salida de la bomba y la variable manipulada el caudal de retorno de la bomba. Por lo que, al igual que en el lazo PIC-301 se implementa un control PI. Los elementos del lazo de control se muestran en la Tabla 45.

Tabla 45. Lazo PIC-303. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
PT-303	Transmisor de presión	Mide y transmite el valor de la presión en la corriente de salida de las bombas P-302 A/B
PIC-303	Controlador indicador de presión	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control PCV-303
PY-303	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por PIC-303 a neumática para accionar la válvula PCV-303
PCV-303	Válvula control presión	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente de recirculación de las bombas P-302 A/B

### Lazo TIC-304

El lazo TIC-304 tiene el mismo objetivo que el lazo TIC-302, ya que la temperatura de la corriente que controla también es la entrada para el reactor de neutralización R-301. La variable controlada es la temperatura de salida del intercambiador de calor E-302, y la variable manipulada el caudal de fluido de calefacción. Se implementa un lazo *feedback* con control PID teniendo en cuenta la importancia de la temperatura en el reactor R-301. En la Tabla 46 se muestran los elementos de control del lazo.

Tabla 46. Lazo TIC-304. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-304	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-302
TIC-304	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-304
TY-304	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-304 a neumática para accionar la válvula TCV-304
TCV-304	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido calefactor del intercambiador E-302

### Lazo TIC-305 A y B

El reactor R-301 es un reactor continuo de tanque agitado que opera en régimen isotérmico y cuenta con una camisa de refrigeración. Como en el caso del R-201, se implementa un lazo de tipo cascada para controlar la temperatura en el interior del reactor. El control en cascada cuenta con dos controladores, el primario o principal TIC-305 A y el lazo secundario TIC-305 B. De manera similar a el lazo TIC-205 A y B, la variable controlada principal es la temperatura en el interior del reactor R-301, la variable controlada secundaria es la temperatura de entrada del fluido refrigerante y la variable manipulada el caudal de entrada de fluido refrigerante. Ambos controles son PID, un control avanzado con respuesta muy rápida, debido a la exotermicidad de la reacción que puede dar lugar a cambios en la temperatura y comprometer tanto la calidad del producto como la seguridad de la planta. Se muestran los elementos del lazo en la Tabla 47.

Tabla 47. Lazo TIC-305 A/B. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-305 A	Transmisor de temperatura primario	Mide y transmite el valor de temperatura en el interior del reactor R-301
TT-305 B	Transmisor de temperatura secundario	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de entrada de la camisa de refrigeración
TIC-305 A	Controlador indicador primario de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y define el valor de consigna del controlador secundario TIC-305 A/B
TIC-305 B	Controlador indicador secundario de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna definida por el controlador primario TIC-305 A y actúa sobre la válvula TCV-305
TY-305	Transductor	Convierte la señal eléctrica de TIC-305 B a neumática para accionar la válvula TCV-305
TCV-305	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido de refrigeración de la camisa del reactor R-301

### Lazo LIC-306

Al igual que el reactor de sulfonación R-201, en el reactor de neutralización R-301 también se implementa un control de nivel. El lazo LIC-306 es tipo *feedback* con control P, siendo la variable

controlada el nivel en el reactor y la variable manipulada el caudal de la corriente de 36 de salida del reactor. El funcionamiento se explica en la Tabla 54 del lazo LIC-206.

Tabla 48. Lazo LIC-306. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-306	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel en el interior del reactor R-301
LIC-306	Controlador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LCV-306
LY-306	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-306 a neumática para accionar la válvula LCV-306
LCV-306	Válvula control nivel	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente 36, la salida del R-301

### Lazo TIC-307

El lazo TIC-307 se implementa para controlar la temperatura de alimentación al tanque de mezcla TM-301 que sale del intercambiador E-303. La variable manipulada de este lazo es el caudal del fluido calefactor, mientras que la variable controlada es la temperatura de la corriente 40. Es un lazo *feedback* con control PI, en el que, si se detecta un cambio en la temperatura de la corriente de salida del intercambiador, gracias al sensor TT-307, el controlador TIC-307 envía instrucciones a la válvula TCV-307 para que manipule el caudal de fluido térmico, aumentando o disminuyéndolo. En la Tabla 49 se muestran los elementos del control de temperatura.

Tabla 49. Lazo TIC-307. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-307	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-303
TIC-307	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-307
TY-307	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-307 a neumática para accionar la válvula TCV-307
TCV-307	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido refrigerante del intercambiador E-303

### Lazo TIC-308

El lazo TIC-308 es similar al lazo TIC-307. Ambos se encargan de asegurarse de que la temperatura a la alimentación del tanque de mezcla TM-301 sea la adecuada. La variable manipulada de este lazo es el caudal del fluido calefactor del intercambiador E-304, mientras que la variable controlada es la temperatura de la corriente de salida del intercambiador, la corriente 43 que entra el tanque de mezcla. Es un lazo *feedback* con control PI, en el que, si se detecta un cambio en la temperatura, gracias al sensor TT-308, el controlador TIC-308 envía instrucciones a

la válvula TCV-308 para que manipule el caudal de fluido calefactor. En la Tabla 50 se muestran los elementos del control de temperatura.

Tabla 50. Lazo TIC-308. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
TT-308	Transmisor de temperatura	Mide y transmite el valor de temperatura en la corriente de salida del intercambiador E-304
TIC-308	Controlador indicador de temperatura	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control TCV-308
TY-308	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por TIC-308 a neumática para accionar la válvula TCV-308
TCV-308	Válvula control temperatura	Aumenta o disminuye el caudal de fluido refrigerante del intercambiador E-304

### Lazo LIC-309

En el tanque de mezcla TM-301 es necesario controlar el nivel del líquido. Por lo tanto, en el lazo LIC-309, la variable controlada el nivel del líquido en el tanque TM-301 y la variable manipulada es el caudal de salida de este, la corriente 47. El lazo es de control P *feedback*, si se detecta un aumento o disminución en el nivel en el tanque, el controlador LIC-309 detecta el error mediante el sensor LT-309 y envía una respuesta a la válvula LCV-309 para que esta se abra o cierre, ajustando el caudal de salida. Los elementos del lazo de control se muestran en la Tabla 51.

Tabla 51. Lazo LIC-309. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Nombre del elemento	Función
LT-309	Transmisor de nivel	Mide y transmite el valor del nivel en el interior del tanque TM-301
LIC-309	Controlador de nivel	Compara la variable controlada con el valor de consigna y decide la acción de la válvula de control LV-309
LY-309	Transductor	Convierte la señal eléctrica transmitida por LIC-309 a neumática para accionar la válvula LV-309
LV-309	Válvula control nivel	Aumenta o disminuye el caudal de la corriente 47, la salida del tanque TM-309

## 10.7 Válvulas de seguridad

Es necesario proteger a los equipos frente a condiciones no previstas o irregulares de presión, para prevenir accidentes. Para ello existen distintos dispositivos de seguridad que permiten aliviar la presión de forma controlada. Entre estos dispositivos se encuentran las válvulas de alivio de sobrepresión. A continuación, se describen las válvulas necesarias para el proceso, sus principios de funcionamiento y su ubicación.

### 10.7.1 Válvulas de alivio

Las válvulas de alivio son dispositivos de seguridad diseñados para activarse en caso de que se produzca una sobrepresión en un equipo o línea. Actúan de manera automática cuando la presión interna de un sistema supera el umbral establecido, permitiendo una liberación controlada. Su instalación es especialmente necesaria en equipos que operan a presiones elevadas o en aquellos donde exista o pueda existir presencia de gases. Además de proteger la integridad mecánica de los equipos, las válvulas de alivio también ayudan a garantizar la seguridad operativa de la planta. (126)

Por lo tanto, se decide incluir válvulas de alivio en todos los equipos que en su diseño superan la presión atmosférica. En la Tabla 52 se recogen todas las válvulas de alivio instaladas en la planta, indicando para cada una de ellas el equipo protegido, su ubicación y la nomenclatura correspondiente según el sistema de identificación adoptado.

Tabla 52. Válvulas de alivio. Fuente: Elaboración propia

Etiqueta	Equipo
PSV-111	Tanque de mezcla TM-101
PSV-112	Intercambiador de calor E-101
PSV-113	Reactor R-101 A
PSV-114	Reactor R-101 B
PSV-115	Intercambiador de calor E-102
PSV-116	Intercambiador de calor E-103
PSV-117	Intercambiador de calor E-104
PSV-118	Intercambiador de calor E-105
PSV-119	Intercambiador de calor E-106
PSV-222	Intercambiador de calor E-201
PSV-223	Intercambiador de calor E-202
PSV-224	Reactor R-201
PSV-225	Intercambiador de calor E-203
PSV-226	Decantador D-201
PSV-333	Intercambiador de calor E-301
PSV-334	Intercambiador de calor E-302
PSV-335	Reactor R-301
PSV-336	Intercambiador de calor E-303
PSV-337	Intercambiador de calor E-304
PSV-338	Tanque de mezcla TM-301

## 10.8 Alarmas

Las alarmas son dispositivos que se emplean para dar aviso de problemas en la operación del proceso. Pueden ser de diversos tipos dependiendo de la finalidad de aviso y la importancia de la emergencia, como sonoras, visuales o ambas. Las alarmas que se implementan en el sistema de control del proceso se muestran en la Tabla 53.

Tabla 53. Sistemas de alarmas. Fuente: Elaboración propia

<b>Etiqueta</b>	<b>Equipo</b>
LAH-101	Alarma de nivel alto en el tanque de mezcla TM-101
LAL-101	Alarma de nivel bajo en el tanque de mezcla TM-101
TAH-115	Alarma de alta temperatura en el reactor R-101 A
TAL-115	Alarma de baja temperatura en el reactor R-101 A
PDAH-115	Alarma de presión diferencial alta en el reactor R-101 A
TAH-116	Alarma de alta temperatura en el reactor R-101 B
TAL-116	Alarma de baja temperatura en el reactor R-101 B
PDAH-116	Alarma de presión diferencial alta en el reactor R-101 B
LAH-106	Alarma de nivel alto en el tambor de reflujo V-101
LAL-106	Alarma de nivel bajo en el tambor de reflujo V-101
LAH-108	Alarma de nivel alto en la columna T-101
LAL-108	Alarma de nivel bajo en la columna T-101
LAH-112	Alarma de nivel alto en el tanque de condensado V-102
LAL-112	Alarma de nivel bajo en el tanque de condensado V-102
LAH-113	Alarma de nivel alto en la columna T-102
LAL-113	Alarma de nivel bajo en la columna T-102
TAH-205	Alarma de alta temperatura en el reactor R-201
LAH-206	Alarma de nivel alto en el reactor R-201
LAL-206	Alarma de nivel bajo en el reactor R-201
LAH-208	Alarma de nivel alto de fase orgánica en el decantador D-201
LAL-208	Alarma de nivel bajo de fase orgánica en el decantador D-201
LAH-209	Alarma de nivel alto de fase acuosa en el decantador D-201
LAL-209	Alarma de nivel bajo de fase acuosa en el decantador D-201
TAH-305	Alarma de alta temperatura en el reactor R-301
LAH-306	Alarma de nivel alto en el reactor R-301
LAL-306	Alarma de nivel bajo en el reactor R-301
LAH-309	Alarma de nivel alto en el tanque de mezcla TM-301
LAL-309	Alarma de nivel bajo en el tanque de mezcla TM-301

## 11 Seguridad

En el presente apartado se llevará a cabo el estudio de seguridad de la planta de producción de detergente tipo LABS. Este estudio es clave para poder garantizar la operación de manera segura de la planta y tiene como objetivo identificar y evaluar los posibles riesgos y peligros, así como implantar medidas para prevenir, mitigar y controlar dichos riesgos. Asimismo, es de vital importancia, disponer de un plan de actuación, de forma que el personal sepa cómo proceder de manera eficaz en caso de accidente.

La industria química puede presentar varios peligros, entre ellos destaca la exposición a productos tóxicos y el riesgo de incendios o explosiones debidas al uso de sustancias inflamables. Asimismo, existen altos riesgos al trabajar con altas temperaturas o presiones.

A continuación, se elaborará el inventario de sustancias presentes en el proceso y se clasificarán según el reglamento CLP y el sistema NFPA, identificando así las sustancias peligrosas. Además, se realizará la clasificación de la planta según la Directiva Seveso y se estudiará el riesgo de reactividad química descontrolada. Asimismo, se determinarán las distancias de seguridad entre áreas y entre equipos. Finalmente, se aplicará el índice de Dow, para evaluar cuantitativamente el riesgo de incendio y explosión de la planta.

### 11.1 Inventario de sustancias

En el presente apartado se elabora un inventario con las sustancias presentes en el proceso de producción de detergente tipo LABS, mostrado en la Tabla 54. Los compuestos presentes en el proceso son el benceno, 1-dodeceno, dodecilbenceno, ácido sulfúrico, óleum 22%, ácido dodecilbenceno sulfónico, hidróxido de sodio 20%, hidróxido de sodio, dodecilbencenosulfonato de sodio, dietanolamina de coco, metasilicato de sodio, pirofosfato de tetrapotasio, tolueno sulfonato de potasio, sulfato de sodio, sílice, ácido tungstofosfórico y agua. Para la realización del inventario se hace uso de las fichas de seguridad de cada compuesto, disponibles en el *Anexo IV*. Las propiedades definidas en el inventario son las siguientes:

- Punto flash o punto de inflamación, es la mínima temperatura a la cual una sustancia emana vapores que pueden dar lugar con el aire a una mezcla inflamable susceptible de arder. (128)
- Temperatura de autoignición, es la temperatura mínima a la cual la energía disponible del entorno es suficiente para provocar la ignición. (128)
- Límite inferior de inflamabilidad (LII, LFL), es la concentración más baja de vapor o gas (como % en volumen de la sustancia en aire) que mezclada con aire se inflama y arde en presencia de una fuente de ignición (llama, calor, chispa eléctrica). (128)
- Límite superior de inflamabilidad (LSI, UFL), es la concentración más alta de vapor o gas (como % en volumen de la sustancia en aire) que produce un incendio flash en presencia de una fuente de ignición (llama, calor, chispa eléctrica). (128)

Tabla 54. Propiedades físico-químicas de las sustancias. Fuente: Fichas de seguridad

Sustancias	N° CAS	Punto flash (°C)	Temperatura de autoignición (°C)	LII (% vol.)	LSI (% vol.)
<b>Benceno</b>	71-43-2	-11	498	1,2	8,0
<b>1-Dodeceno</b>	112-41-4	79	255	-	-
<b>Dodecibenceno</b>	123-01-3	109	-	-	-
<b>Ácido sulfúrico</b>	7664-93-9	-	-	-	-
<b>Óleum 22%</b>	8014-95-7	No aplica	No aplica	-	-
<b>Ácido dodecibencensulfónico</b>	121-65-3	-	-	-	-
<b>Hidróxido de sodio 20%</b>	1310-73-2	No aplica	No aplica	-	-
<b>Hidróxido de sodio</b>	1310-73-2	No aplica	-	-	-
<b>Dodecibencenosulfonato de sodio</b>	25155-30-0	-	-	-	-
<b>Dietanolamina de coco (dietanolamina, cocamida DEA)</b>	111-42-2	100,5	-	No aplica	No aplica
<b>Metasilicato de sodio</b>	68603-42-9	No aplica	-	-	-
<b>Pirofosfato de tetrapotasio</b>	6834-92-0	No aplica	-	-	-
<b>Tolueno sulfonato de potasio</b>	7320-34-5	No aplica	-	-	-
<b>Tolueno sulfonato de potasio</b>	28519-50-8	-	-	-	-
<b>Sulfato de sodio</b>	7757-82-6	No aplica	400	-	-
<b>Sílice</b>	68855-54-9	No aplica	-	-	-
<b>Ácido tungstofosfórico</b>	12501-23-4	-	-	-	-

-. Sin datos disponibles

## 11.2 Clasificación según el Reglamento CLP

El Reglamento CLP (*Classification, Labelling and Packaging*), también conocido como n° 1272/2008 sobre la clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas químicas, fue adoptada el 20 de enero del 2009. Este sistema busca unificar la clasificación, etiquetado y envasado de las sustancias y mezclas químicas a nivel internacional. (129)

El Reglamento CLP tiene como objetivo determinar si una sustancia o mezcla presenta propiedades clasificadas como peligrosas. Una vez se identifican dichas propiedades, se clasifica la sustancia y se deben comunicar los peligros detectados mediante el etiquetado. (129)

Si, según los criterios de clasificación del Reglamento CLP, una sustancia presenta propiedades peligrosas, estos peligros se identifican mediante la asignación de una determinada clase o categoría de peligro. Las frases de peligro del Reglamento CLP distinguen entre peligros físicos, para la salud humana, medioambientales y adicionales. (130)

En la Tabla 55 se presentan las frases de peligro (frases H) de las sustancias del proceso junto con sus indicaciones de peligro correspondientes.

Tabla 55. Frases H de indicaciones de peligro. Fuente:(131)

<b>Frase</b>	<b>Indicación de peligro</b>
H225	Líquido y vapores muy inflamables.
H290	Puede ser corrosivo para los metales.
H302	Nocivo en caso de ingestión.
H304	Puede ser mortal en caso de ingestión y penetración en las vías respiratorias.
H314	Provoca quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves.
H315	Provoca irritación cutánea.
H318	Provoca lesiones oculares graves.
H319	Provoca irritación ocular grave.
H330	Mortal en caso de inhalación.
H335	Puede irritar las vías respiratorias.
H340	Puede inducir mutaciones genéticas.
H350	Puede provocar cáncer.
H372	Provoca daños en los órganos tras exposiciones prolongadas o repetidas.
H373	Puede provocar daños en los órganos tras exposiciones prolongadas o repetidas.
H412	Nocivo para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.

En la Tabla 56 se muestra la clasificación de las sustancias recogidas en el inventario de acuerdo con el Reglamento CLP, indicando las clases de peligro, categorías de peligro, frases H y pictogramas para cada sustancia.

Tabla 56. Clasificación de las sustancias según el Reglamento CLP. Fuente: Fichas de seguridad





<b>Sustancias</b>	<b>Clases de peligro</b>	<b>Categoría de peligro</b>	<b>Frase H</b>	<b>Pictograma</b>
<b>Benceno</b>	Líquidos inflamables	2	H225	
	Irritación cutánea	2	H315	
	Irritación ocular	2	H319	
	Mutagenicidad en células germinales	1B	H340	
	Carcinogenicidad	1A	H350	
	Toxicidad específica en determinados órganos -exposiciones repetidas, Sangre	1	H372	
	Peligro de aspiración	1	H304	
Peligro a largo plazo (crónico para el medio ambiente acuático)	3	H412		
<b>1-Dodeceno</b>	Peligro de aspiración	1	H304	
<b>Dodecibenceno</b>	No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) nº 1272/2008			

Tabla 56 Continuación. Clasificación de las sustancias según el Reglamento CLP. Fuente: Fichas de seguridad












Etiqueta	Equipo	Etiqueta	Equipo	Etiqueta
<b>Ácido sulfúrico</b>	Corrosivo para los metales	1	H290	
	Corrosión cutánea	1A	H314	
	Lesiones oculares graves	1	H318	
<b>Óleum 22%</b>	Toxicidad aguda	2	H330	
	Corrosión cutánea	1A	H314	
	Toxicidad específica en determinados órganos -exposición única, sistema respiratorio	3	H335	
<b>Ácido dodecilbencensulfónico</b>	Corrosión cutánea	1B	H314	
<b>Hidróxido de sodio 20%</b>	Corrosión cutánea	1A	H314	
<b>Hidróxido de sodio</b>	Corrosivo para los metales	1	H290	
	Corrosión cutánea	1A	H314	
	Lesiones oculares graves	1	H318	
<b>Dodecilbenceno sulfonato de sodio</b>	Toxicidad agua	4	H302	
	Irritación cutánea	2	H315	
	Irritación ocular	2	H319	
<b>Dietanolamida de coco (dietanolamina, cocamida DEA)</b>	Irritación cutánea	2	H315	
	Lesiones oculares graves	1	H318	
<b>Metasilicato de sodio</b>	Corrosivo para los metales	1	H290	
	Corrosión cutánea	1B	H314	
	Lesiones oculares graves	1	H318	
<b>Pirofosfato de tetrapotasio</b>	Irritación ocular	2	H319	

Tabla 56 Continuación. Clasificación de las sustancias según el Reglamento CLP. Fuente: Fichas de seguridad

Etiqueta	Equipo	Etiqueta	Equipo	Etiqueta
<b>Tolueno sulfonato de potasio</b>	Irritación cutánea	2	H315	
	Irritación ocular	2	H319	
	Toxicidad específica en determinados órganos-exposición única-Sistema respiratorio	3	H335	
<b>Sulfato de sodio</b>	No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) nº 1272/2008			
<b>Sílice</b>	Toxicidad específica del órgano blanco- (exposición repetida)	2	H373	
<b>Ácido tungstofosfórico</b>	Corrosión o irritación cutánea	1B	H314	

Observando la Tabla 56, se concluye que el componente más peligroso presente en el proceso es el benceno.

### 11.3 Clasificación de la instalación según la Directiva Seveso

La Directiva 2012/18/UE o Directiva Seveso III, se trata de una normativa a nivel europeo relativa al control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas, que sustituyó a la Directiva 96/82/CE. (132)

Dicha directiva fue traspuesta en España mediante el Real Decreto 840/2015, del 21 de septiembre. El objetivo de este Real Decreto es prevenir accidentes graves en los que intervienen sustancias peligrosas, además de limitar sus consecuencias sobre la salud humana, los bienes y el medio ambiente. (133)

Por tanto, para llevar a cabo la clasificación de la planta de producción de detergente tipo LABS conforme a la Directiva Seveso III, se realizará siguiendo el Real Decreto 840/2015. Este Decreto incorpora en su Anexo I los umbrales superiores e inferiores de sustancias peligrosas. Este anexo se encuentra dividido en 2 partes, en la Parte 1 se definen los umbrales para las categorías de peligro de conformidad con el Reglamento (CE) nº 1272/2008. Mientras que en la Parte 2 del anexo, se presentan las sustancias peligrosas nominadas con sus respectivos umbrales, que prevalecen sobre los de la Parte 1. (133)

A partir de lo establecido en el Anexo I, los establecimientos se pueden clasificar en establecimientos de nivel inferior y de nivel superior, a continuación, se presentan sus respectivas definiciones, presentes en el Artículo 3 del Real Decreto.

- Establecimiento de nivel inferior: un establecimiento en el que haya presentes sustancias peligrosas en cantidades iguales o superiores a las especificadas en la columna 2 de la parte 1 o de la parte 2 del anexo I, pero inferiores a las cantidades especificadas en la

columna 3 de la parte 1 o de la parte 2 del anexo I. Todo ello empleando, cuando sea aplicable, la regla de la suma de la nota 4 del anexo I.(133)

- Establecimiento de nivel superior: un establecimiento en el que haya presentes sustancias peligrosas en cantidades iguales o superiores a las especificadas en la columna 3 de la parte 1 o de la parte 2 del anexo I. Todo ello empleando, cuando sea aplicable, la regla de la suma de la nota 4 del anexo I.(133)

Asimismo, es importante conocer la definición, mostrada también en el Artículo 3 del Real Decreto de una sustancia peligrosa. Una sustancia peligrosa es toda sustancia o mezcla incluida en la parte 1 o enumerada en la parte 2 del anexo I, incluyendo aquellas en forma de materia prima, producto, subproducto, residuo o producto intermedio.(133)

Para la clasificación del establecimiento, se tendrán en cuenta únicamente las sustancias que se suministran al proceso de forma continua y productos finales que se encuentren almacenados en cantidades relevantes. Según el Anexo I del Real Decreto 840/2015, las cantidades a considerar para la clasificación del establecimiento son las máximas que estén presentes, o que puedan estarlo en algún momento determinado. Por tanto, se considerará que las sustancias permanecen almacenadas en la planta como máximo durante 72 horas.

Primeramente, se ha comprobado que ninguna de las sustancias a considerar para la clasificación figura como sustancia peligrosa nominada en la Parte 2 del Anexo I. Por tanto, se aplicará la Parte 1 del anexo en función de las categorías de peligro. En la Tabla 57 se muestran las sustancias que sí se encuentran clasificadas según el Anexo I del Real Decreto, con sus categorías de peligro, sus umbrales inferior y superior y las cantidades almacenadas

Tabla 57. Clasificación de la instalación según la Directiva Seveso III. Fuente: (133)

Sustancias	Clasificación Seveso III	Umbral Inferior (t)	Umbral Superior (t)	Cantidad almacenada (t)
Benceno	P5a	10	50	38,62
Óleum, 22%	H2	50	200	181,74
	H3	50	200	
Tolueno sulfonato de potasio	H3	50	200	81,82

En este caso, como se puede observar en la Tabla 57, las cantidades almacenadas de los tres compuestos superan el umbral inferior pero no el superior. Por ello, es necesario aplicar la regla de la suma con umbrales superiores para determinar si el establecimiento está afectado de nivel superior o inferior. La regla de la suma consiste en la ecuación [1].

$$\frac{q_1}{Q_{U1}} + \frac{q_2}{Q_{U2}} + \frac{q_3}{Q_{U3}} + \dots \quad [1]$$

Donde:

- $q_x$ : La cantidad de la sustancia peligrosa o categoría de sustancias peligrosas  $x$  contemplada en la parte 1 o 2 del Anexo I del Real Decreto 840/2015.
- $Q_{Ux}$ : La cantidad umbral pertinente para la sustancia peligrosa o categoría  $x$  de la columna 3 de la parte 1 o de la parte 2 del Anexo I del Real Decreto 840/2015.

Esta regla se aplica para valorar los peligros para la salud, peligros físicos y peligros medioambientales, por lo que habrá que aplicarla 3 veces. Si el resultado de la suma para alguna

de las tres clases de peligro es mayor que 1, significará que la instalación está afectada de nivel superior. (133)

En la Tabla 58 se muestra la aplicación de la regla de la suma para peligros para la salud, ya que, para el resto de los peligros no será necesario realizarla, al presentar solamente una sustancia, un peligro físico y ninguna, un peligro medioambiental.

Tabla 58. Regla de la suma afectación nivel superior. Fuente: Elaboración propia a partir de (133)

Parámetro	Valor
q <sub>1</sub>	181,74
q <sub>2</sub>	181,74
q <sub>3</sub>	81,82
Q <sub>U1</sub>	200,00
Q <sub>U2</sub>	200,00
Q <sub>U3</sub>	200,00
$\frac{q_1}{Q_{U1}} + \frac{q_2}{Q_{U2}} + \frac{q_3}{Q_{U3}}$	2,23

Dado que el resultado obtenido es superior a 1, se concluye que la planta de detergente tipo LABS está afectada a nivel superior. Esto implica que la planta deberá facilitar a la población la información establecida en el Anexo III del Real Decreto 840/2015.

### 11.4 Clasificación NFPA

La norma NFPA 704 (*National Fire Protection Association*) establece los requerimientos para identificación de los materiales. Esta norma es aplicable para instalaciones industriales, comerciales e institucionales que trabajan con alguna sustancia peligrosa. (134)

El sistema NFPA consiste en un diamante que identifica el grado de gravedad de los peligros para la salud, en color azul; la inflamabilidad, en rojo; la inestabilidad, en amarillo y otros, en blanco. Se presenta la gravedad del peligro mediante un número desde el 0, que indica un peligro mínimo, hasta el 4, que presenta un peligro severo. Se muestra en la Figura 32 el diamante NFPA. (134)



Figura 32. Diamante NFPA. Fuente: (135)

En la Tabla 59 se muestra la clasificación según la norma NFPA 704 de las sustancias presentes en el proceso de producción de detergente tipo LABS.

Tabla 59. Clasificación NFPA. Fuente: CRW4, (136, 137)

Sustancias	Riesgo de salud	Inflamabilidad	Reactividad	Riesgo específico
Benceno	2	3	0	-
Dodeceno	0	1	1	-
Dodecilbenceno	1	1	0	-
Ácido sulfúrico	3	0	2	W
Óleum 22%	-	-	-	-
Ácido dodecilbencensulfónico	-	-	-	-
Hidróxido de sodio	3	0	1	-
Dodecilbencenosulfonato de sodio	-	-	-	-
Dietanolamina de coco	3	1	0	-
Metasilicato de sodio	-	-	-	-
Pirofosfato de tetrapotasio	-	-	-	-
Tolueno sulfonato de potasio	-	-	-	-
Sulfato de sodio	-	-	-	-
Sílice	-	-	-	-
Ácido tungstosfórico	-	-	-	-

Donde:

- -: Sin datos disponibles
- W: Reaccionan con agua

## 11.5 Estudio de la reactividad química descontrolada

Para cualquier planta química, es de vital importancia identificar los posibles riesgos o peligros que se podrían generar, con el fin de aplicar las medidas de seguridad pertinentes. En este caso, al manejar elevadas cantidades de productos químicos diferentes durante el proceso, surge el riesgo de que se produzcan reacciones químicas descontroladas. Esta reactividad química descontrolada no tiene que producirse necesariamente en un reactor, sino que puede darse en cualquier etapa del proceso, almacenaje o empaquetado.

Para poder caracterizar estas posibles reactividades, es necesario conocer la interacción entre las sustancias involucradas en el proceso. Por tanto, se llevará a cabo un análisis de la reactividad de las sustancias, realizando la matriz de compatibilidad química.

### 11.5.1 Matriz de compatibilidad química

Una matriz de compatibilidad química se encarga de evaluar las interacciones que se pueden dar entre las sustancias del proceso. Esta matriz se elabora mediante el software Chemical Reactivity Worksheet 4.0. Cabe destacar que este software solo describe las interacciones binarias entre los compuestos, por lo que no puede predecir interacciones de mayor orden.

En la Tabla 60 se muestra la leyenda con la simbología empleada en la matriz de compatibilidad química.

Tabla 60. Leyenda de la matriz de compatibilidad química. Fuente: CRW4

Símbolo	Significado
<b>Y</b>	<b>Compatible:</b> No se esperan problemas de reactividad peligrosa
<b>N</b>	<b>Incompatible:</b> Se esperan problemas de reactividad peligrosa
<b>C</b>	<b>Precaución:</b> Puede ser peligroso en determinadas condiciones
<b>SR</b>	<b>Auto-reactivo:</b> Potencialmente auto-reactivo

En la Figura 33 se muestra la matriz de compatibilidad química del proceso de producción de detergente tipo LABS. Para la realización de esta matriz se han introducido todos los componentes presentes en el proceso, excepto el tolueno sulfato de potasio, el sulfato de sodio y el ácido tungstofosfórico, que no se encontraban disponibles en el software. Asimismo, para mayor seguridad, se incluyen también el oxígeno. Esto es debido a que, al estar la planta situada al aire libre, hay riesgo de contacto de alguna sustancia con el oxígeno del aire.

NFPA			Planta de producción de detergente tipo LABS Compatibility Chart	1-DODECENE	BENZENE	COCONUT OIL ACID DIETHANOLAMINE CONDENSATE (2/1)	DODECYLBENZENE	DODECYLBENZENESULFONIC ACID	OXYGEN	POTASSIUM TETRAPYRO PHOSPHATE	SILICA, AMORPHOUS	SODIUM DODECYLBENZENESULFONATE (BRANCHED CHAIN)	SODIUM HYDROXIDE SOLUTION	SODIUM SILICATE	SULFURIC ACID	SULFURIC ACID, FUMING	
Health	Flammability	Instability		Special													
				1-DODECENE													
2	3	0		BENZENE	Y												
				COCONUT OIL ACID DIETHANOLAMINE CONDENSATE (2/1)	Y	Y											
1	1	0		DODECYLBENZENE	Y	Y	Y										
				DODECYLBENZENESULFONIC ACID	N	N	N	N									
3	0	0	OXI	OXYGEN	N	N	N	N	N								
				POTASSIUM TETRAPYRO PHOSPHATE	Y	Y	Y	Y	N	N							
				SILICA, AMORPHOUS	Y	Y	Y	Y	C	C	Y						
				SODIUM DODECYLBENZENESULFONATE (BRANCHED CHAIN)	Y	Y	Y	Y	N	N	Y	Y					
3	0	1		SODIUM HYDROXIDE SOLUTION	Y	Y	C	Y	N	N	N	N	N				
				SODIUM SILICATE	Y	Y	Y	Y	N	N	Y	Y	Y	N			
3	0	2	HS	SULFURIC ACID	N	N	N	N	C	N	N	C	N	N	N		
				SULFURIC ACID, FUMING	N	N	N	N	C	N	N	C	N	N	N	C	
				WATER	Y	Y	C	Y	C	N	N	Y	N	C	N	C	C

Figura 33. Matriz de compatibilidad química. Fuente: CRW4

En la matriz de la Figura 33 se observan ciertas incompatibilidades químicas que será importante tener en cuenta durante la operación de la planta. El ácido sulfúrico y el óleum (ácido sulfúrico fumante), al tratarse de ácidos fuertes y altamente reactivos, reaccionan de manera violenta con las sustancias orgánicas y con las bases fuertes, como la disolución de NaOH. Asimismo, el ácido

dodecilbencensulfónico presenta numerosas incompatibilidades al comportarse como un ácido orgánico fuerte. Además, el oxígeno es incompatible con prácticamente todas las sustancias del proceso, puesto que podría producir reacciones de combustión. En general, el resto de los compuestos interactúan de manera compatible entre ellos.

Cabe destacar que en el reactor R-201 tiene lugar la reacción entre el dodecilbenceno y el ácido sulfúrico fumante (óleum), dos sustancias identificadas en la matriz como químicamente incompatibles entre ellas. Se trata de una reacción exotérmica, que puede llegar a ser violenta o explosiva, así como liberar ciertos gases o producir una sobrepresión. Esto quiere decir que, durante la operación de la planta, será necesario llevar un exhaustivo control de las condiciones operativas dentro de este reactor, especialmente de la temperatura, para evitar que se produzca una reacción runaway. Cabe destacar también la importancia de disponer de una válvula de alivio para el caso de una sobrepresión. (CRW4)

De la misma manera, la reacción de neutralización del ácido dodecilbencensulfónico con una disolución de hidróxido de sodio, que tiene lugar en el reactor R-301, podría transcurrir de manera violenta. Estas dos sustancias también son consideradas incompatibles químicamente entre ellas y dan lugar a una reacción exotérmica. Por lo que también resulta imprescindible un estricto sistema de control en este reactor. (CRW4)

### **11.6 Directiva ATEX**

Es importante considerar que en la planta se manipulan sustancias inflamables, como el benceno o el dodeceno, cuyos vapores, al entrar en contacto con el aire, podrían formar una atmósfera explosiva. En caso de que se produzca una ignición en una atmósfera explosiva, se produciría una combustión que se propagaría rápidamente por toda la mezcla.

Aunque durante la mayor parte del proceso, estos compuestos se encuentran en fase líquida, si se produjese accidentalmente una fuga, se liberarían vapores inflamables que, al entrar en contacto con el aire, darían lugar a una atmósfera explosiva.

Por esta razón, será necesario aplicar la normativa vigente en el ámbito de atmósferas explosivas. Esta normativa se recoge a nivel europeo en la Directiva ATEX, también conocida como Directiva 2014/34/UE, la cual está traspuesta a nivel nacional en el Real Decreto 681/2003. Este Real Decreto tiene como objetivo establecer las disposiciones mínimas para la protección de la salud y seguridad de los trabajadores que pudieran estar expuestos a riesgos derivados de atmósferas explosivas en el lugar de trabajo. (138)

Esta normativa obliga a realizar la clasificación de las áreas de riesgo de la planta en función de la frecuencia con la que se pueden producir atmósferas explosivas y su duración. Los criterios para esta clasificación están establecidos en el Anexo I del Real Decreto. En función del área de riesgo dependerá el alcance de las medidas de seguridad a adoptar. (138)

Una de las principales medidas a adoptar en dichas zonas será evitar la ignición de la atmósfera explosiva, lo que implica eliminar las llamas, superficies calientes, chispas de origen mecánico o eléctrico, así como asegurar una ventilación adecuada y el uso de equipos certificados para uso en atmósferas ATEX. (139)

### **11.7 Antorcha**

Se ha decidido instalar una antorcha de seguridad en la planta para prevenir emisiones de gases peligrosos a la atmósfera.

Las columnas de destilación de la planta operan al vacío, por lo que se usan bombas de vacío para poder mantener la presión deseada en estas. En el caso de la primera columna, esta bomba está conectada al tanque de reflujo, donde todo el benceno debería estar condensado. Sin embargo, dado que el benceno es un compuesto altamente inflamable, para prevenir el riesgo de que algo de benceno no se condensara y se libere a la atmósfera en forma de vapor, se instalará un detector de carbono orgánico total. De esta forma, si se detectase a la salida de la bomba de vacío una mínima composición de benceno, se encendería la antorcha llevando a cabo su combustión de forma controlada antes de liberarlo a la atmósfera.

El mismo sistema se implementará en la segunda columna, con la diferencia de que, al tratarse de una columna de *stripping*, no presenta tambor de reflujo, sino un tanque de condensados. Dispondrá igualmente de un detector de carbono orgánico total para detectar la existencia de trazas de dodeceno o dodecibenceno, y en ese caso, se activaría la antorcha.

Asimismo, la antorcha se emplearía en el caso de que se activase alguna de las válvulas de alivio para evitar que se liberase todo el contenido del equipo directamente a la atmósfera.

## 11.8 Distancias de seguridad

Un aspecto de gran importancia para la seguridad de la planta es la disposición o *layout* de las distintas áreas y equipos disponibles. Para una disposición óptima de la planta se busca que, en caso de incendio o explosión de un equipo, esta no se propague por el resto de la planta. Esto se consigue estableciendo las distancias de seguridad necesarias, de forma que quedan los equipos aislados, evitando la reacción en cadena.

Se aplicarán las distancias de seguridad recomendadas por *Global Asset Protection Services* (GAPS) dirigida a plantas químicas y petroquímicas. Esta guía está diseñada con el objetivo de reducir los daños producidos por explosiones e incendios, imponiendo una distancia suficiente entre los principales focos de peligro. (140)

### 11.8.1 Distancias de seguridad entre áreas

Para aplicar las distancias de seguridad entre las áreas de la planta de la Figura 34, se tendrán en cuenta las siguientes áreas:

- A: Unidades del proceso con riesgo intermedio
- B: Unidades del proceso con riesgo severo
- C: Edificio de servicios
- D: Área de utilidades
- E: Salas de control
- G: Tanques de almacenamiento
- H: Estaciones de carga y descarga de materias primas y productos

Por tanto, habrá que clasificar las secciones del proceso entre las categorías de unidades del proceso de riesgo moderado, intermedio o severo:

- Unidades del proceso con riesgo moderado: Ninguna
- Unidades del proceso con riesgo intermedio: Sección 300
- Unidades del proceso con riesgo severo: Sección 100 y Sección 200

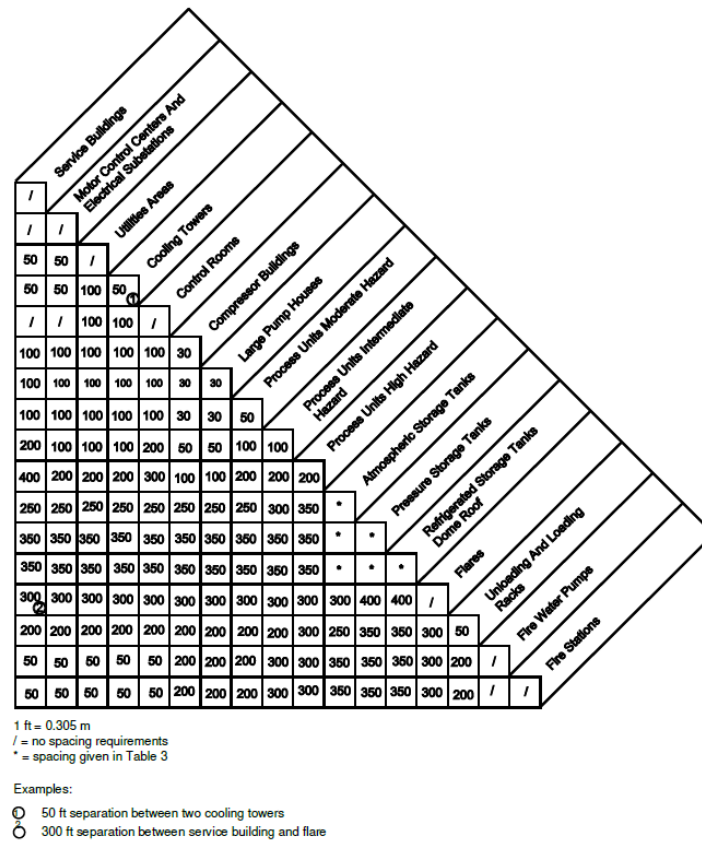


Figura 34. Distancias de seguridad recomendadas entre áreas en pies. Fuente:(140)

En la Figura 34 se muestran las distancias recomendadas de seguridad entre las áreas presentes en el proceso en metros.

Donde /, significa que no se requiere ningún espaciado.

Tabla 61. Distancias de seguridad recomendadas entre las áreas de la planta (m). Fuente: Elaboración propia a partir de (140)

Distancias, m	A	B	C	D	E	G	H
A							
B	60,96						
C	60,96	121,92					
D	30,48	60,96	15,24				
E	60,96	91,44	/	30,48			
G	91,44	106,68	30,48	76,20	76,20		
H	60,96	91,44	60,96	60,96	60,96	76,20	

### 11.8.2 Distancias de seguridad entre equipos

Para aplicar las distancias mínimas de seguridad recomendadas entre equipos se empleará la Figura 35.

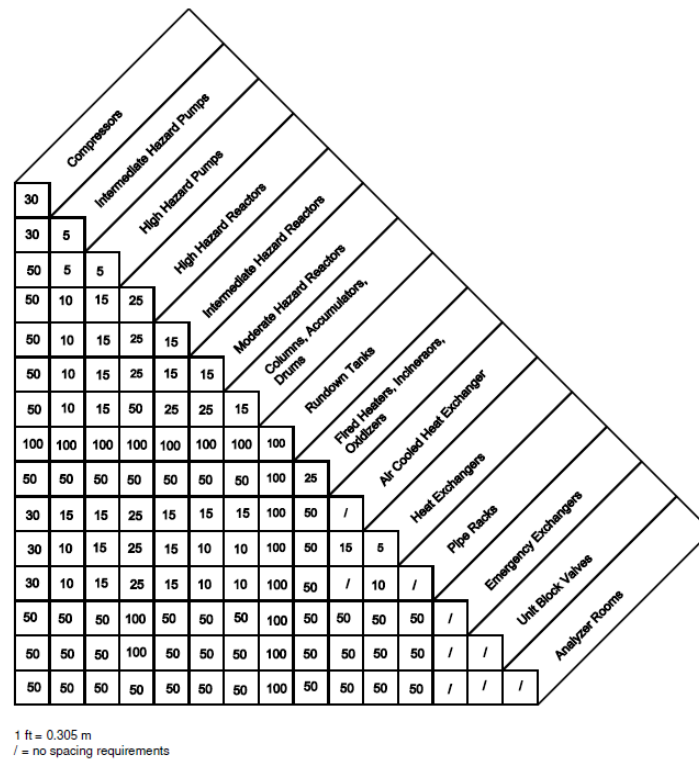


Figura 35. Distancias de seguridad recomendadas entre equipos en pies. Fuente:(140)

Para expresar las distancias de seguridad entre los diversos equipos, se realizarán agrupaciones de equipos similares, y se nombrará cada grupo con sus iniciales para simplificar. En la Tabla 62 se muestran las agrupaciones de equipos del proceso.

Tabla 62. Nomenclatura de los equipos del proceso

Nomenclatura	Equipos	Lista
BM	Bombas de riesgo moderado	P-202 A/B
		P-203 A/B
		P-204 A/B
		P-301 A/B
BA	Bombas de riesgo alto	P-101 A/B
		P-102 A/B
		P-103 A/B
		P-104 A/B
E	Intercambiadores de calor	E-101
		E-102
		E-103
		E-104
		E-105
		E-106
		E-201
RM	Reactores riesgo moderado	R-301
RA	Reactores riesgo alto	R-101 A/B
T	Columnas de separación	T-201 T-202
M	Tanques de mezcla	TM-101 TM-102

Además, los reactores es necesario clasificarlos en función de su grado de peligrosidad. Los reactores R-101 A/B y R-201 se agruparán dentro de los reactores de alto riesgo y el reactor R-301, como riesgo moderado. Esto se debe a que en el primer reactor se emplean sustancias altamente inflamables y en el segundo, óleum, que es altamente peligroso.

Asimismo, las bombas se clasifican en función de su grado de peligrosidad en función de las sustancias que impulsan y de las condiciones de operación a las que trabajan.

Se muestran en la Tabla 63 las distancias de seguridad recomendadas entre los equipos de la planta. Sin embargo, en el apartado 11.9 Índice DOW de fuego y explosión se determinará el área de exposición del reactor R-101 A/B a partir de su índice DOW. Este radio de exposición será mayor que la distancia de seguridad tabulada, por tanto, prevalecerá el radio de exposición que se determinará posteriormente.

Tabla 63. Distancias de seguridad recomendadas entre equipos (m). Fuente: Elaboración propia a partir de (140)

<b>Distancias, m</b>	<b>BM</b>	<b>BA</b>	<b>RA</b>	<b>RM</b>	<b>T</b>	<b>M</b>	<b>E</b>
BM	1,524						
BA	1,524	1,524					
RA	3,048	4,572	7,62				
RM	3,048	4,572	7,62	4,572			
T	3,048	4,572	15,24	7,62	4,572		
M	3,048	4,572	15,24	7,62	4,572	4,572	
E	3,048	4,572	4,572	4,572	3,048	3,048	1,524

Estas distancias de seguridad entre los equipos y entre las diversas zonas del proceso se tendrán en cuenta a la hora de realizar el plano de implantación, donde se muestra la distribución de la planta. Este plano se presenta en el *Documento II. Planos*.

### 11.9 Índice DOW de fuego y explosión

El índice DOW (*Fire & Explosion Index*) es un método encargado de la clasificación de los riesgos de incendio, explosión y reactividad asociados a los equipos del proceso y a las sustancias contenidas. Los principales objetivos del índice DOW son cuantificar el daño esperado, identificar los equipos susceptibles de generar un accidente y comunicar el potencial de riesgo de incendio y explosión. (141)

En la Figura 36 se muestra un esquema con el procedimiento que se seguirá para calcular el índice DOW.

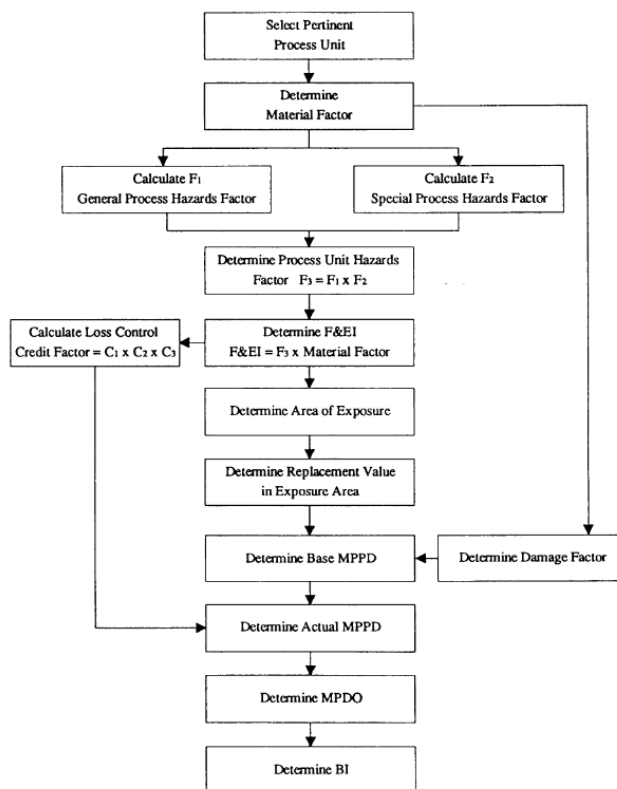


Figura 36. Procedimiento para el cálculo del Índice DOW. Fuente:(141)

### 11.9.1 Selección de las unidades pertinentes

El primer paso para calcular el Índice DOW consiste en seleccionar qué unidades del proceso deben ser evaluadas. Algunos de los factores a tener en cuenta para esta decisión son el potencial de energía química, la cantidad de materiales peligrosos en la unidad, las condiciones del proceso, el historial de incidentes anteriores, unidades críticas para la operación de la planta o la densidad de capital. (141)

En este caso, el equipo seleccionado para aplicar el Índice de Fuego y Explosión es el reactor de alquilación R-101 A/B. Esto se debe a que el reactivo con mayor proporción presente en este es el benceno, un líquido altamente inflamable. Además, a las condiciones de operación del reactor este se encuentra por encima de su punto de inflamación. Por tanto, una fuga en este reactor tendría graves consecuencias en la planta.

### 11.9.2 Factor material (FM)

El factor material mide la tasa de liberación de energía potencial por incendio o explosión, debida a una reacción química. Se puede encontrar en la guía Índice Dow Incendio y Explosión: Guía para la Clasificación del Riesgo del Instituto Americano de Ingenieros Químicos, dentro del Apéndice A, un listado de compuestos con su respectivo factor material. (141)

Sin embargo, hay ciertos compuestos que no están incluidos en dicha lista, por tanto, su factor material se puede obtener a partir de su clasificación NFPA de inflamabilidad y reactividad, como se muestra en la Figura 37.

Liquids & Gases Flammability or Combustibility <sup>1</sup>	NFPA 325M or 49	Reactivity or Instability				
		N <sub>R</sub> = 0	N <sub>R</sub> = 1	N <sub>R</sub> = 2	N <sub>R</sub> = 3	N <sub>R</sub> = 4
Non-combustible <sup>2</sup>	N <sub>F</sub> = 0	1	14	24	29	40
F.P. > 200 °F (> 93.3 °C)	N <sub>F</sub> = 1	4	14	24	29	40
F.P. > 100 °F (> 37.8 °C) ≤ 200 °F (≤ 93.3 °C)	N <sub>F</sub> = 2	10	14	24	29	40
F.P. ≥ 73 °F (≥ 22.8 °C) < 100 °F (< 37.8 °C) or F.P. < 73 °F (< 22.8 °C) & B.P. ≥ 100 °F (≥ 37.8 °C)	N <sub>F</sub> = 3	16	16	24	29	40
F.P. < 73 °F (< 22.8 °C) & B.P. < 100 °F (< 37.8 °C)	N <sub>F</sub> = 4	21	21	24	29	40
<b>Combustible Dust or Mist<sup>3</sup></b>						
St-1 (K <sub>St</sub> ≤ 200 bar m/sec)		16	16	24	29	40
St-2 (K <sub>St</sub> = 201-300 bar m/sec)		21	21	24	29	40
St-3 (K <sub>St</sub> > 300 bar m/sec)		24	24	24	29	40
<b>Combustible Solids</b>						
Dense > 40 mm thick <sup>4</sup>	N <sub>F</sub> = 1	4	14	24	29	40
Open < 40 mm thick <sup>5</sup>	N <sub>F</sub> = 2	10	14	24	29	40
Foam, fiber, powder, etc. <sup>6</sup>	N <sub>F</sub> = 3	16	16	24	29	40

Figura 37. Determinación del factor material a partir de la clasificación NFPA. Fuente:(141)

En la Tabla 64 se muestran los compuestos presentes en el reactor con su respectivo factor material. El factor material de la unidad será 16, debido al benceno, que es el compuesto mayoritario dentro del reactor.

Tabla 64. Factor Material de los compuestos presentes en el reactor R-101 A/B. Fuente:(141) y FDS

Sustancia	N <sub>H</sub>	N <sub>F</sub>	N <sub>R</sub>	FM
Benceno	2	3	0	16
Dodeceno	0	1	1	14
Dodecibenceno	1	1	0	4

### 11.9.3 Factor de Riesgos Generales del Proceso

Los factores de riesgos generales del proceso son fundamentales para la determinación de la magnitud de un incidente con pérdidas. Dentro de los riesgos generales, se incluyen seis aspectos implicados en un elevado número de incidentes relacionados con incendios y explosiones.

Se aplicará la penalización correspondiente a cada riesgo, aunque puede haber ciertos riesgos a los que no sea necesario aplicar ninguna penalización. Estas penalizaciones se deben aplicar bajo las condiciones más peligrosas a las que pueda estar expuesto el reactor.

La penalización aplicada a cada índice se explica a continuación:

- Reacciones químicas exotérmicas: Dentro del reactor R-101 A/B tiene lugar una reacción de alquilación. Esta se trata de una reacción moderadamente exotérmica, por lo que la penalización aplicada será de 0,5.
- Procesos endotérmicos: No existe ningún proceso endotérmico dentro del reactor. Por tanto, no se aplicará penalización ninguna para este índice.
- Manejo y transporte del material: Se evalúa el riesgo potencial de incendio del reactor relacionado con el manejo, transporte y almacenamiento de los materiales. Dentro del reactor hay benceno, un líquido inflamable con N<sub>F</sub>=3, por lo que la penalización aplicada será de 0,85, al haber circulación y almacenamiento de sustancias con dicha clasificación NFPA de inflamabilidad.

- d) Unidades de proceso cerradas o interiores: El reactor se encuentra al aire libre, por tanto, no habrá penalización para este apartado.
- e) Acceso: No se aplica la penalización por acceso, puesto que el reactor está situado al aire libre y sin ninguna limitación para acceder a él.
- f) Drenaje y control de derrames: No existe un diseño específico para el sistema de drenaje y se trabaja con benceno, cuyo punto flash es inferior a 60°C, por lo que la penalización aplicada será de 0,5.

Finalmente, el factor por riesgos generales del proceso ( $F_1$ ) es la suma del factor base y de las penalizaciones descritas. Por tanto, para el reactor R-101 A/B, este factor tendrá un valor de 2,85.

#### 11.9.4 Factor de Riesgos Especiales del Proceso

Los riesgos especiales del proceso se tratan de condiciones específicas del proceso que se han comprobado que contribuyen a la probabilidad de accidente por incendio o explosión. Se distinguen doce índices, cuyas penalizaciones se explican a continuación: (141)

- a) Materiales tóxicos: Dicha penalización se obtiene de la multiplicación de 0,2 por el factor de salud de la clasificación NFPA 704 ( $N_H$ ). El factor de salud del benceno es 2, por tanto, la penalización aplicada será de 0,4.
- b) Presión subatmosférica: La presión de operación del reactor R-101 A/B es de 10 bar, valor superior a los 500 mmHg, así que no habrá penalización para este apartado.
- c) Operación en o cerca del rango de inflamabilidad: El reactor presenta benceno, con  $NF=3$ , dentro de su rango de inflamabilidad, sin embargo, se trata de un sistema cerrado, por lo que solo se formará una mezcla inflamable con aire en caso de fallo de una válvula o junta. Por tanto, se aplicará una penalización de 0,3, pues puede entrar en el rango de inflamabilidad solo en caso de fallo de un instrumento o equipo.
- d) Explosión de polvo: No habrá penalización para este índice, debido a que no se trabaja con polvo ni sólidos en el reactor.
- e) Presión: Se aplica una penalización para los equipos que operan a una presión superior a la atmosférica, siguiendo la Figura 38. La presión de operación del reactor es de 10 bar (145,04 psig), por lo que la penalización por presión de operación es de 0,37. Mientras que la presión de alivio es de 13,91 bar (201,75 psig), por lo que su penalización sería de 0,42. Se divide la penalización por presión de operación entre la presión de alivio para obtener el ajuste de penalización por presión, obteniendo un valor de 0,88. Finalmente, se multiplica el factor de penalización por presión de operación por el factor de ajuste, para obtener la penalización por presión, que tomará un valor de 0,33.

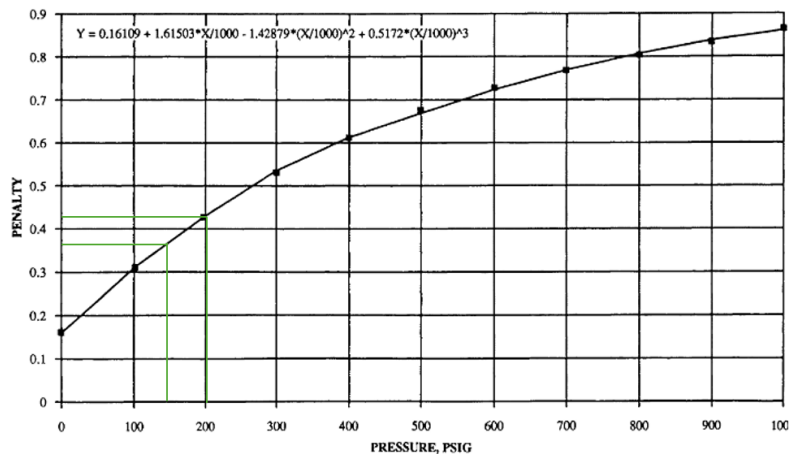


Figura 38. Penalización por presión. Fuente:(141)

- f) Temperatura Baja: Este factor se aplica si el material del equipo se encuentra expuesto a temperaturas inferiores a la temperatura de transición del material. En este caso, no se trabaja a temperaturas bajas, por lo que no se aplicará esta penalización.
- g) Cantidad de material inflamable o inestable: Esta penalización se aplica en función de la cantidad de sustancia inflamable o inestable que puede ser liberada en caso de accidente. Se aplica para el material seleccionado como base del factor material, en este caso, el benceno. El benceno se encuentra en condiciones superiores a su punto de inflamación, por lo que, en caso de fuga, se produciría una atmósfera inflamable. Para esta sección, hay que seleccionar una entre las tres categorías disponibles, eligiendo la de líquidos o gases en el proceso. Para esta categoría, la penalización se obtiene de la Figura 39, para la cual se requiere la combustión total.

La combustión total se obtiene de la multiplicación de la cantidad total de benceno en el interior del reactor por la entalpía de combustión del componente. La entalpía de combustión se obtiene del Apéndice A de la Guía para la Clasificación del Riesgo, siendo la del benceno de  $17,3 \cdot 10^3$  BTU/lb.

La cantidad de benceno se calcula con la ecuación [2].

$$m_B = V_L \cdot \bar{C}_B \cdot PM_B \quad [2]$$

Donde:

- $m_B$ : Masa de benceno en el interior del reactor (kg)
- $V_L$ : Volumen de líquido total contenido en el reactor ( $m^3$ )
- $\bar{C}_B$ : Concentración media de benceno dentro del reactor ( $kmol/m^3$ )
- $PM_B$ : Peso molecular del benceno (kg/kmol)

Al tratarse de un reactor de lecho fijo, la concentración del benceno va variando a lo largo del reactor, es por ello que se toma el valor medio, calculado con la ecuación [3].

$$\bar{C}_B = \frac{C_{B,0} + C_{B,S}}{2} \quad [3]$$

Donde:

- $C_{B,0}$ : Concentración inicial de benceno ( $kmol/m^3$ )
- $C_{B,S}$ : Concentración de benceno a la salida del reactor ( $kmol/m^3$ )

En la Tabla 65 se muestran los resultados de estos cálculos. Estos datos se obtienen del *Anexo II: Cálculos Justificativos Parte B*.

Tabla 65. Cálculo del contenido energético del reactor R-101 A/B. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$V_L$ ( $m^3$ )	3,49
$C_{B,0}$ ( $kmol/m^3$ )	8,60
$C_{B,S}$ ( $kmol/m^3$ )	8,19
$\bar{C}_B$ ( $kmol/m^3$ )	8,40
$PM_B$ (kg/kmol)	78,11
$m_B$ (kg)	2290,87
$m_B$ (lb)	5050,50
HC (BTU/lb· $10^3$ )	17,30
HC (BTU· $10^9$ )	0,09

Una vez obtenido el contenido energético debido al benceno presente en el reactor, se obtiene la penalización correspondiente por cantidad de material inflamable en la Figura 39. Obteniéndose el valor mínimo, de 0,16.

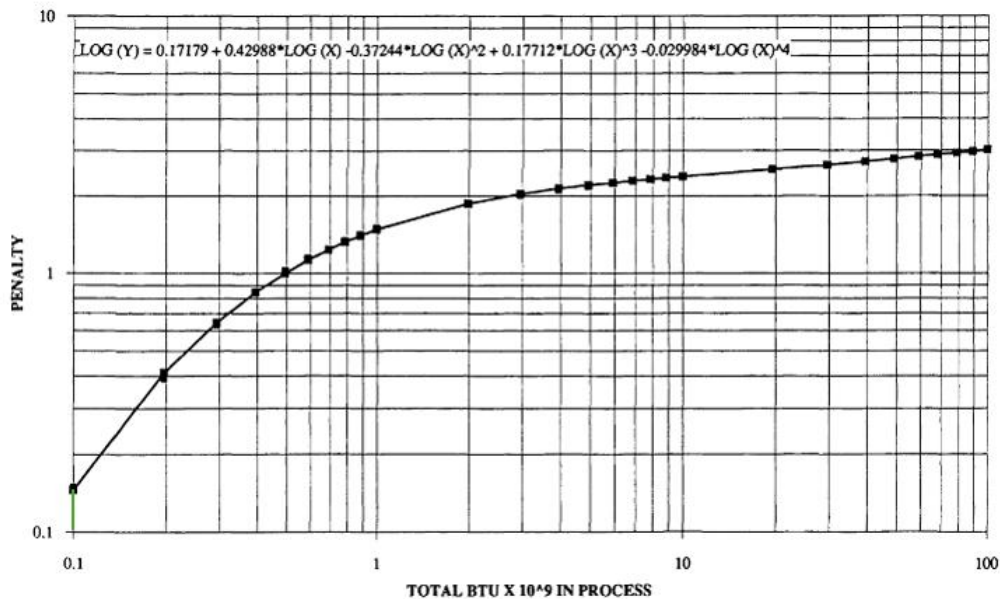


Figura 39. Penalización por cantidad de material inflamable o inestable. Fuente: (141)

- h) Corrosión y erosión: La tasa de corrosión del benceno con aceros inoxidables es menor de 0,1 mm/año (142). Al presentar una tasa de corrosión menor de 0,127 mm/año, su penalización es de 0,1.
- i) Fugas-Juntas y empaquetaduras: Se aplicará una penalización de 0,3, debido a que es una unidad donde ocurren ciertas variaciones de temperatura y presión durante el proceso, al tener que regenerar el lecho.
- j) Uso de equipos con llama: No existen equipos con llama presentes en el proceso, por lo que no habrá penalización para este índice.
- k) Sistema de intercambio de calor con aceite caliente: No se aplica penalización, porque no sistemas de intercambio de calor con aceite caliente en la planta.
- l) Equipos rotatorios: La unidad del proceso no dispone de equipos rotatorios, por lo que no se aplicará penalización.

Finalmente, el factor por riesgos especiales del proceso ( $F_2$ ) es la suma del factor base y de las penalizaciones descritas. Por tanto, para el reactor R-101 A/B, este factor tendrá un valor de 2,59.

### 11.9.5 Formularios del Índice DOW de fuego y explosión

En la Tabla 66 se muestra el formulario donde se aplican todos los factores de riesgo explicados anteriormente y se calcula el índice final de fuego y explosión.



### 11.9.6 Grado de peligrosidad

Una vez se calcula el índice de fuego y explosión (F&EI) se puede determinar el grado de peligrosidad de la unidad analizada, mediante la Tabla 67.

Tabla 67. Grado de peligrosidad en función del F&EI. Fuente: (141)

Rango F&EI	Grado de peligrosidad
1-60	Suave
61-96	Moderado
97-127	Intermedio
128-158	Grave
>159	Severo

Por tanto, el reactor R-101 A/B, al tener un índice DOW de 118,10, su grado de peligrosidad es intermedio.

### 11.9.7 Radio y área de exposición

Es de gran importancia calcular el radio y el área de exposición, puesto que indican la distancia y el área hasta donde se vería afectado por casos de incendio o explosión en el reactor. El radio de exposición se obtiene de la Figura 40 a partir del índice DOW.

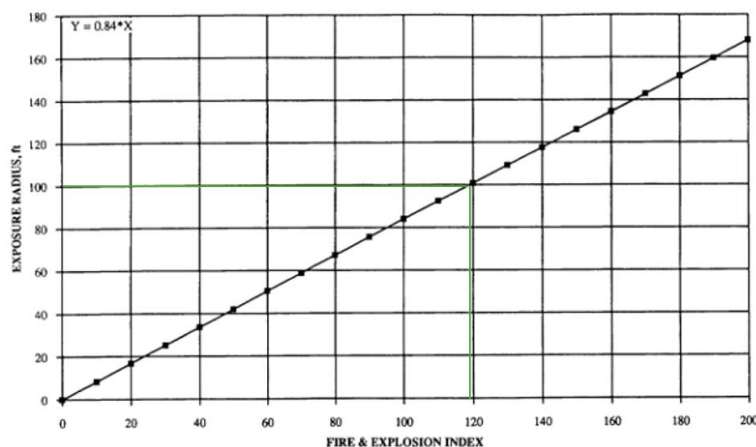


Figura 40. Radio de exposición en función de F&EI. Fuente: (141)

Finalmente, el radio de exposición es de 30,48 m (100 ft) y con la ecuación [4] se calcula el área de exposición, cuyo valor es de 2.918,64 m<sup>2</sup>.

$$\text{Área de exposición} = \pi \cdot R^2 \quad [4]$$

### 11.9.8 Factor de Daño

El factor de daño representa el efecto combinado debido al fuego y explosión que resulta de liberar combustible o energía reactiva de la unidad del proceso. Este factor de daño se determina con la Figura 41 a partir del valor del factor de peligrosidad de la unidad del proceso (F<sub>3</sub>) y el factor material (FM). El factor de daño obtenido es de 0,65.

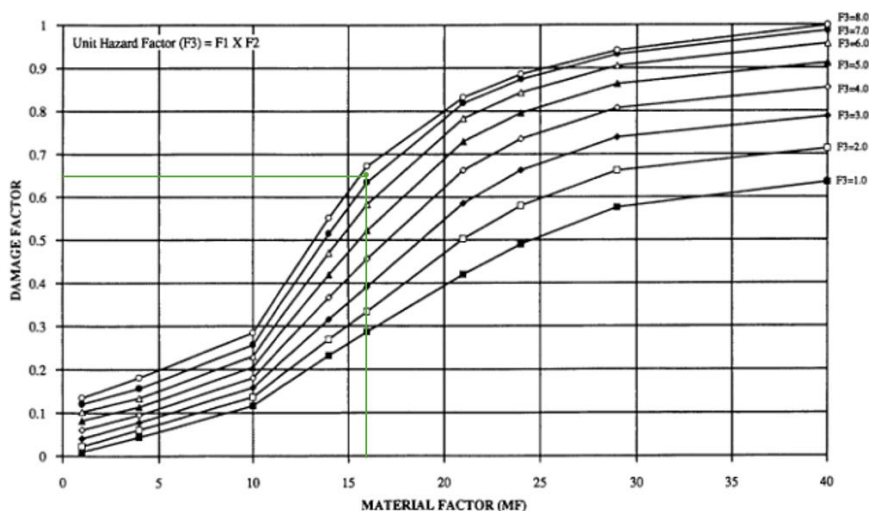


Figura 41. Factor de daño. Fuente: (141)

## 12 Legislación aplicable, reglamentos y códigos

### 12.1 Legislación general

- Directiva 2008/68/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de septiembre de 2008, sobre el transporte de mercancías peligrosas. Referencia: DOUE-L-2008-81911.
- Real Decreto Legislativo 2/2015, de 23 de octubre, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley del Estatuto de los Trabajadores. Referencia: BOE-A-2015-11430.
- Real Decreto 314/2006, de 17 de marzo, por el que se aprueba el Código Técnico de la Edificación. Referencia: BOE-A-2006-5515.
- Real Decreto 337/2014, de 9 de mayo, por el que se aprueban el Reglamento sobre condiciones técnicas y garantías de seguridad en instalaciones eléctricas de alta tensión y sus Instrucciones Técnicas Complementarias ITC-RAT 01 a 23. Referencia: BOE-A-2014-6084.
- Real Decreto 842/2002, de 2 de agosto, por el que se aprueba el Reglamento electrotécnico para baja tensión. Referencia: BOE-A-2002-18099

### 12.2 Legislación ambiental

- Legislación europea
- Directiva 2008/50/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 21 de mayo de 2008, relativa a la calidad del aire ambiente y a una atmósfera más limpia en Europa. Referencia: DOUE-L-2008-81053.
- Directiva 2024/2881/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 23 de octubre de 2024, sobre la calidad del aire ambiente y a una atmósfera más limpia en Europa, (versión refundida). Referencia: DOUE-L-2024-81722.
- Directiva 2002/49/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 25 de junio de 2002, sobre evaluación y gestión del ruido ambiental. Referencia: DOUE-L-2002-81289.
- Directiva (UE) 2024/1785 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de abril de 2024, por la que se modifican la Directiva 2010/75/UE del Parlamento Europeo y del Consejo sobre las emisiones industriales (prevención y control integrados de la contaminación) y la Directiva 1999/31/CE del Consejo relativa al vertido de residuos. Referencia: DOUE-L-2024-81092.

- Directiva 2010/75/UE, de 24 de noviembre de 2010, sobre las emisiones industriales (prevención y control integrados de la contaminación). Referencia: DOUE-L-2010-82362.
- Legislación nacional
- Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental. Referencia: BOE-A-2013-12913.
- Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera. Referencia: BOE-A-2007-19744.
- Ley 42/2007, de 13 de diciembre, del Patrimonio Natural y de la Biodiversidad. Referencia: BOE-A-2007-21490.
- Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire. Referencia: BOE-A-2011-1645.
- Ley 7/2022, de 8 de abril, de residuos y suelos contaminados para una economía circular. Referencia: BOE-A-2022.
- Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido. Referencia: BOE-A-2003-20976.
- Real Decreto 849/1986, de 11 de abril, por el que se aprueba el Reglamento del Dominio Público Hidráulico, que desarrolla los títulos Preliminar, I, IV, V, VI y VII de la Ley 29/1985, de 2 de agosto, de Aguas. Referencia: BOE-A-1986-10638.
- Legislación autonómica
- Decreto 172/2022, de 20 de septiembre, del Catálogo de fauna salvaje autóctona amenazada y de medidas de protección y conservación de la fauna salvaje autóctona protegida DOGC núm. 8758
- Decreto Legislativo 2/2008, de 15 de abril, por el que se aprueba el Texto refundido de la Ley de protección de los animales. Referencia: DOGC-f-2008-90016

### 12.3 Legislación de seguridad e higiene

#### -Legislación europea

- Reglamento (CE) nº 1907/2006 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 18 de diciembre de 2006, relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de sustancias y preparados químicos (REACH), por el que se crea la Agencia Europea de Sustancias y Preparados Químicos, se modifica la Directiva 1999/45/CE y se derogan el Reglamento (CEE) nº 793/93 del Consejo y el Reglamento (CE) nº 1488/94 de la Comisión así como la Directiva 76/769/CEE del Consejo y las Directivas 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CEE y 2000/21/CE de la Comisión. Referencia: DOUE-L-2006-82750.
- Reglamento (UE) 2016/425 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 9 de marzo de 2016, relativo a los equipos de protección individual y por el que se deroga la Directiva 89/686/CEE del Consejo. Referencia: DOUE-L-2016-80531
- Reglamento (CE) nº 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008, sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancia y mezclas, y por el que se modifican y derogan las Directivas 67/548/CEE y 1999/45/CE y se modifica el Reglamento (CE) nº 1907/2006. Referencia: DOUE-L-2008-82637.
- Directiva 2012/18/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativa al control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas y por la que se modifica y ulteriormente deroga la Directiva 96/82/CE. Referencia: DOUE-L-81319.

- Directiva 2014/34/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 26 de febrero de 2014, sobre la armonización de las legislaciones de los Estados miembros en materia de aparatos y sistemas de protección para uso en atmósferas potencialmente explosivas (ATEX).

#### -Legislación nacional

- Real Decreto 840/2015, de 21 de septiembre, por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas. Referencia: BOE-A-2015-11268
- Real Decreto 773/1997, de 30 de mayo, sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas a la utilización por los trabajadores de equipos de protección individual. Referencia: BOE-A-1997-12735.
- Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales. Referencia: BOE-A-1995-24292.
- Real Decreto 393/2007, de 23 de marzo, por el que se aprueba la Norma Básica de Autoprotección de los centros, establecimientos y dependencias dedicados a actividades que pueden dar origen a situaciones de emergencia. Referencia: BOE-A-2007-6237
- Real Decreto 468/1997, de 14 de abril, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en los lugares de trabajo.
- Real Decreto 1215/1997, de 18 de julio, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud para la utilización por los trabajadores de los equipos de trabajo.
- Real Decreto 374/2001, de 6 de abril, sobre la protección de la salud y seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con los agentes químicos durante el trabajo.
- Real Decreto 681/2003, de 12 de junio, sobre la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores expuestos a los riesgos derivados de atmósferas explosivas en el lugar de trabajo.
- Real Decreto 2267/2004, de 3 de diciembre, por el que se aprueba el Reglamento de seguridad contra incendios en los establecimientos industriales.
- Real Decreto 97/2014, de 14 de febrero, por el que se regulan las operaciones de transporte de mercancías peligrosas por carretera en territorio español.
- Real Decreto 809/2021, de 21 de septiembre, por el que se aprueba el Reglamento de equipos a presión y sus instrucciones técnicas complementarias.
- Real Decreto 899/2015, de 9 de octubre, por el que se modifica el Real Decreto 39/1997, de 17 de enero, por el que se aprueba el Reglamento de los Servicios de Prevención (B.O.E. no 243 10/10/2015)

### **12.4 Normas, guías y códigos de diseño**

- Código ASME Boiler and Pressure Vessel Code (BPV)
- Normas UNE
- Normas DIN
- Normas ISO
- Normativa TEMA
- Norma NFPA 704
- API RP 520
- GAP 2.5.2
- Estándar ISA-5.1-2009

- Guía de Índice DOW de fuego y explosión

### 13 Bibliografía

- 1 ZOLLER, Uri. *Handbook of Detergents. Part D: Production*. Boca Ratón: CRC Press-Taylor & Francis Group, 2009. ISBN 978-1-4200-5455-3.
- 2 *Los detergentes. Opciones*, marzo 2002, n.º 2.
- 3 IDUN NATURE. *¿Qué son los tensioactivos?* En línea. Disponible en: <https://www.idun-nature.com/blog/archivos/que-son-los-tensioactivos/>. [consulta: 29-04-2025]
- 4 SHOKRI, Aref y KARIMI, Safoora. *A review in linear alkylbenzene (LAB) production processes in the petrochemical industry*. *Russian Journal of Applied Chemistry*, 1 noviembre 2021, vol. 94, n.º 11, pp. 1546–1559. <https://doi.org/10.1134/S1070427221110094>
- 5 ZHANG, Jinchang, ZHU, Zuogang, LI, Chengyue, WEN, Langyou y MIN, Enze. *Characterization and kinetic investigation of tungstophosphoric supported on SiO<sub>2</sub> for alkylation of benzene with 1-dodecene to synthesize linear alkylbenzene*. *Applied Catalysis A: General*, 2003, vol. 241, n.º 1, pp. 133–142. [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(02\)00449-5](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(02)00449-5)
- 6 FOSTER, Norman C. *Sulfonation and Sulfation Processes*. Sitio web. Disponible en: <http://www.chemithon.com>. [consulta: 29-04-2025]
- 7 DE GROOT, W. Herman. *Sulphonation Technology in the Detergent Industry*. Dordrecht: Springer Netherlands, 1991. ISBN 978-90-481-4088-6.
- 8 LLANES, Junior Lorenzo, ZUMALACÁRREGUI DE CÁRDENAS, Lourdes y PÉREZ ONES, Osney. *Evaluación del proceso de producción de detergente en polvo a partir de la simulación*. *Revista Ingenierías Universidad de Medellín*, 2016, vol. 15, n.º 28, pp. 241–260. <https://doi.org/10.22395/rium.v15n28a12>
- 9 BOARD NIIR. *Handbook on Soaps, Detergents & Acid Slurry*. En línea. 3.ª ed. Asia Pacific Business Press, [s. f.]. ISBN 978-81-7833-093-8. Disponible en: <https://books.google.sh/books?id=vvQvDAAAQBAJ>. [consulta: 29-04-2025]
- 10 PLASMATREAT GMBH. *Benceno*. En línea. Disponible en: <https://www.plasma.com/es/glosario-de-tecnologia-del-plasma/benceno/>. [consulta: 29-04-2025]
- 11 INTERNATIONAL PROGRAMME ON CHEMICAL SAFETY (IPCS), ORGANIZACIÓN MUNDIAL DE LA SALUD (OMS), OIT y PNUMA. *Ficha internacional de seguridad química: Benceno (ICSC:0015)*. [s. f.].
- 12 ENGINEERING TOOLBOX. *Benzene – Thermophysical properties*. En línea. Disponible en: [https://www.engineeringtoolbox.com/benzene-benzol-properties-d\\_2053.html](https://www.engineeringtoolbox.com/benzene-benzol-properties-d_2053.html). [consulta: 28-04-2025]
- 13 REPSOL. *Benceno*. Sitio web. Disponible en: <https://www.repsol.com/es/productos-y-servicios/materiales/productos/benceno/index.cshtml>. [consulta: 28-04-2025]
- 14 LA INDUSTRIAL EVENTOS. *Aplicaciones industriales del benceno*. En línea. Disponible en: [https://www.laindustrialeventos.com/aplicaciones-industriales-del-benceno/#google\\_vignette](https://www.laindustrialeventos.com/aplicaciones-industriales-del-benceno/#google_vignette). [consulta: 28-04-2025]
- 15 UNIVERSIDAD DE ALICANTE. *Dodeceno*. En línea. Proyecto académico del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Alicante. Disponible en: <https://vctrac.es/index.php?title=dodeceno>. [consulta: 28-04-2025]
- 16 ZOLLER, Uri. *Laundry Detergents*. En línea. 2004. ISBN 0-8247-5362-0. Disponible en: [https://en.psgraw.com/wp-content/uploads/2021/12/book\\_Laundry-Detergents.pdf](https://en.psgraw.com/wp-content/uploads/2021/12/book_Laundry-Detergents.pdf). [consulta: 28-04-2025]
- 17 ENGINEERING TOOLBOX. *Standard enthalpy of formation, Gibbs energy of formation, entropy and molar heat capacity of organic substances*. En línea. Disponible en: [https://www.engineeringtoolbox.com/standard-enthalpy-formation-value-Gibbs-free-energy-entropy-heat-capacity-organic-d\\_1979.html](https://www.engineeringtoolbox.com/standard-enthalpy-formation-value-Gibbs-free-energy-entropy-heat-capacity-organic-d_1979.html). [consulta: 28-04-2025]
- 18 ENGINEERING TOOLBOX. *Hydrocarbons – Physical Data*. En línea. Disponible en: [https://www.engineeringtoolbox.com/hydrocarbon-boiling-melting-flash-autoignition-point-density-gravity-molweight-d\\_1966.html](https://www.engineeringtoolbox.com/hydrocarbon-boiling-melting-flash-autoignition-point-density-gravity-molweight-d_1966.html). [consulta: 28-04-2025]

- 19 PUBCHEM. *1-Dodecene*. Sitio web. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1-Dodecene>. [consulta: 28-04-2025]
- 20 INTERNATIONAL PROGRAMME ON CHEMICAL SAFETY (IPCS), OMS, OIT y PNUMA. *Ficha internacional de seguridad química: 1-Dodeceno (ICSC 1567)*. En línea. Disponible en: [https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p\\_lang=es&p\\_card\\_id=1567&p\\_version=2](https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_lang=es&p_card_id=1567&p_version=2). [consulta: 28-04-2025]
- 21 INTERNATIONAL PROGRAMME ON CHEMICAL SAFETY (IPCS). *Ficha internacional de seguridad química: Óleum*. En línea. Disponible en: [https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p\\_card\\_id=1447&p\\_version=1&p\\_lang=es](https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=1447&p_version=1&p_lang=es). [consulta: 28-04-2025]
- 22 LUMITOS AG. *Óleum*. En línea. Disponible en: <https://www.quimica.es/enciclopedia/%C3%93leum.html>. [consulta: 28-04-2025]
- 23 ENGINEERING TOOLBOX. *Thermal properties of water*. En línea. Disponible en: [https://www.engineeringtoolbox.com/water-thermal-properties-d\\_162.html](https://www.engineeringtoolbox.com/water-thermal-properties-d_162.html). [consulta: 28-04-2025]
- 24 VADEQUÍMICA. *Aplicaciones del hidróxido de sodio*. En línea. Disponible en: <https://www.vadequimica.com/blog/todos-los-articulos/aplicaciones-del-hidroxido-de-sodio.html#85f0/fullscreen-initial/>. [consulta: 28-04-2025]
- 25 FISHER SCIENTIFIC. *Sodium Hydroxide Solution 20%*. En línea. Disponible en: <https://www.fishersci.es/shop/products/sodium-hydroxide-solution-20/11945497>. [consulta: 28-04-2025]
- 26 SUGEST (SAUDI GULF EST.). *Sugest CDA 85 C*. En línea. Disponible en: <https://sugest.com.sa/product-categories/surfactants/nonionic-surfactant/sugest-cda-85-c/>. [consulta: 28-04-2025]
- 27 FENGCHEN GROUP CO., Ltd. *Tetrapotassium Pyrophosphate (BP/EP/USP)*. En línea. Disponible en: <http://www.fengchengroup.org/chemicals/featured-chemicals/tetrapotassium-pyrophosphate-bp-ep-usp-cas.html>. [consulta: 28-04-2025]
- 28 QIZHENG CHEMICAL. *What is Tetra Potassium Pyrophosphate Used For?* En línea. Disponible en: <https://www.qizhengchem.com/info/what-is-tetra-potassium-pyrophosphate-used-for-89788292.html>. [consulta: 28-04-2025]
- 29 GUIDECEM. *Tolueno-4-sulfonato de potasio*. En línea. Disponible en: <https://wap.guidechem.com/dictionary/es/16106-44-8.html>. [consulta: 28-04-2025]
- 30 PROQUINSA. *Metasilicato de sodio*. En línea. Disponible en: <https://proquinsa.com/productos/metasilicato-de-sodio/>. [consulta: 28-04-2025]
- 31 CYMIT QUÍMICA. *6834-92-0 | Metasilicato de sodio*. En línea. Disponible en: <https://cymitquimica.com/es/cas/6834-92-0/>. [consulta: 28-04-2025]
- 32 VADEQUÍMICA. *Aplicaciones del ácido sulfúrico*. En línea. Disponible en: <https://www.vadequimica.com/blog/todos-los-articulos/aplicaciones-acido-sulfurico.html?srsIid=AfmBOoqJcNbaW0BS-GdUhJaIMiX9SLG9VxBienc72HfJ1SmaSdTtn4q>. [consulta: 28-04-2025]
- 33 IMARC GROUP. *Tamaño y cuota del mercado de detergentes líquidos | Informe [2024-2032]*. En línea. Disponible en: <https://www.imarcgroup.com/report/es/liquid-detergent-market>. [consulta: 17-06-2025]
- 34 INFORMES DE EXPERTOS. *Mercado de Detergentes de Lavandería, Informe 2025-2034*. En línea. Disponible en: <https://www.informesdeexpertos.com/informes/mercado-de-detergentes-de-lavanderia>. [consulta: 17-06-2025]
- 35 DEFY. *The Great Laundry Detergent Debate: Powder vs. Liquid*. En línea. Disponible en: <https://www.defy.co.za/blog/news/hreat-laundry-detergent-debate-powder-vs-liquid>. [consulta: 17-06-2025]
- 36 HENKEL. *La sostenibilidad aplicada a los detergentes*. En línea. 25 enero 2022. Disponible en: <https://www.henkel.es/actualidad/2022-01-25-la-sostenibilidad-aplicada-a-los-detergentes-1553770>. [consulta: 17-06-2025]
- 37 DATA BRIDGE MARKET RESEARCH. *Informe del mercado global de 1-dodeceno: tendencias de la industria y pronóstico hasta 2028*. En línea. Disponible en:

- <https://www.databridgemarketresearch.com/es/reports/global-1-dodecene-market?srsId=AfmBOoondjTI-LY3cVy-zRWcc2ypVaSp9UztA75cDoGgYkVkG1uCD45O>. [consulta: 17-06-2025]
- 38 INSTITUTO NACIONAL DE ESTADÍSTICA (INE). *INEbase. CONSUL*. En línea. Disponible en: <https://www.ine.es/consul/serie.do?d=true&s=IPR30072>. [consulta: 17-06-2025]
- 39 STATISTA. *Jabones, detergentes y perfumes: volumen de producción en España*. En línea. Disponible en: <https://es.statista.com/estadisticas/906391/volumen-de-jabones-detergentes-y-perfumes-producido-producido-en-espana/>. [consulta: 17-06-2025]
- 40 HENKEL. *Historia Henkel Ibérica*. En línea. Disponible en: <https://www.henkel.es/actualidad/historia-henkel-iberica-espana>. [consulta: 19-05-2025]
- 41 INQUIBA. *Capacidad de producción y tamaño – Inquiba*. En línea. Disponible en: <https://inquiba.es/capacidad-de-produccion-y-tamano/>. [consulta: 17-06-2025]
- 42 LINASA. *Marcas de detergente, lavavajillas y productos de limpieza Linasa*. En línea. Disponible en: <https://linasa.es/marcas/>. [consulta: 19-05-2025]
- 43 OCU. *ECOVER UNIVERSAL HONEYSUCKLE & JASMINE: opiniones*. En línea. Disponible en: [https://www.ocu.org/electrodomesticos/detergentes-lavadora/comparador/ecover-universal-honeysuckle-jasmine/28346\\_82934](https://www.ocu.org/electrodomesticos/detergentes-lavadora/comparador/ecover-universal-honeysuckle-jasmine/28346_82934). [consulta: 17-06-2025]
- 44 IDEAL. *La OCU lo deja claro: el mejor detergente del mercado*. En línea. Disponible en: <https://www.ideal.es/economia/mi-hucha/ocu-deja-claro-mejor-detergente-mercado-20240706100330-nt.html>. [consulta: 17-06-2025]
- 45 AMAZON. *Seventh Generation Detergente de lavandería, ultra concentrado EasyDose, libre y transparente, 23.1 fl oz*. En línea. Disponible en: <https://www.amazon.es/Seventh-Generation-Detergente-concentrado-transparente/dp/B07HCLJFRX>. [consulta: 29-06-2025]
- 46 CARREFOUR. *Detergente líquido Optimal Clean Carrefour Expert 83 lavados*. En línea. Disponible en: <https://www.carrefour.es/supermercado/detergente-liquido-optimal-clean-carrefour-expert-83-lavados/R-VC4AECOMM-314207/p>. [consulta: 29-06-2025]
- 47 PCC GROUP. *Dodecilsulfonato de sodio - PCC Group Product Portal*. En línea. Disponible en: <https://www.products.pcc.eu/es/inci-15/sodium-dodecylbenzene-sulfonate/>. [consulta: 17-06-2025]
- 48 MADE-IN-CHINA. *Precio de fábrica Aditivo Alimentario Grado 92.5% 98% H2so4 Ácido Sulfúrico Grado Industrial Ácido Sulfúrico*. En línea. Disponible en: [https://es.made-in-china.com/co\\_sjzxlwchem/product\\_Factory-Price-Food-Additive-Grade-92-5-98-H2so4-Sulphuric-Acid-Industrial-Grade-Sulfuric-Acid\\_uoiriosoeg.html](https://es.made-in-china.com/co_sjzxlwchem/product_Factory-Price-Food-Additive-Grade-92-5-98-H2so4-Sulphuric-Acid-Industrial-Grade-Sulfuric-Acid_uoiriosoeg.html). [consulta: 17-06-2025]
- 49 FORTUNE BUSINESS INSIGHTS. *Benceno y sus derivados Tamaño, crecimiento y participación del mercado, 2028*. En línea. Disponible en: <https://www.fortunebusinessinsights.com/es/industry-reports/benzene-market-101717>. [consulta: 17-06-2025]
- 50 SUNSIRS. *Benceno puro precio - SunSirs, Grupo de Dato de Mercancía de China*. En línea. Disponible en: <https://www.sunsirs.com/es/prodetail-120.html>. [consulta: 17-06-2025]
- 51 ESPAÑA. *Resolución de 7 de noviembre de 2024, de la Dirección General de Política Energética y Minas, por la que se publican los nuevos precios máximos de venta, antes de impuestos, de los gases licuados del petróleo envasados. Boletín Oficial del Estado, 8 noviembre 2024, núm. 268, p. 128041*.
- 52 VANTAGE MARKET RESEARCH. *Benzene Market Trends, Growth & Innovations (2025–2035)*. En línea. Disponible en: <https://www.vantagemarketresearch.com/industry-report/benzene-market-1916>. [consulta: 29-06-2025]
- 53 METOREE. *6 Fabricantes de Benceno en 2025*. En línea. Disponible en: <https://es.metoree.com/categories/6486/>. [consulta: 17-06-2025]
- 54 ALIBABA. *Comprar China Mejor Precio Puro C6h6 Benceno 99% Cas 71-43-2 Proveedores De Venta De Toneladas A Granel Fabricante Para La Industria Solvente*. En línea. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/Buy-China-Best-Price-Pure-C6h6\\_1600886226076.html](https://www.alibaba.com/product-detail/Buy-China-Best-Price-Pure-C6h6_1600886226076.html). [consulta: 17-06-2025]
- 55 THERMO SCIENTIFIC. *1-Dodeceno, 96 %, Thermo Scientific Chemicals 100 g*. En línea. Disponible en: <https://www.fishersci.es/shop/products/1-dodecene-96-thermo-scientific/11467207>. [consulta: 17-06-2025]

- 56 ALIBABA. *1-dodecene - Buy Linear Alpha Olefin, N-dodecene, C12 Olefin Product*. En línea. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/1-Dodecene\\_1600478514399.html](https://www.alibaba.com/product-detail/1-Dodecene_1600478514399.html). [consulta: 17-06-2025]
- 57 ALIBABA. *1-dodecene Cas No: 112-41-4 - Buy 112-41-4 dodecene laurylene Product*. En línea. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/1-Dodecene-CAS-NO-112-41\\_62424507128.html](https://www.alibaba.com/product-detail/1-Dodecene-CAS-NO-112-41_62424507128.html). [consulta: 29-06-2025]
- 58 ALIBABA. *Precio De Polvo De Sílice, Comprar Sílice Pura (SiO<sub>2</sub>), Sílice De Cuarzo De Alta Pureza 99.99 Para Vidrio*. En línea. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/Silica-Powder-Price-Buy-Pure-Silica\\_1601294152428.html](https://www.alibaba.com/product-detail/Silica-Powder-Price-Buy-Pure-Silica_1601294152428.html). [consulta: 17-06-2025]
- 59 ALIBABA. *Ácido Fosfotúngstico Hidrato Al Mejor Precio Para Agente Oxidante Cas 12501-23-4*. En línea. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/Best-Price-Phosphotungstic-Acid-Hydrate-for\\_1601364975461.html](https://www.alibaba.com/product-detail/Best-Price-Phosphotungstic-Acid-Hydrate-for_1601364975461.html). [consulta: 17-06-2025]
- 60 METOREE. *8 Phosphotungstic Acid Manufacturers in 2025*. En línea. Disponible en: <https://us.metoree.com/categories/6555/>. [consulta: 17-06-2025]
- 61 EMARC GLOBAL INDUSTRIES. *Oleum 23%*. En línea. Disponible en: <https://www.emarcglobalindustries.com/products/chemicals/sulphuric-acid-group-products/oleum-23/>. [consulta: 17-06-2025]
- 62 INDIAMART. *Oleum Acid (23-25%) at ₹ 40/kg | Sulphuric Acid in Ulhasnagar*. En línea. Disponible en: <https://www.indiamart.com/proddetail/oleum-acid-23-25-2849820282791.html>. [consulta: 17-06-2025]
- 63 CUATRECASAS. *Adquisición de INEOS Sulphur Chemicals Spain por International Chemical Investors*. En línea. Disponible en: [https://www.cuatrecasas.com/es/spain/mercantil/art/international\\_chemical\\_investors\\_adquiere\\_ineos\\_sulphur\\_chemicals\\_spain](https://www.cuatrecasas.com/es/spain/mercantil/art/international_chemical_investors_adquiere_ineos_sulphur_chemicals_spain). [consulta: 17-06-2025]
- 64 EMATSA. *Tarifas*. En línea. Tarragona: Ematsa. Disponible en: <https://ov.ematsa.cat/tarifas>. [consulta: 17-06-2025]
- 65 MORDOR INTELLIGENCE. *Mercado de soda cáustica - Tamaño y Compartir - Pronóstico de la industria del fabricante*. En línea. Disponible en: <https://www.mordorintelligence.com/es/industry-reports/caustic-soda-market>. [consulta: 17-06-2025]
- 66 VADEQUÍMICA. *Comprar Hidróxido de Sodio o Sosa Cáustica Líquida | Varias concentraciones (25-1000 litros)*. En línea. Disponible en: <https://www.vadequimica.com/sosa-caustica-liquida-25-1000-litros.html>. [consulta: 17-06-2025]
- 67 ALIBABA. *Suministro De Fábrica De Ácido P-toluenosulfónico PTSA Cas 104-15-4 A Buen Precio*. En línea. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/Factory-Supply-P-Toluenesulfonic-Acid-PTSA\\_1600304537494.html](https://www.alibaba.com/product-detail/Factory-Supply-P-Toluenesulfonic-Acid-PTSA_1600304537494.html). [consulta: 17-06-2025]
- 68 ALIBABA. *Fuente Fabricante 99% Pureza Silicato De Sodio Para La Industria Del Lavado*. En línea. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/Source-Manufacturer-99-Purity-Sodium-Silicate\\_1601173397204.html](https://www.alibaba.com/product-detail/Source-Manufacturer-99-Purity-Sodium-Silicate_1601173397204.html). [consulta: 17-06-2025]
- 69 ALIBABA. *Suministro De Fábrica 98% CDEA 6501 Dietanolamida De Coco/Dietanolamina Ácida De Aceite De Coco CAS 68603-42-9*. En línea. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/Factory-Supply-98-CDEA-6501-Coconut\\_1600939282655.html](https://www.alibaba.com/product-detail/Factory-Supply-98-CDEA-6501-Coconut_1600939282655.html). [consulta: 17-06-2025]
- 70 ALIBABA. *Agente De Retención De Grado Industrial 98% Fosfato De Potasio De Alta Calidad Pirofosfato De Tetrapotasio (TKPP)*. En línea. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/Industrial-Grade-98-Retention-Agent-High\\_1601036028746.html](https://www.alibaba.com/product-detail/Industrial-Grade-98-Retention-Agent-High_1601036028746.html). [consulta: 17-06-2025]
- 71 REPSOL. *Repsol en España - Liderando el sector energético español*. En línea. Disponible en: <https://www.repsol.com/es/conocenos/donde-trabajamos/repsol-mundo/europa/espana/index.cshhtml>. [consulta: 13-05-2025]
- 72 CEPESA. *Cepsa: Gas Butano y Propano a domicilio, rápido y cómodo*. En línea. Disponible en: <https://cepsabutanopropano.com/>. [consulta: 13-05-2025]
- 73 BP. *Refinería de Castellón | Quiénes somos | Home*. En línea. Disponible en: [https://www.bp.com/es\\_es/spain/home/quienes-somos/bp-espana/refineria-de-castellon.html](https://www.bp.com/es_es/spain/home/quienes-somos/bp-espana/refineria-de-castellon.html). [consulta: 13-05-2025]

- 74 DATAINTELO. *1-Dodecene Market Report | Global Forecast From 2025 To 2033*. En línea. Disponible en: <https://dataintel.com/report/1-dodecene-market>. [consulta: 13-05-2025]
- 75 FISHER SCIENTIFIC. *Resultados de la búsqueda | Fisher Scientific*. En línea. Disponible en: <https://www.fishersci.es/es/es/catalog/search/products?keyword=dodeceno>. [consulta: 13-05-2025]
- 76 SABIC. *Cartagena - SABIC en Cartagena*. En línea. Disponible en: <https://cartagena.sabic.com/es/sabic-en-cartagena>. [consulta: 13-05-2025]
- 77 CYMIT QUÍMICA. *Dodecene | CymitQuimica*. En línea. Disponible en: <https://cymitquimica.com/es/buscar/dodecene/>. [consulta: 13-05-2025]
- 78 ATLANTIC COPPER. *Qué hacemos - Atlantic Copper*. En línea. Disponible en: <https://atlantic-copper.es/que-hacemos/>. [consulta: 14-05-2025]
- 79 ASTURIANA DE ZINC. *Asturiana de Zinc*. En línea. Disponible en: <https://www.azsa.es/>. [consulta: 14-05-2025]
- 80 INEOS. *INEOS Enterprises completes the sale of its Sulphur Chemicals business to International Chemical Investors Group*. En línea. Disponible en: <https://www.ineos.com/businesses/ineos-enterprises/news/ineos-enterprises-completes-the-sale-of-its-sulphur-chemicals-business-to-international-chemical-investors-group/>. [consulta: 13-05-2025]
- 81 *13 Fabricantes de Hidróxido de Sodio en 2025 | Metoree*. En línea. Disponible en: <https://es.metoree.com/categories/6639/>. [consulta: 14-05-2025]
- 82 *Sobre-nosotros - Quimipur*. En línea. Disponible en: <https://quimipur.com/sobre-nosotros/#>. [consulta: 14-05-2025]
- 83 *Centros de producción | Ercros*. En línea. Disponible en: <https://www.ercros.es/es/la-empresa/centros-de-produccion>. [consulta: 14-05-2025]
- 84 *T3 Química - Metasilicato de Disodio Cristal*. En línea. Disponible en: <https://www.t3quimica.com/metasilicato-disodio>. [consulta: 14-05-2025]
- 85 *Comprar Metasilicato Sódico 5H (25 kg) | Vadequimica*. En línea. Disponible en: <https://www.vadequimica.com/metasilicato-sodico-5-hidrato-25kg.html?srsId=AfmBOopNOTKwpjnehGg3MCHhcLQeohDD-jlRNTojxGNGM1TxwMrOphMW>. [consulta: 14-05-2025]
- 86 *Comprar Ácido p-toluensulfónico (25 kg) | Vadequimica*. En línea. Disponible en: [https://www.vadequimica.com/vadepiscinas/acido-p-toluensulfonico-25-kg.html?srsId=AfmBOopViRgp\\_qJFrn\\_Q\\_R8mesZpHlaQd\\_K0kwW3NxSnKwm5mBbH1F7L](https://www.vadequimica.com/vadepiscinas/acido-p-toluensulfonico-25-kg.html?srsId=AfmBOopViRgp_qJFrn_Q_R8mesZpHlaQd_K0kwW3NxSnKwm5mBbH1F7L). [consulta: 14-05-2025]
- 87 *Pirofosfato Tetrapotásico Industrial - Factorchem*. En línea. Disponible en: <https://factorchem.com/productos/todos-los-productos/industria-y-laboratorios/pirofosfato-tetrapotasico-industrial/>. [consulta: 14-05-2025]
- 88 *T3 Química - Dietanolamina de coco*. En línea. Disponible en: <https://www.t3quimica.com/dietanolamida-de-coco>. [consulta: 14-05-2025]
- 89 *Mapa Político de España*. En línea. Disponible en: [https://www.isaacbuzo.com/rccss/geografia/ejercicios/mapa\\_politico\\_espana.html](https://www.isaacbuzo.com/rccss/geografia/ejercicios/mapa_politico_espana.html). [consulta: 14-05-2025]
- 90 *Los 'pueblos con química' de Tarragona, entre la tolerancia y el control a la industria*. En línea. Disponible en: <https://www.diaridetarragona.com/tarragona/los-pueblos-con-quimica-entre-la-tolerancia-y-el-control-a-la-industria-20190522-0035-BRDT201905220035>. [consulta: 14-05-2025]
- 91 *Mapa de los polígonos petroquímicos «Norte» y «Sur» del área de... | Download Scientific Diagram*. En línea. Disponible en: [https://www.researchgate.net/figure/FIGURA-1-Mapa-de-los-poligonos-petroquimicos-Norte-y-Sur-del-area-de-Tarragona-en\\_fig1\\_261496168](https://www.researchgate.net/figure/FIGURA-1-Mapa-de-los-poligonos-petroquimicos-Norte-y-Sur-del-area-de-Tarragona-en_fig1_261496168). [consulta: 14-05-2025]
- 92 *Terreno industrial en venta en La Pobla de Mafumet, Tarragona | fotocasa*. En línea. Disponible en: <https://www.fotocasa.es/es/comprar/terreno/la-pobla-de-mafumet/la-pobla-de-mafumet/176197592/d>. [consulta: 14-05-2025]
- 93 *Google Earth*. En línea. Disponible en: [https://earth.google.com/web/@41.20277854,1.22913264,79.30531594a,65888.77808212d,1y,0h,0t,0r/data=CgRCAGgBOgMKATBCAggASg0I\\_\\_\\_\\_\\_ARAA](https://earth.google.com/web/@41.20277854,1.22913264,79.30531594a,65888.77808212d,1y,0h,0t,0r/data=CgRCAGgBOgMKATBCAggASg0I_____ARAA). [consulta: 14-05-2025]

- 94 *El polo petroquímico de Tarragona comienza su puesta en marcha tras 15 días de incertidumbre - Industria Química.* En línea. Disponible en: <https://www.industriaquimica.es/noticias/20250513/-polo-petroquimico-tarragona-comienza-su-puesta-en-marcha-tras-15-dias-incertidumbre>. [consulta: 14-05-2025]
- 95 *Claves para comprender la petroquímica en Tarragona - Industria Química.* En línea. Disponible en: <https://www.industriaquimica.es/noticias/20241104/claves-comprender-petroquimica-en-tarragona>. [consulta: 15-05-2025]
- 96 *Puerto Comercial | Puerto de Tarragona.* En línea. Disponible en: <https://porttarragona.es/puerto-comercial>. [consulta: 15-05-2025]
- 97 *Mapa de carreteras de Tarragona. Vías y autopistas en la Costa Dorada.* En línea. Disponible en: <https://www.race.es/mapa-de-carreteras-espana/mapa-de-carreteras-tarragona>. [consulta: 15-05-2025]
- 98 *AP-2 Zaragoza - Mediterráneo | Ministerio de Transportes y Movilidad Sostenible.* En línea. Disponible en: <https://www.transportes.gob.es/carreteras/peajes-dependientes-de-la-age/tramo-ap-2-zaragoza-mediterraneo>. [consulta: 15-05-2025]
- 99 *Accesible y conectada con el exterior.* En línea. Disponible en: <https://www.tarragona.cat/invest-in-tarragona/razones-para-escoger-tarragona/3.-accesible-y-conectada-con-el-exterior>. [consulta: 15-05-2025]
- 100 *Mitma licita un contrato de conservación y explotación en carreteras del Estado en la provincia de Tarragona por 20 millones de euros | Ministerio de Transportes y Movilidad Sostenible.* En línea. Disponible en: <https://www.transportes.gob.es/el-ministerio/sala-de-prensa/noticias/mie-28122022-1804>. [consulta: 15-05-2025]
- 101 *Catálogo de la red y Mapa Oficial de Carreteras | Ministerio de Transportes y Movilidad Sostenible.* En línea. Disponible en: <https://www.transportes.gob.es/carreteras/catalogo-y-evolucion-de-la-red-de-carreteras>. [consulta: 15-05-2025]
- 102 *Intermodalidad - Autoridad Portuaria de Tarragona.* En línea. Disponible en: <https://www.porttarragona.cat/es/servicio-negocio/negocio/intermodalidad>. [consulta: 15-05-2025]
- 103 *Transportes licita por 907.500 euros el estudio informativo de los nuevos accesos ferroviarios al Puerto de Tarragona | Ministerio de Transportes y Movilidad Sostenible.* En línea. Disponible en: <https://www.transportes.gob.es/el-ministerio/sala-de-prensa/noticias/mar-22042025-1202>. [consulta: 15-05-2025]
- 104 *El mapa de los trenes en España - Mapas de El Orden Mundial - EOM.* En línea. Disponible en: <https://elordenmundial.com/mapas-y-graficos/mapa-trenes-espana/>. [consulta: 15-05-2025]
- 105 *Las obras entre Tarragona y Sant Vicenç de Calders alcanzan el 70% de ejecución - Adif - AV - Adif.* En línea. Disponible en: <https://www.adifaltavelocidad.es/w/avance-obras-tunel-roda-corredor-mediterraneo-tarragona>. [consulta: 15-05-2025]
- 106 *El Aeropuerto de Reus inaugura dos nuevas rutas al Reino Unido.* En línea. Disponible en: <https://www.diaridetarragona.com/reus/el-aeropuerto-de-reus-inaugura-dos-nuevas-rutas-al-reino-unido-FE23507534>. [consulta: 15-05-2025]
- 107 *Aeropuerto de Barcelona-El Prat. Datos técnicos del Aeropuerto Josep Tarradellas.* En línea. Disponible en: <https://www.aeropuertobarcelona-elprat.com/cast/aeropuerto-de-barcelona.htm>. [consulta: 15-05-2025]
- 108 *El Aeropuerto de El Prat se fija llegar a 177.000 toneladas de carga aérea en 2025.* En línea. Disponible en: <https://www.diariodelpuerto.com/el-aeropuerto-de-el-prat-se-fija-llegar-a-177000-toneladas-de-carga-aerea-en-2025-BP18600706>. [consulta: 15-05-2025]
- 109 *INEOS Enterprises completes the sale of its Sulphur Chemicals business to International Chemical Investors Group.* En línea. Disponible en: <https://www.ineos.com/businesses/ineos-enterprises/news/ineos-enterprises-completes-the-sale-of-its-sulphur-chemicals-business-to-international-chemical-investors-group/>. [consulta: 15-05-2025]
- 110 *DIXQUÍMICS celebra su 25 aniversario en el Port de Tarragona – Foro Química y Sociedad.* En línea. Disponible en: <https://www.quimicaysociedad.org/dixquimics-celebra-su-25-aniversario-en-el-port-de-tarragona/>. [consulta: 15-05-2025]
- 111 *Historia Henkel Ibérica.* En línea. Disponible en: <https://www.henkel.es/actualidad/historia-henkel-iberica-espana>. [consulta: 19-05-2025]

- 112 *Marcas de detergente, lavavajillas y productos de limpieza Linasa*. En línea. Disponible en: <https://linasa.es/marcas/>. [consulta: 19-05-2025]
- 113 *Lavado y limpieza del hogar – Persán*. En línea. Disponible en: <https://persan.es/soluciones/lavado-limpieza-hogar/>. [consulta: 19-05-2025]
- 114 *Productos ICAP – Inquiba*. En línea. Disponible en: <https://inquiba.es/productos-icap/>. [consulta: 19-05-2025]
- 115 *IDESCAT. EPA. Cataluña. Mesa: Tasa de paro*. En línea. Disponible en: <https://www.idescat.cat/treball/epa?tc=4&id=ic40>. [consulta: 19-05-2025]
- 116 *IDESCAT. El municipio en cifras. Tarragona (Tarragonès)*. En línea. Disponible en: <https://www.idescat.cat/emex/?id=431482>. [consulta: 19-05-2025]
- 117 *Todos los grados de la Universitat Rovira i Virgili - URV, La universidad pública de Tarragona | Universitat Rovira i Virgili*. En línea. Disponible en: <https://www.urv.cat/es/estudios/grados/oferta/por-ambitos/arquitectura-e-ingenierias/>. [consulta: 19-05-2025]
- 118 *Denominación de Origen Tarragona*. En línea. Disponible en: <https://dotarragona.cat/es/soliclima.php>. [consulta: 19-05-2025]
- 119 *El clima en Tarragona, el tiempo por mes, temperatura promedio (España) - Weather Spark*. En línea. Disponible en: [https://es.weatherspark.com/y/45958/Clima-promedio-en-Tarragona-Espa%C3%B1a-durante-todo-el-a%C3%B1o#google\\_vignette](https://es.weatherspark.com/y/45958/Clima-promedio-en-Tarragona-Espa%C3%B1a-durante-todo-el-a%C3%B1o#google_vignette). [consulta: 20-05-2025]
- 120 *Ahorro y Eficiencia Energética en Climatización. Guía técnica. Condiciones climáticas exteriores de proyecto*. En línea. Disponible en: [https://www.idae.es/uploads/documentos/documentos\\_12\\_Guia\\_tecnica\\_condiciones\\_climaticas\\_exteriores\\_de\\_proyecto\\_e4e5b769.pdf](https://www.idae.es/uploads/documentos/documentos_12_Guia_tecnica_condiciones_climaticas_exteriores_de_proyecto_e4e5b769.pdf). [consulta: 16-05-2025]
- 121 *Think Hazard - Tarragona - Terremoto*. En línea. Disponible en: <https://thinkhazard.org/es/report/25809-spain-cataluna-catalunya-tarragona/EQ>. [consulta: 22-05-2025]
- 122 INSTITUTO GEOGRÁFICO NACIONAL. *Mapas de sismicidad y peligrosidad*. En línea. Disponible en: <https://www.ign.es/web/mapas-sismicidad>. [consulta: 22-05-2025]
- 123 SIGMA-ALDRICH. *Silica mesoporous*. En línea. Disponible en: [https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/search/silica-mesoporous?focus=products&page=1&perpage=30&sort=relevance&term=silica%20mesoporous&type=product\\_name](https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/search/silica-mesoporous?focus=products&page=1&perpage=30&sort=relevance&term=silica%20mesoporous&type=product_name). [consulta: 02-06-2025]
- 124 TURTON, Richard; SHAEIWITZ, Joseph A.; BHATTACHARYYA, Debangsu; WHITING, Wallace B. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. Fifth Edition. 2018.
- 125 OLLERO DE CASTRO, Pedro; FERNÁNDEZ CAMACHO, Eduardo. *Control e instrumentación de procesos químicos*. 2006. ISBN 84-7738-517-3.
- 126 ROMAGNOLI, José A.; PALAZOĞLU, Ahmet. *Introduction to Process Control*. Third edition. Boca Raton: CRC Press, 2020. ISBN 9780367367787.
- 127 ISA – INTERNATIONAL SOCIETY OF AUTOMATION. *ISA-5.1-2009: Instrumentation Symbols and Identification*. Instrument Society of America, 2009.
- 128 CROWL, Daniel A.; LOUVAR, Joseph F. *Chemical process safety: fundamentals with applications*. 3rd ed. 2011.
- 129 Unión Europea. *Reglamento (CE) n° 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008, sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas*. Diario Oficial de la Unión Europea, 31 de diciembre de 2008, L 353, p. 1–1355.
- 130 AGENCIA EUROPEA DE SUSTANCIAS Y MEZCLAS QUÍMICAS (ECHA). *Comprensión del CLP*. En línea. Disponible en: <https://echa.europa.eu/es/regulations/clp/understanding-clp>. [consulta: 24-05-2025]
- 131 INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD Y SALUD EN EL TRABAJO (INSST). *Nota técnica de prevención - NTP 878*. En línea. Disponible en: <https://www.insst.es/documentacion/colecciones-tecnicas/ntp-notas-tecnicas-de-prevencion/25-serie-ntp-numeros-856-a-890-ano-2011/nota-tecnica-de-prevencion-ntp-878>. [consulta: 24-05-2025]

- 132 Unión Europea. *Directiva 2012/18/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativa al control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas*. Diario Oficial de la Unión Europea, 24 de julio de 2012, L 197, p. 1–37.
- 133 España. *Real Decreto 840/2015, de 21 de septiembre, por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervienen sustancias peligrosas*. Boletín Oficial del Estado, 29 de septiembre de 2015, núm. 231, p. 86669–86717.
- 134 NATIONAL FIRE PROTECTION ASSOCIATION (NFPA). *Identificación de materiales peligrosos*. En línea. Disponible en: <https://www.nfpa.org/es/news-blogs-and-articulos/blogs/2021/11/05/identificaci%C3%B3n-de-materiales-peligrosos>. [consulta: 26-05-2025]
- 135 PSI SOLUCIONES. *Norma NFPA 704*. En línea. Disponible en: <https://www.psisoluciones.com.co/nfpa-704/>. [consulta: 26-05-2025]
- 136 NOAA. *Search | CAMEO Chemicals*. En línea. Disponible en: <https://cameochemicals.noaa.gov/search/simple>. [consulta: 26-05-2025]
- 137 PUBCHEM. *PubChem*. En línea. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>. [consulta: 26-05-2025]
- 138 España. *Real Decreto 681/2003*. Boletín Oficial del Estado, 12 de junio de 2003.
- 139 INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD Y SALUD EN EL TRABAJO (INSST). *Atmósferas explosivas*. En línea. Disponible en: <https://www.insst.es/materias/riesgos/seguridad-en-el-trabajo/atmosferas-explosivas>. [consulta: 27-05-2025]
- 140 GAP. *GAPS Guidelines. Oil and Chemical Plant Layout and Spacing*. [sin fecha].
- 141 AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS (AIChE). *Dow's Fire & Explosion Index Hazard Classification Guide*. 1994.
- 142 ALLEIMA. *Benzene — Corrosion Table*. En línea. Disponible en: <https://www.alleima.com/en/technical-center/corrosion-tables/benzene/>. [consulta: 30-05-2025]

ANEXO I.  
BALANCES DE  
MATERIA Y ENERGÍA

## Índice

1	Balances de materia .....	2
1.1	Introducción.....	2
1.2	Balance de materia global.....	2
1.3	Balances de materia por equipos .....	5
1.3.1	Tanque de mezcla TM-101 .....	5
1.3.2	Reactor R-101 A/B .....	5
1.3.3	Columna de destilación T-101 .....	6
1.3.4	Columna de destilación T-102 .....	6
1.3.5	Reactor R-201.....	7
1.3.6	Decantador D-201 .....	8
1.3.7	Reactor R-301.....	10
1.3.8	Tanque de mezcla TM-301 .....	11
2	Balances de energía .....	13
2.1	Introducción.....	13
2.2	Balances de energía por equipos.....	14
2.2.1	Tanques de mezcla.....	14
2.2.2	Intercambiadores de calor.....	15
2.2.3	Reactores .....	19
2.2.4	Válvula .....	20
2.2.5	Columnas de destilación.....	21
2.2.6	Decantador.....	22
3	Bibliografía.....	23

## 1 Balances de materia

### 1.1 Introducción

En el presente Anexo I se detallan los balances de materia del proceso de producción de detergente tipo LABS. Todo diseño de procesos se basa en los balances de materia, pues se encargan de determinar las cantidades de materias primas requeridas y de productos obtenidos. Asimismo, se realizan los balances de materia a cada unidad del proceso, para poder determinar los caudales y composiciones de todas las corrientes del proceso, permitiendo realizar el dimensionado básico de cada equipo. (1)

Los balances de materia se basan en la ecuación general de conservación de la masa, que se puede escribir para cualquier sistema mediante la ecuación [1].

$$\text{Entrada} - \text{Salida} \pm \text{Generación} = \text{Acumulación} \quad [1]$$

Este proceso opera en estado estacionario, por lo que no hay acumulación, así que este término puede ser eliminado de la ecuación. De esta manera, la ecuación del balance de materia se reduce a la expresión [2].

$$\text{Entrada} - \text{Salida} \pm \text{Generación} = 0 \quad [2]$$

Solo aparece el término de generación cuando tiene lugar una reacción química. Es decir, solo se aplicará la ecuación [2] para los tres reactores del proceso, R-101 A/B, R-201, R-301 y para el decantador, donde también se produce una reacción. Los balances de materia para el resto de los equipos se basan en la ecuación [3], donde el término de generación es eliminado también.

$$\text{Entrada} = \text{Salida} \quad [3]$$

A continuación, se presenta el balance de materia global del proceso y el balance de materia individual de los principales equipos del proceso. Cabe destacar que no se realizarán los balances a los equipos en los que no se produce ningún cambio entre la corriente de entrada y de salida, tales como intercambiadores de calor, bombas, compresores y válvulas.

### 1.2 Balance de materia global

Para llevar a cabo el balance de materia global del proceso es necesario conocer que la capacidad de producción de la planta es de 120.000 toneladas anuales de detergente. Asimismo, es importante conocer que la planta opera 330 días al año durante las 24 horas del día. Por tanto, se determinará el flujo másico en kg/h del producto final.

$$120.000 \frac{t \text{ det}}{\text{año}} \cdot \frac{10^3 \text{ kg det}}{1 t \text{ det}} \cdot \frac{1 \text{ año}}{330 \text{ días}} \cdot \frac{1 \text{ día}}{24 \text{ h}} = 15151,52 \text{ kg det/h}$$

En la Tabla 1 se muestra la composición del detergente, es decir, del producto final.

Tabla 1. Composición del detergente. Fuente:(2)

Compuestos	Composición másica
LAS e impurezas	16,5
Dietanolamina de coco	7,5
Pirofosfato de tetrapotasio	15
Tolueno sulfonato de potasio	7,5
Metasilicato de sodio	4,5
Agua	49

Una vez definida la producción de detergente deseada, 15151,52 kg/h, se pueden determinar las cantidades de materias primas requeridas. Debido a que cada unidad tiene su respectiva eficacia de separación, se realizarán sucesivas iteraciones hasta obtener la cantidad de materias primas

requeridas para satisfacer la producción de detergente fijada, 120.000 t/año. En la Tabla 2 se muestran los resultados de los flujos másicos de entrada al proceso, obtenidos de los balances de materia a los equipos, desarrollados en el apartado 1.3 Balances de materia por equipos. Mientras que en la Tabla 3 se muestra el flujo másico de las corrientes de salida del proceso. Cabe destacar, que la numeración de las corrientes se corresponde con las corrientes representadas en el Diagrama de Flujo, presente en el *Documento II: Planos*.

Tabla 2. Flujo másico de corrientes de entrada al proceso. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kg/h									
	1	3	20	25	33	41	44	45	46	
Benceno	536,41	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Dodeceno	-	1156,20	-	-	-	-	-	-	-	-
LAB	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
LABSA	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Agua	-	-	-	5998,48	-	-	-	-	-	-
Óleum 22%	-	-	2524,19	-	-	-	-	-	-	-
SO <sub>3</sub>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ácido sulfúrico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Disolución NaOH 20%	-	-	-	-	1830,29	-	-	-	-	-
NaOH	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
LAS	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sulfato de Sodio	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Dietanolamina de coco	-	-	-	-	-	1136,36	-	-	-	-
Pirofosfato de tetrapotasio	-	-	-	-	-	-	2272,73	-	-	-
Tolueno sulfonato de potasio	-	-	-	-	-	-	-	1136,36	-	-
Metasilicato de sodio	-	-	-	-	-	-	-	-	-	681,82
<b>Total</b>	536,41	1156,20	2524,19	5998,48	1830,29	1136,36	2272,73	1136,36	681,82	

Tabla 3. Flujo másico de corrientes de salida del proceso. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Salida, kg/h	
	29	47
Benceno	-	-
Dodeceno	-	0,31
LAB	-	84,62
LABSA	-	106,50
Agua	160,97	7423,93
Óleum 22%	-	-
SO <sub>3</sub>	-	-
Ácido sulfúrico	1960,35	-
Disolución NaOH 20%	-	-
NaOH	-	78,28
LAS	-	2159,75
Sulfato de Sodio	-	70,86
Dietanolamina de coco	-	1136,36
Pirofosfato de tetrapotasio	-	2272,73
Tolueno sulfonato de potasio	-	1136,36
Metasilicato de sodio	-	681,82
<b>Total</b>	2121,33	15151,52

Finalmente, se comprueba en la Tabla 4 el cierre del balance global del proceso y en la Tabla 5 y Tabla 6 se muestran los flujos molares de entrada y salida del proceso.

Tabla 4. Cierre balance de materia global. Fuente: Elaboración propia

Corrientes	Flujo másico, kg/h
Entradas (Corrientes 1, 3, 20, 25, 33, 41, 44, 45, 46)	17272,84
Salidas (Corrientes 29, 47)	17272,84
Cierre	0,00

Tabla 5. Flujo molar de corrientes de entrada al proceso. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kmol/h									
	1	3	20	25	33	41	44	45	46	
Benceno	6,87	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Dodeceno	-	6,87	-	-	-	-	-	-	-	-
LAB	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
LABSA	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Agua	-	-	-	332,97	-	-	-	-	-	-
Óleum 22%	-	-	27,01	-	-	-	-	-	-	-
SO <sub>3</sub>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ácido sulfúrico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Disolución NaOH 20%	-	-	-	-	90,43	-	-	-	-	-
NaOH	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
LAS	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sulfato de Sodio	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Dietanolamina de coco	-	-	-	-	-	3,94	-	-	-	-
Pirofosfato de tetrapotasio	-	-	-	-	-	-	6,88	-	-	-
Tolueno sulfonato de potasio	-	-	-	-	-	-	-	5,40	-	-
Metasilicato de sodio	-	-	-	-	-	-	-	-	5,59	-
<b>Total</b>	6,87	6,87	27,01	332,97	90,43	3,94	6,88	5,40	5,59	

Tabla 6. Flujo molar de corrientes de salida del proceso. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Salida, kmol/h	
	29	47
Benceno	-	-
Dodeceno	-	-
LAB	-	0,34
LABSA	-	0,33
Agua	8,94	412,10
Óleum 22%	-	-
SO <sub>3</sub>	-	-
Ácido sulfúrico	19,99	-
Disolución NaOH 20%	-	-
NaOH	-	1,96
LAS	-	6,20
Sulfato de Sodio	-	0,50
Dietanolamina de coco	-	3,94
Pirofosfato de tetrapotasio	-	6,88
Tolueno sulfonato de potasio	-	5,40
Metasilicato de sodio	-	5,59
<b>Total</b>	28,92	443,23

### 1.3 Balances de materia por equipos

En este apartado se desarrollarán los balances de materia a los principales equipos del proceso, es decir, en aquellos en los que se produce algún cambio en la composición o en el flujo de salida respecto a la entrada.

#### 1.3.1 Tanque de mezcla TM-101

El tanque de mezcla TM-101 se encarga de mezclar todo el benceno y dodeceno que se alimentará al reactor R-101 A/B. Por tanto, entrarán al tanque las corrientes de entrada del proceso de benceno y dodeceno, y el destilado de las columnas de destilación T-101 y T-102. De esta manera, se acondicionará junta toda la materia prima del reactor R-101 A/B. En la Tabla 7 y Tabla 8 se muestran los balances de materia a este equipo.

Tabla 7. Balances de materia en flujo másico al reactor TM-101. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kg/h				Corrientes Salida, kg/h
	2	4	11	16	5
Benceno	536,41	0,00	10756,48	0,00	11292,89
Dodeceno	0,00	1156,20	0,00	60,52	1216,72
LAB	0,00	0,00	0,00	83,90	83,90
<b>Total</b>	536,41	1156,20	10756,48	144,42	12593,51
<b>Cierre</b>			12593,51		12593,51

Tabla 8. Balances de materia en flujo molar al reactor TM-101. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entradas, kmol/h				Corrientes Salida, kmol/h
	2	4	11	16	5
Benceno	6,87	0,00	137,70	0,00	144,57
Dodeceno	0,00	6,87	0,00	0,36	7,23
LAB	0,00	0,00	0,00	0,34	0,34
<b>Total</b>	6,87	6,87	137,70	0,70	152,14
<b>Cierre</b>			152,14		152,14

#### 1.3.2 Reactor R-101 A/B

En el reactor R-101 A/B tiene lugar la reacción de alquilación [4], donde el coeficiente estequiométrico de cada compuesto es 1. Asimismo, la conversión de dodeceno es del 95% y es necesario alimentar el benceno con una relación molar 20:1 respecto al dodeceno.



Los cálculos del balance de materia a este reactor se explican más detalladamente en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte B*. En la Tabla 9 y en la Tabla 10 se resumen los resultados obtenidos para el balance de este reactor.

Tabla 9. Balances de materia en flujo másico al reactor R-101 A/B. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kg/h	Corrientes Salida, kg/h
	7	8
Benceno	11292,89	10756,48
Dodeceno	1216,72	60,84
Dodecibenceno	83,90	1776,20
<b>Total</b>	12593,51	12593,51

Se puede comprobar en la Tabla 9 que el balance al reactor cierra, debido a que el flujo másico total de entrada es igual al de salida.

Tabla 10. Balances de materia en flujo molar al reactor R-101 A/B. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Salida, kmol/h	
	7	8
Benceno	144,57	137,70
Dodeceno	7,23	0,36
Dodecilbenceno	0,34	7,21
<b>Total</b>	152,14	145,27

### 1.3.3 Columna de destilación T-101

La primera columna de destilación se encarga de separar el benceno sin reaccionar del dodeceno y dodecilbenceno. En este equipo no hay reacción química, por lo que, el flujo, tanto másico como molar, de entrada, es igual al de salida.

Para estimar la eficiencia de este equipo se hará la simulación en Aspen Hysys, utilizando el paquete termodinámico PRSV. A partir de esta herramienta se determina que la eficiencia de esta columna es prácticamente del 100%. Conociendo la eficiencia, se muestran los balances de materia en la Tabla 11 y en la Tabla 12.

Tabla 11. Balance de materia en flujo másico a la columna T-101. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kg/h		Corrientes Salida, kg/h	
	9	10	11	12
Benceno	10756,48	10756,48	0,00	0,00
Dodeceno	60,84	0,00	60,84	0,00
Dodecilbenceno	1776,20	0,00	1776,20	0,00
<b>Total</b>	12593,51	10756,48	1837,03	0,00
<b>Cierre</b>	12593,51		12593,51	

Tabla 12. Balance de materia en flujo molar a la columna T-101. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kmol/h		Corrientes Salida, kmol/h	
	9	10	11	12
Benceno	137,70	137,70	0,00	0,00
Dodeceno	0,36	0,00	0,36	0,00
Dodecilbenceno	7,21	0,00	7,21	0,00
<b>Total</b>	145,27	137,70	7,57	0,00
<b>Cierre</b>	145,27		145,27	

### 1.3.4 Columna de destilación T-102

Esta segunda columna de destilación se emplea para separar el dodeceno del dodecilbenceno. Los balances de materia a esta columna se encuentran detallados en el Anexo II. Cálculos Justificativos Parte C. Aun así, se muestra en la Tabla 13 y Tabla 14 un resumen con los resultados obtenidos.

Tabla 13. Balance de materia en flujo másico a la columna T-102. Fuente: Elaboración propia

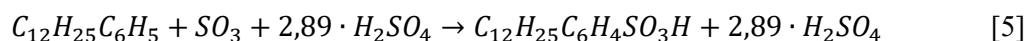
Compuestos	Corrientes Entrada, kg/h		Corrientes Salida, kg/h	
	13	14	17	
Dodeceno	60,84	60,52	0,31	
Dodecilbenceno	1776,20	83,90	1692,30	
<b>Total</b>	1837,03	144,42	1692,61	
<b>Cierre</b>	1837,03		1837,03	

Tabla 14. Balance de materia en flujo molar a la columna T-102. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kmol/h		Corrientes Salida, (kmol/h)	
	13	14	17	
Dodeceno	0,36	0,36	0,00	
Dodecilbenceno	7,21	0,34	6,87	
<b>Total</b>	7,57	0,70	6,87	
<b>Cierre</b>	7,57		7,57	

### 1.3.5 Reactor R-201

En el reactor R-201 tiene lugar la reacción de sulfonación [5]. Esta reacción tiene una conversión del 95% y una selectividad del 100%. Se alimentará con un exceso en moles del 1% de  $SO_3$ .



Se muestra en la Tabla 15 y Tabla 16 los resultados del balance de materia explicado en *el Anexo II. Cálculos Justificativos Parte D*.

Tabla 15. Balance de materia en flujo másico al reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kg/h		Corrientes Salida, kg/h	
	19	22	23	
Benceno	0,00	0,00	0,00	
Dodeceno	0,31	0,00	0,31	
Dodecilbenceno	1692,30	0,00	84,62	
Ácido dodecilbensulfónico	0,00	0,00	2130,02	
Óleum 22%	0,00	2524,19	0,00	
Trióxido de azufre	0,00	0,00	32,99	
Ácido sulfúrico	0,00	0,00	1968,87	
<b>Total</b>	1692,61	2524,19	4216,80	
<b>Cierre</b>		4216,80	4216,80	

Tabla 16. Balance de materia en flujo molar al reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kmol/h		Corrientes Salida, kmol/h	
	19	22	23	
Benceno	0,00	0,00	0,00	
Dodeceno	0,00	0,00	0,00	
Dodecilbenceno	6,87	0,00	0,34	
Ácido dodecilbensulfónico	0,00	0,00	6,52	
Óleum 22%	0,00	27,01	0,00	
Trióxido de azufre	0,00	0,00	0,41	
Ácido sulfúrico	0,00	0,00	20,07	
<b>Total</b>	6,87	27,01	27,35	

### 1.3.6 Decantador D-201

En el decantador D-201 se lleva a cabo la separación del ácido sulfúrico utilizando agua como disolvente. Empleando la Figura 1 obtenida de la bibliografía (3), en la que se muestra el diagrama de fases del sistema ácido dodecilbencensulfónico con ácido sulfúrico y agua, se determinará la cantidad necesaria de disolvente y las composiciones y flujos de las fases orgánica y acuosa obtenidas. La cantidad de agua necesaria será la mínima para que la mezcla llegue al área de inmiscibilidad y que, de esta forma, se formen dos fases diferentes. Disponiendo de los datos obtenidos en el balance al reactor R-201, se sitúa la composición de la mezcla de ácido sulfúrico que entra al decantador en el diagrama (punto P) y se itera con diferentes cantidades de agua hasta encontrar el valor mínimo que permita la separación. Se emplean las Ecuaciones [6] y [7] del balance de materia global y por componentes al decantador, y se interpola en la Figura 1 para obtener las composiciones de las corrientes extracto (E) y refinado (R). En la Tabla 17 se muestran los datos necesarios para emplear el diagrama.

$$F + S = M = R + E \quad [6]$$

$$Fx_F + Sy_s = Mx_M = Rx_R + Ey_E \quad [7]$$

Donde:

- F: Flujo molar de entrada al decantador, kmol/h
- $x_F$ : Fracción molar del ácido dodecilbencensulfónico en la corriente F
- S: Flujo molar de disolvente necesario, kmol/h
- $y_s$ : Fracción molar del ácido dodecilbencensulfónico en la corriente S
- M: Flujo total de la corriente de mezcla dentro del sistema, kmol/h
- $x_M$ : Fracción molar de ácido dodecilbencensulfónico en la mezcla M
- R: Flujo molar de la fase orgánica (refinado), kmol/h
- $x_R$ : Fracción molar del ácido dodecilbencensulfónico en la corriente R
- E: Flujo molar de la fase acuosa (extracto)
- $y_E$ : Fracción molar del ácido dodecilbencensulfónico en la corriente E

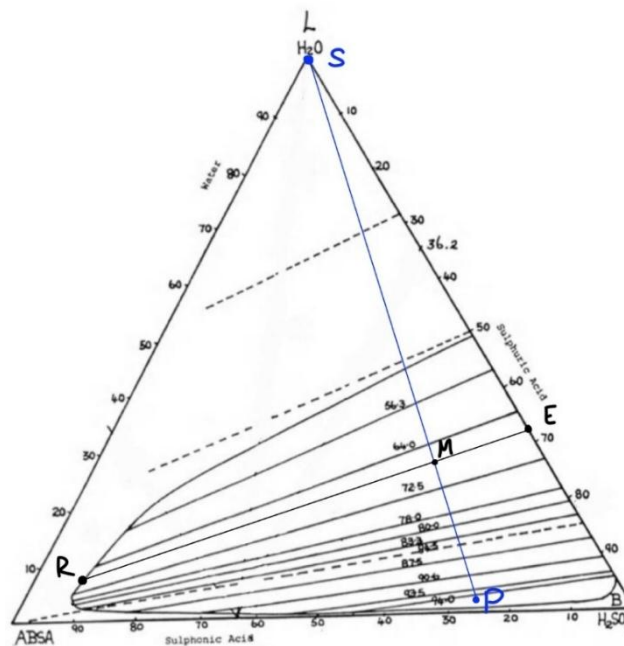


Figura 1. Diagrama de fases del sistema ternario. Adaptado de (3).

Tabla 17. Datos necesarios para emplear la Figura 1. Fuente: Elaboración propia.

Corrientes	Flujo molar, kmol/h	Composición de LABSA
F	27,35	0,238
S	10	-
M	37,35	0,175

Por tanto, se obtienen los datos de composición molar y flujo de las corrientes de salida del decantador, y se muestran los resultados obtenidos en la Tabla 18.

Tabla 18. Resultados obtenidos de emplear la Figura 1. Fuente: Elaboración propia.

Compuestos	Corrientes Salida	
	Refinado	Extracto
	Composición molar	
LABSA	0,85	-
Agua	0,085	0,335
Ácido sulfúrico	0,065	0,665
<b>Flujo molar (kmol/h)</b>	<b>7,67</b>	<b>29,68</b>

Asimismo, es importante tener en cuenta que, todo el trióxido de azufre que no reaccionó en el R-201, al entrar en contacto con agua, reacciona formando ácido sulfúrico, según la reacción [8].



En la Tabla 19 y Tabla 20 se muestran los resultados del balance de materia al decantador D-201.

Tabla 19. Balance de materia en flujo másico al decantador D-201. Fuente: Elaboración propia

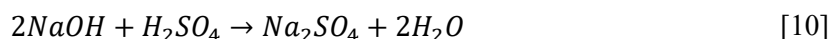
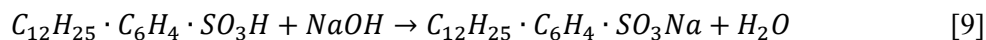
Compuestos	Corrientes Entrada, kg/h		Corrientes Salida, kg/h	
	24	28	29	30
Benceno	0,00	0,00	0,00	0,00
Dodeceno	0,31	0,00	0,00	0,31
Dodecibenceno	84,62	0,00	0,00	84,62
Ácido dodecibensulfónico	2130,02	0,00	0,00	2130,02
Agua	0,00	180,15	160,97	11,75
Trióxido de azufre	32,99	0,00	0,00	0,00
Ácido sulfúrico	1968,87	0,00	1960,35	48,93
<b>Total</b>	<b>4216,80</b>	<b>180,15</b>	<b>2121,33</b>	<b>2275,63</b>
<b>Cierre</b>	<b>4396,95</b>		<b>4396,95</b>	

Tabla 20. Balance de materia en flujo molar al decantador D-201. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kmol/h		Corrientes Salida, kmol/h	
	24	28	29	30
Benceno	0,00	0,00	0,00	0,00
Dodeceno	0,00	0,00	0,00	0,00
Dodecibenceno	0,34	0,00	0,00	0,34
Ácido dodecibensulfónico	6,52	0,00	0,00	6,52
Agua	0,00	10,00	8,94	0,65
Trióxido de azufre	0,41	0,00	0,00	0,00
Ácido sulfúrico	20,07	0,00	19,99	0,50
<b>Total</b>	<b>27,35</b>	<b>10,00</b>	<b>28,92</b>	<b>8,02</b>

### 1.3.7 Reactor R-301

El reactor R-301, en el que tiene lugar la reacción de neutralización [9], se encarga de convertir el ácido dodecibencensulfónico con hidróxido de sodio en dodecibencensulfonato de sodio. A su vez, se produce la reacción [10].



La primera reacción tiene una conversión del 95% para el LABSA, mientras que la conversión de la segunda es del 100% respecto al ácido sulfúrico. Asimismo, la relación molar de alimentación entre el LABSA : NaOH es de 1:1,25, mientras que para la segunda hay que alimentar 2 moles de NaOH por cada mol de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. La selectividad es de 1 para cada una de las reacciones. De esta manera, se introduce al reactor la cantidad necesaria de disolución de hidróxido de sodio al 20% para que transcurran las dos reacciones. (4, 5)

Se calcula la cantidad de NaOH pura y de la disolución del 20% en peso requeridas para llevar a cabo las dos reacciones mediante las ecuaciones [11] y [12]. Los resultados de estos cálculos se muestran en la Tabla 21.

$$n_{NaOH} = n_{LABSA} \cdot 1,25 + n_{H_2SO_4} \cdot 2 \quad [11]$$

$$m_{dis\ 20\% NaOH} = n_{NaOH} \cdot \frac{Pm_{NaOH} \text{ kg NaOH}}{1 \text{ kmol NaOH}} \cdot \frac{100 \text{ kg dis } 20\% NaOH}{20 \text{ kg NaOH}} \cdot \frac{1 \text{ kmol dis } 20\% NaOH}{Pm_{dis\ 20\% NaOH} \text{ kg dis } 20\% NaOH} \quad [12]$$

Tabla 21. Cálculo cantidad disolución NaOH requerida para el reactor R-301. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
n H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	0,50
n LABSA	6,52
Pm NaOH	40,00
Pm dis 20% NaOH	20,24
n NaOH	9,15
n dis 20% NaOH	90,43

Teniendo en cuenta los datos anteriores, se calcularán las cantidades de cada compuesto a la salida del reactor mediante las ecuaciones [13], [14], [15], [16], [17] y [18].

$$n_{LABSA} = n_{LABSA,0} \cdot (1 - X_{LABSA}) \quad [13]$$

$$n_{LAS} = n_{LABSA,0} \cdot X_{LABSA} \quad [14]$$

$$n_{H_2SO_4} = n_{H_2SO_4,0} \cdot (1 - X_{H_2SO_4}) \quad [15]$$

$$n_{Na_2SO_4} = n_{H_2SO_4,0} \cdot X_{H_2SO_4} \quad [16]$$

$$n_{NaOH} = n_{NaOH,0} - 2 \cdot n_{H_2SO_4,0} \cdot X_{H_2SO_4} - n_{LABSA,0} \cdot X_{LABSA} \quad [17]$$

$$n_{H_2O} = n_{H_2O,0} + 2 \cdot n_{H_2SO_4,0} \cdot X_{H_2SO_4} + n_{LABSA,0} \cdot X_{LABSA} \quad [18]$$

Donde:

- n<sub>i</sub>: Flujo molar del compuesto i a la salida, kmol/h
- n<sub>i,0</sub>: Flujo molar del compuesto i a la entrada, kmol/h
- X<sub>i</sub>: Conversión de la reacción respecto al compuesto i
- Pm<sub>i</sub>: Peso molecular del componente i, kg/kmol

Finalmente, en la Tabla 22 y Tabla 23 se muestran los resultados de los balances de materia.

Tabla 22. Balances de materia en flujo másico al reactor R-301. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kg/h		Corrientes Salida, kg/h
	32	35	36
Benceno	0,00	0,00	0,00
Dodeceno	0,31	0,00	0,31
Dodecibenceno	84,62	0,00	84,62
Ácido dodecilsulfónico	2130,02	0,00	106,50
Agua	11,75	0,00	1605,61
Trióxido de azufre	0,00	0,00	0,00
Ácido sulfúrico	48,93	0,00	0,00
Disolución hidróxido de sodio 20%	0,00	1830,29	0,00
Hidróxido de sodio	0,00	0,00	78,28
Dodecilsulfonato de sodio	0,00	0,00	2159,75
Sulfato de Sodio	0,00	0,00	70,86
<b>Total</b>	<b>2275,63</b>	<b>1830,29</b>	<b>4105,92</b>
<b>Cierre</b>		<b>4105,92</b>	<b>4105,92</b>

Tabla 23. Balances de materia en flujo molar al reactor R-301. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kmol/h		Corrientes Salida, kmol/h
	32	35	36
Benceno	0,00	0,00	0,00
Dodeceno	0,00	0,00	0,00
Dodecibenceno	0,34	0,00	0,34
Ácido dodecilsulfónico	6,52	0,00	0,33
Agua	0,65	0,00	89,13
Trióxido de azufre	0,00	0,00	0,00
Ácido sulfúrico	0,50	0,00	0,00
Disolución hidróxido de sodio 20%	0,00	90,43	0,00
Hidróxido de sodio	0,00	0,00	1,96
Dodecilsulfonato de sodio	0,00	0,00	6,20
Sulfato de Sodio	0,00	0,00	0,50
<b>Total</b>	<b>8,02</b>	<b>90,43</b>	<b>98,45</b>

### 1.3.8 Tanque de mezcla TM-301

Finalmente, en el tanque de mezcla TM-301, es donde se mezcla el dodecilsulfonato de sodio con agua y los aditivos requeridos para obtener el detergente con las composiciones establecidas en la Tabla 1. Se realiza el balance de materia a este tanque, y se muestran los resultados en la Tabla 24 y Tabla 25.

Tabla 24. Balances de materia en flujo másico al tanque de mezcla TM-101. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kg/h						Corrientes Salida, kg/h
	37	40	43	44	45	46	47
Dodecilbencensulfonato de sodio	2159,75	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2159,75
Dodeceno	0,31	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,31
Dodecilbenceno	84,62	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	84,62
Ácido dodecilbensulfónico	106,50	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	106,50
Hidróxido de sodio	78,28	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	78,28
Sulfato de Sodio	70,86	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	70,86
Dietanolamina de coco	0,00	0,00	1136,36	0,00	0,00	0,00	1136,36
Pirofosfato de tetrapotasio	0,00	0,00	0,00	2272,73	0,00	0,00	2272,73
Tolueno sulfonato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	1136,36	0,00	1136,36
Metasilicato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	681,82	681,82
Agua	1605,61	5818,33	0,00	0,00	0,00	0,00	7423,93
<b>Total</b>	<b>4105,92</b>	<b>5818,33</b>	<b>1136,36</b>	<b>2272,73</b>	<b>1136,36</b>	<b>681,82</b>	<b>15151,52</b>
<b>Cierre</b>				<b>15151,52</b>			<b>15151,52</b>

Tabla 25. Balances de materia en flujo molar al tanque de mezcla TM-101. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	Corrientes Entrada, kmol/h						Corrientes Salida, kmol/h
	37	40	43	44	45	46	47
Dodecilbencensulfonato de sodio	6,20	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	6,20
Dodeceno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Dodecilbenceno	0,34	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,34
Ácido dodecilbensulfónico	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,33
Hidróxido de sodio	1,96	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,96
Sulfato de Sodio	0,50	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,50
Dietanolamina de coco	0,00	0,00	3,94	0,00	0,00	0,00	3,94
Pirofosfato de tetrapotasio	0,00	0,00	0,00	6,88	0,00	0,00	6,88
Tolueno sulfonato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	5,40	0,00	5,40
Metasilicato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	5,59	5,59
Agua	89,13	322,97	0,00	0,00	0,00	0,00	412,10
<b>Total</b>	<b>98,45</b>	<b>322,97</b>	<b>3,94</b>	<b>6,88</b>	<b>5,40</b>	<b>5,59</b>	<b>443,23</b>
<b>Cierre</b>				<b>443,23</b>			<b>443,23</b>

## 2 Balances de energía

### 2.1 Introducción

En el presente apartado se llevarán a cabo los balances de energía de las unidades del proceso. Para ello, hay que basarse en el principio de conservación de la energía, en la que hay que tener en cuenta que, a diferencia del principio de conservación de masa, la energía se puede consumir o generar en procesos químicos. La conservación de la energía sigue la ecuación [19]. (1)

$$\text{Entrada} - \text{Salida} \pm \text{Generación} = \text{Acumulación} \quad [19]$$

La energía puede existir en diversas formas, entre las que destaca la energía eléctrica, mecánica, química y el calor. Generalmente, se realizan los balances de energía al proceso para poder conocer los requisitos energéticos del proceso, es decir, la calefacción, refrigeración y la potencia requeridas. (1)

La ecuación de conservación de la energía a un proceso en estado estacionario se puede expresar con la ecuación [20].

$$U_1 + P_1 \cdot v_1 + \frac{u_1^2}{2} + z_1 \cdot g + Q = U_2 + P_2 \cdot v_2 + \frac{u_2^2}{2} + z_2 \cdot g + W \quad [20]$$

Donde:

- Sufijos 1 y 2: Puntos de entrada y salida respectivamente
- Q: Calor transferido a través de los límites del sistema (positivo si entra y negativo si sale), J/kg
- W: Trabajo realizado por el sistema (positivo si entra y negativo si sale), J/kg
- U: Energía interna, J/kg
- P: Presión de la corriente, Pa
- v: Volumen por unidad de masa, m<sup>3</sup>/kg
- u<sup>2</sup>/2: Término de energía cinética, J/kg
- z·g: Término de energía potencial, J/kg

En procesos químicos es habitual que los términos de energía cinética y potencial sean despreciables respecto al resto de términos. Asimismo, para simplificar la expresión, se emplea el término de la entalpía, ecuación [21]. La entalpía se trata de una función de la temperatura y de la presión, y se expresa en J/kg.

$$H = U + P \cdot v \quad [21]$$

Despreciando dichos términos, el balance de energía se simplificaría a la ecuación [22].

$$H_2 - H_1 = Q - W \quad [22]$$

La variación de entalpía entre las corrientes de entrada y salida de una unidad se calcula mediante la ecuación [23]

$$\Delta H = \sum_e m_i \cdot C_{p,i} \cdot (T_i - T_{ref}) - \sum_s m_i \cdot C_{p,i} \cdot (T_i - T_{ref}) \quad [23]$$

Donde:

- $m_i$ : Flujo másico de la corriente  $i$ , kg/h
- $C_{p,i}$ : Calor específico medio de la corriente, J/(kg·°C)
- $T_i$ : Temperatura de la corriente  $i$ , °C
- $T_{ref}$ : Temperatura de referencia, se tomará de 0°C

Los datos requeridos para la realización de los balances de energía, calores específicos de las corrientes y calores latentes de vaporización, se obtuvieron de Aspen HYSYS.

Por otra parte, la variación de entalpía cuando existe un cambio de fase se obtiene empleado el calor de vaporización, que es la cantidad de calor que se absorbe durante el cambio de estado de una corriente, como se muestra en la ecuación [24].

$$\Delta H = \sum_e m_i \cdot C_{p,i} \cdot (T_i - T_{ref}) - \sum_s m_i \cdot C_{p,i} \cdot (T_i - T_{ref}) + \lambda_i \cdot m_i \quad [24]$$

Donde:

- $\lambda_i$ : Calor de vaporización medio para el cambio de estado, J/kg

En el siguiente apartado se llevarán a cabo los balances de energía a las diferentes unidades del proceso. Cabe mencionar que únicamente se incluirán en este apartado los balances de energía entálpicos. Por tanto, el cálculo de la potencia de las bombas se presentará en el *Documento V. Presupuesto*.

## 2.2 Balances de energía por equipos

### 2.2.1 Tanques de mezcla

A los tanques de mezcla entran varias corrientes a distintas condiciones, y sale una única corriente. Se realiza el balance de energía a los tanques de mezcla con el objetivo de conocer la temperatura de la corriente de salida. En este equipo no entra ni calor ni trabajo, por lo que la ecuación del balance de energía es [25].

$$\sum m_e \cdot C_{p,e} \cdot (T_e - T_{ref}) = m_s \cdot C_{p,s} \cdot (T_s - T_{ref}) \quad [25]$$

Donde  $e$  son las corrientes de entrada al tanque y  $s$ , la corriente de salida.

#### 2.2.1.1 TM-101

En la Tabla 26 se muestra el balance de energía al tanque de mezcla TM-101.

Tabla 26. Balance de energía al tanque de mezcla TM-101. Fuente: Elaboración propia

TM-101					
Parámetro	Entradas				Salidas
	2	4	11	16	5
$m$ , kg/h	536,41	1156,20	10756,48	144,42	12593,51
$C_p$ , kJ/kg·°C	1,52	2,06	1,56	2,45	1,62
$T$ , °C	25,00	25,00	35,38	152,20	35,70
Energía, kW	5,66	16,52	165,16	14,97	202,31
<b>Q, kW</b>			<b>0,00</b>		

## 2.2.1.2 TM-301

En la Tabla 27 se muestra el balance de energía al tanque de mezcla TM-301.

Tabla 27. Balance de energía al tanque de mezcla TM-301. Fuente: Elaboración propia

TM-301							
Parámetro	Entradas					Salida	
	37	40	43	44	45	46	47
m, kg/h	4105,92	5818,33	1136,36	2272,73	1136,36	681,82	15151,52
C <sub>p</sub> , kJ/kg·°C	2,64	4,04	3,84	0,5	0,6	0,92	2,72
T, °C	50	50	50	25	25	25	48,52
Energía, kW	150,76	326,56	60,67	7,89	4,73	4,36	554,97
<b>Q, kW</b>	<b>0,00</b>						

## 2.2.2 Intercambiadores de calor

Para los intercambiadores de calor es necesario calcular la cantidad de calor que hay que aportar o retirar. El cálculo del calor para los intercambiadores en los que no se produce un cambio de fase se realiza con la ecuación [26].

$$Q = m_e \cdot Cp_e \cdot T_e - m_s \cdot Cp_s \cdot T_s \quad [26]$$

## 2.2.2.1 E-101

En el intercambiador de calor E-101 se realiza el acondicionamiento de las materias primas, corriente 6, para la entrada a los reactores R-101 A/B. Esta corriente, compuesta principalmente por benceno y dodeceno, se calienta desde 35°C hasta 125°C, manteniéndose en fase líquida, sin incluir ningún cambio de fase. En la Tabla 28 se muestra el cálculo del calor aportado al intercambiador E-101.

Tabla 28. Balance de energía al intercambiador de calor E.101. Fuente: Elaboración propia

E-101		
Parámetro	Entrada	Salida
	6	7
m, kg/h	12593,51	12593,51
C <sub>p</sub> , kJ/kg·°C	1,62	2,04
T, °C	35,70	125,00
Energía, kW	202,06	892,11
<b>Q, kW</b>	<b>690,05</b>	

## 2.2.2.2 E-104

El intercambiador de calor E-104 se encarga de acondicionar la salida de colas de la columna T-101, corriente 12, para alimentar la columna T-102. Esta corriente, compuesta por dodeceno y docecilbenceno, se necesita enfriar desde 248,60°C hasta 216,04°C, y no implica ningún cambio de fase. La Tabla 29 muestra el cálculo del calor a retirar en este intercambiador.

Tabla 29. Balance de energía al intercambiador de calor E-104. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	E-104	
	Entrada	Salida
	12	13
m, kg/h	1837,03	1837,03
Cp, kJ/kg·°C	2,63	2,51
T, °C	248,60	216,04
Energía, kW	333,76	276,64
<b>Q, kW</b>	<b>-57,13</b>	

## 2.2.2.3 E-105

El intercambiador de calor E-105 se utiliza para condensar la corriente de salida superior de la columna de destilación T-102, corriente 14. Esta corriente entra al intercambiador a 230,91°C y fase vapor, y sale a 153,12°C y fase líquida. Como tiene lugar un cambio de fase, el balance de energía a este intercambiador seguirá la ecuación [27]. Donde  $\lambda$  es el calor latente de la corriente y los subíndices, el número de la corriente definidos en el diagrama de flujo, disponible en el *Documento II. Planos*.

$$m_{14} \cdot Cp_{14} \cdot T_{14} + m_{14} \cdot \lambda_{14} + Q = m_{15} \cdot Cp_{15} \cdot T_{15} \quad [27]$$

Se presenta el balance de energía a este intercambiador de calor en la Tabla 30.

Tabla 30. Balance de energía al intercambiador de calor R-105. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	E-105	
	Entrada	Salida
	14	15
m, kg/h	144,42	144,42
Cp, kJ/kg·°C	2,34	2,46
$\lambda$ , kJ/kg	421,51	
T, °C	230,91	152,20
Energía, kW	38,60	15,01
<b>Q, kW</b>	<b>-23,59</b>	

## 2.2.2.4 E-201

En el intercambiador de calor E-201 se acondiciona la corriente de salida de colas de la columna T-102, corriente 18, para entrar al reactor R-201. Esta corriente se enfría desde 238,40°C hasta 40°C, la temperatura de operación del reactor. No se produce ningún cambio de fase en este equipo. En la Tabla 31 se presenta el cálculo del calor que se necesita retirar este equipo.

Tabla 31. Balance de energía al intercambiador de calor E-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	E-201	
	Entrada	Salida
	18	19
m, kg/h	1692,61	1692,61
Cp, kJ/kg·°C	2,65	1,91
T, °C	238,40	40,00
Energía, kW	296,78	35,90
<b>Q, kW</b>	<b>-260,88</b>	

## 2.2.2.5 E-202

El intercambiador E-202 se encarga de acondicionar la corriente de entrada al proceso de óleum 22%, corriente 21, para la entrada al reactor R-201. Por tanto, este intercambiador calentará la corriente desde las condiciones de almacenamiento, 25°C, hasta la temperatura de operación del reactor, 40°C. En la Tabla 32 se muestra el cálculo del calor a aportar a este intercambiador.

Tabla 32. Balance de energía al intercambiador de calor E-202. Fuente: Elaboración propia

E-202		
Parámetro	Entrada	Salida
	21	22
m, kg/h	2524,19	2524,19
Cp, kJ/kg·°C	3,08	3,05
T, °C	25,00	40,00
Energía, kW	53,93	85,50
<b>Q, kW</b>	<b>31,57</b>	

## 2.2.2.6 E-203

En el intercambiador de calor E-203 se calienta la alimentación de agua al proceso, corriente 26, para utilizarla como disolvente en el decantador D-201 y para añadir al tanque de mezcla TM-301. Este equipo calienta la corriente de agua desde 25°C hasta 40°C, sin que se produzca ningún cambio de fase. En la Tabla 33 se presenta el cálculo del calor a aportar al equipo.

Tabla 33. Balance de energía al intercambiador de calor E-203. Fuente: Elaboración propia

E-203		
Parámetro	Entrada	Salida
	26	27
m, kg/h	5998,48	5998,48
Cp, kJ/kg·°C	4,04	4,04
T, °C	25,00	40,00
Energía, kW	168,43	269,33
<b>Q, kW</b>	<b>100,91</b>	

## 2.2.2.7 E-301

El intercambiador de calor E-301 se encarga de acondicionar la corriente de alimentación al reactor R-301. La corriente 31, compuesta por la fase orgánica del decantador, se necesita calentar desde 44,31°C hasta 50°C, temperatura de operación del reactor. El cálculo del calor a aportar en este intercambiador se muestra en la Tabla 34.

Tabla 34. Balance de energía al intercambiador de calor E-301. Fuente: Elaboración propia

E-301		
Parámetro	Entrada	Salida
	31	32
m, kg/h	2275,63	2275,63
Cp, kJ/kg·°C	0,80	0,99
T, °C	44,31	50,00
Energía, kW	22,42	31,33
<b>Q, kW</b>	<b>8,91</b>	

## 2.2.2.8 E-302

El intercambiador de calor E-302 se encarga de acondicionar la corriente de alimentación de NaOH, corriente 34, para alimentarla al reactor R-301. Esta corriente se calentará desde las condiciones de almacenamiento, 25°C, hasta la temperatura de operación del reactor, 50°C. El cálculo del calor que se necesita aportar al intercambiador se presenta en la Tabla 35.

Tabla 35. Balance de energía al intercambiador de calor E-302. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	E-302	
	Entrada	Salida
	34	35
m, kg/h	1830,29	1830,29
Cp, kJ/kg.°C	9,19	8,99
T, °C	25,00	50,00
Energía, kW	116,87	228,62
<b>Q, kW</b>	<b>111,75</b>	

## 2.2.2.9 E-303

En el intercambiador de calor E-303 se acondiciona la corriente de agua 39, para entrar al reactor R-301. Como ya se realizó un previo calentamiento de esta corriente para las condiciones de entrada al decantador D-201, solamente se calentará desde los 40°C hasta 50°C. En la Tabla 36 se muestran los cálculos del calor a aportar.

Tabla 36. Balance de energía al intercambiador de calor E-303. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	E-303	
	Entrada	Salida
	39	40
m, kg/h	5818,33	5818,33
Cp, kJ/kg.°C	4,04	4,04
T, °C	40,00	50,00
Energía, kW	261,13	326,56
<b>Q, kW</b>	<b>65,43</b>	

## 2.2.2.10 E-304

En el intercambiador de calor E-304 se calienta la corriente 41, la alimentación de dietanolamina de coco al tanque de mezcla TM-301. Esta corriente se calienta desde los 25°C, temperatura a la que se encuentra almacenado, hasta los 50°C. La Tabla 37 presenta el cálculo del calor aportado en ese intercambiador.

Tabla 37. Balance de energía al intercambiador de calor E-304. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	E-304	
	Entrada	Salida
	42	43
m, kg/h	1136,36	1136,36
Cp, kJ/kg.°C	3,84	3,84
T, °C	25,00	50,00
Energía, kW	30,33	60,67
<b>Q, kW</b>	<b>30,33</b>	

### 2.2.3 Reactores

#### 2.2.3.1 R-101 A/B

El balance de energía a los reactores R-101 A/B se explica de manera detallada en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte B* en el apartado 12. *Balances de energía*. Cabe destacar que se trata de una reacción exotérmica y de un reactor que opera de manera adiabática. De esta forma, la corriente de salida del reactor tendrá mayor temperatura que la de entrada y, por tanto, el objetivo del balance de energía al reactor R-101 A/B es determinar esta temperatura de salida. En la Tabla 38 se muestra un resumen del balance de energía a este reactor.

Tabla 38. Balance de energía a los reactores R-101 A/B. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$T_0, ^\circ\text{C}$	125
$\Delta H_r, ^\circ, \text{kJ/kmol}$	-95977
$T_R, ^\circ\text{C}$	25
$\sum \theta_i \cdot \int_{T_{i0}}^T C_{p_i} dT, \text{kJ/kmol}$	92924,53
$\Delta H_R, \text{kJ/kmol}$	-97815,30
$X_D$	0,95
$T, ^\circ\text{C}$	147,17

#### 2.2.3.2 R-201

El balance de energía al reactor R-201 se detalla en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte D*, en el apartado 8. *Balance de energía*. Se trata de un reactor isotérmico en el que se lleva a cabo una reacción exotérmica, por lo que será necesario retirar el calor mediante una camisa de refrigeración. En la Tabla 39 se muestra un resumen del balance de energía a esta unidad.

Tabla 39. Balances de energía al reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$T, ^\circ\text{C}$	40
$T_R, ^\circ\text{C}$	25
$\Delta H_r, ^\circ, \text{kJ/kmol}$	-21724
$\sum \theta_i \cdot \int_{T_R}^T C_{p_i} dT, \text{kJ/kmol}$	-5494
$\Delta H_r, \text{kJ/kmol}$	-27.219
$F_{DB0}, \text{kmol/h}$	6,87
$X_{DB}$	0,95
$Q, \text{kW}$	-49

#### 2.2.3.3 R-301

El reactor R-201 se encarga de llevar a cabo la reacción de neutralización del ácido dodecibencensulfónico con hidróxido de sodio para obtener dodecibencenosulfonato de sodio y agua, reacción [9]. A su vez, el ácido sulfúrico restante en la mezcla reacciona con el hidróxido de sodio, generando sulfonato de sodio y agua, reacción [10]. Se tratan de dos reacciones exotérmicas, y el reactor opera de manera isotérmica a 50°C. Por tanto, el balance de energía es necesario para conocer la cantidad de calor que se necesita retirar.

El calor generado en las reacciones se calcula con las ecuaciones [28], [29], [30] y [31].

$$Q_r = \sum \Delta H_r \cdot F_{i,0} \cdot X_i \cdot S \quad [28]$$

$$\Delta H_r = \left[ \sum_{i=1}^n n_i \cdot (H_{fi}^{\circ} + H_i) \right]_{\text{productos}} - \left[ \sum_{i=1}^n n_i \cdot (H_{fi}^{\circ} + H_i) \right]_{\text{reactivos}} \quad [29]$$

$$\Delta H_{R^{\circ}} = \sum_{i=1}^n v_i \cdot H_{fi}^{\circ} \text{ producto} - \sum_{i=1}^n v_i \cdot H_{fi}^{\circ} \text{ reactivo} \quad [30]$$

$$H_i = \int_{T_{ref}}^T C_{pi} \cdot dT \quad [31]$$

Se aplican dichas ecuaciones para ambas reacciones químicas, y se presentan los datos en la Tabla 40 y Tabla 41. Cabe destacar que la temperatura de referencia ( $T_{ref}$ ) son  $25^{\circ}\text{C}$  y la temperatura de operación ( $T$ ),  $50^{\circ}\text{C}$ . En ellas se concluye, que el reactor requerirá de un sistema de refrigeración capaz de retirar 125,25 kW.

Tabla 40. Balances de energía al reactor R-301. Fuente: Elaboración propia

	$\Delta H_f^{\circ}, \text{kJ/kmol}$	$v_i$	$\overline{C}_{pi}, \text{kJ/(kmol}\cdot^{\circ}\text{C)}$	$H_i, \text{kJ/kmol}$
<b>Reacción 1</b>				
LABSA	-596224,00	1	522,41	13060,20
NaOH	-426601,00	1	363,74	9093,42
LAS	-800000,00	1	500,00	12500,00
H <sub>2</sub> O	-285840,00	1	72,82	1820,51
<b>Reacción 2</b>				
NaOH	-426601,00	2	278,60	6965,07
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	-735200,00	1	318,62	7965,48
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	-1033620,00	1	458,46	11461,54
H <sub>2</sub> O	-285840,00	2	72,82	1820,51

Tabla 41. Balances de energía al reactor R-301. Fuente: Elaboración propia

Parámetros	Reacción 1	Reacción 2
$H_i, \text{kJ/kmol}$	-7833,12	-6793,06
$\Delta H_r, \text{kJ/kmol}$	-70848,10	-23691,79
$F_{i,0}, \text{kmol/h}$	6,52	0,50
$X_i$	0,95	1,00
$Q_r, \text{kW}$	-121,97	-3,28
<b><math>Q_r \text{ total}, \text{kW}</math></b>	<b>-125,25</b>	

## 2.2.4 Válvula

### 2.2.4.1 VLV-101

La válvula VLV-101 se utiliza para mantener el vacío en las columnas de destilación T-101 y T-102, actuando como frontera. La corriente que atraviesa la válvula sufre una reducción de presión, y por tanto, cambia también su temperatura y su fase, por lo que es necesario realizar el balance de energía para conocer las propiedades de la corriente de salida de la válvula.

Al atravesar la válvula, el fluido sufre una expansión rápida, que se puede considerar adiabática. De esta manera, no hay intercambio de calor y, además, la energía cinética y potencial es despreciable. Por tanto, el balance de energía se reduce a un proceso isoentálpico.

$$m_e \cdot Cp_e \cdot T_e = m_s \cdot (Cp_s \cdot T_s + \Psi_s \cdot \lambda) \quad [32]$$

Donde:

- $\psi_v$ : Fracción de vapor de la corriente
- $\lambda$ : Calor latente, kJ/kg

En la Tabla 42 se muestran los resultados de este balance de energía, determinando la temperatura de salida de la válvula y su fracción de vapor.

Tabla 42. Balance de energía a la válvula VLV-101. Fuente: Elaboración propia

VLV-101		
Parámetro	Entrada	Salida
	8	9
T (°C)	147,17	36,47
Cp (kJ/(kg·°C))	2,17	1,27
$\psi_v$		0,56
$\lambda$ (kJ/kg)		487,66
h (kJ/kg)	319,29	319,29
<b>Q, kW</b>		0,00

## 2.2.5 Columnas de destilación

### 2.2.5.1 T-101

La columna de destilación T-101 cuenta con una caldera y un condensador total, que se encarga de condensar la corriente gaseosa que sale como destilado y que entra como reflujo en la sección superior de la columna. El balance de energía a la columna se muestra en la Ecuación [33], donde los subíndices indican la corriente de alimentación (F), la de destilado (D) y la de colas (B).

$$m_F \cdot H_F + Q_{caldera} + Q_{condensador} = m_D \cdot h_D + m_B \cdot h_B \quad [33]$$

La corriente de alimentación a la columna se encuentra parcialmente vaporizada. por lo que la entalpía se obtiene teniendo en cuenta el calor de vaporización parcial, empleando la ecuación [24].

Se realiza el balance al condensador E-102 empleando la Ecuación [34] con el objetivo de obtener el calor disipado por el condensador, que al ser una corriente de salida adquiere un signo negativo.

$$V_1 \cdot H_1 + Q_{condensador} = L_o \cdot h_o + m_D \cdot h_D \quad [34]$$

Donde los subíndices se corresponden con la corriente de vapor de salida por cabezas (1), la corriente de destilado que entra como reflujo (o) y el destilado que sale como líquido de la columna (D).

Una vez obtenido el flujo de calor correspondiente al condensador, aplicando la Ecuación [34], se puede realizar el balance de energía a la columna y obtener el calor necesario en la caldera. En la Tabla 43 se muestran los datos empleados en el balance y en la Tabla 44 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 43. Balance de energía a la columna T-101. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	T-101		
	Entrada	Salidas	
	9	10	12
m, kg/h	12593,51	10756,48	1837,03
L/V ( $\psi v$ )	0,56	0,00	0,00
$C_p$ (kJ/kg $^{\circ}C$ )	1,27	1,63	2,63
$\lambda$ (kJ/kg)	581,32	487,66	
T, $^{\circ}C$	36,47	35,38	248,60
Energía, kW	1116,95	172,00	333,76

Tabla 44. Resultados del balance de energía a la columna T-101. Fuente: Elaboración propia.

E-102	E-103
$Q_{condensador}(kW)$	$Q_{caldera}(kW)$
-743,73	132,55

### 2.2.5.2 T-102

Los balances de energía a la columna T-102 se explican de manera detallada en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte C*. Se trata de una columna de agotamiento, por lo que al no existir una corriente de reflujo en cabezas solo contará con una caldera. Esta caldera se encarga de vaporizar la corriente de colas que entrará de nuevo a la columna en la sección inferior, por lo que el objetivo del balance de energía será obtener la cantidad de calor necesaria. En la Tabla 45 se muestra un resumen con los resultados obtenidos de este balance.

Tabla 45. Balance de energía a la columna T-102. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	T-102		
	Entrada	Salidas	
	13	14	17
n, kmol/h	7,57	0,70	6,87
h, kJ/kmol	135802,06		154699,56
H, kJ/kmol		186903,74	
T, $^{\circ}C$	216,04	230,91	238,40
Energía, kW	285,52	36,34	295,17
<b>Q, kW (E106)</b>		<b>45,99</b>	

## 2.2.6 Decantador

### 2.2.6.1 D-101

El decantador D-101 se encarga de separar el ácido sulfúrico de la mezcla de LABSA utilizando agua. Sin embargo, al emplear agua como disolvente, esta hará reaccionar el  $SO_3$  presente para dar ácido sulfúrico, según la reacción [8]. Por tanto, para realizar el balance de energía al decantador, habrá que tener en cuenta el calor generado por la reacción, que se calculará de la misma manera que se explicó para el reactor. Cabe destacar que la temperatura de referencia ( $T_{ref}$ ) son  $25^{\circ}C$  y la temperatura de operación (T),  $40^{\circ}C$ . Se muestran los cálculos del calor de reacción en la Tabla 46 y Tabla 47.

Tabla 46. Datos de la reacción en el decantador D-101. Fuente: Elaboración propia

	$\Delta H_r^\circ, \text{kJ/kmol}$	$v_i$	$\bar{C}_{p_i}, \text{kJ/(kmol}\cdot^\circ\text{C)}$	$H_i, \text{kJ/kmol}$
SO <sub>3</sub>	-396000,00	1	189,11	2836,70
H <sub>2</sub> O	-241814,00	1	72,80	1092,05
H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	-735200,00	1	319,73	4795,95

Tabla 47. Cálculo del calor de reacción en el decantador D-101. Fuente: Elaboración propia

Parámetros	Valor
$H_i, \text{kJ/kmol}$	867,20
$\Delta H_r, \text{kJ/kmol}$	-96518,80
$F_{i,0}, \text{kmol/h}$	0,41
$X_i$	1,00
$Q_r, \text{kW}$	-11,05

A partir del calor de reacción, se comprueba el balance de energía al decantador D-101 siguiendo la ecuación [22] en la Tabla 48.

Tabla 48. Balance de energía al decantador D-101. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	D-201			
	Entrada		Salida	
	24	28	29	30
$m, \text{kg/h}$	4216,80	180,15	2121,33	2275,63
$C_p, \text{kJ/kg}\cdot^\circ\text{C}$	2,38	4,04	3,29	0,80
$T, ^\circ\text{C}$		40,00		44,31
Energía, kW	111,36	8,09	85,98	22,42
Calor de reacción, kW			-11,05	
<b>Q, kW</b>			<b>0,00</b>	

### 3 Bibliografía

1. SINNOTT, Ray; TOWLER, Gavin y COSTA LÓPEZ, José. *Diseño en ingeniería química*. 1.<sup>a</sup> ed. Barcelona: Reverté, 2012. ISBN 84-291-9504-1.
2. NIIR BOARD. *Handbook on soaps, detergents & acid slurry*. 3.<sup>a</sup> ed. Delhi: Asia Pacific Business Press, 2013. ISBN 978-81-7833-163-1.
3. DE GROOT, W. Herman. *Sulphonation technology in the detergent industry*. 1.<sup>a</sup> ed. New York: Marcel Dekker, 1991. ISBN 978-0824784499.
4. PETERS, Max S. y TIMMERHAUS, Klaus D. *Plant design and economics for chemical engineers*. 4.<sup>a</sup> ed. New York: McGraw-Hill, 1991. ISBN 0-07-049613-6.
5. MASTERTON, William L.; HURLEY, Cecile N. y NETH, Edward J. *Chemistry: principles and reactions*. 7.<sup>a</sup> ed. Belmont, CA: Brooks/Cole, 2012. ISBN 978-0-538-73536-0.

ANEXO II.  
CÁLCULOS  
JUSTIFICATIVOS

## ÍNDICE

**PARTE A: Consideraciones generales**

**PARTE B: Reactores R-101 A/B**

**PARTE C: Columna de destilación T-102**

**PARTE D: Reactor R-201**

PARTE A:  
CONSIDERACIONES  
GENERALES

## Índice

A)	Dimensionamiento básico .....	2
B)	Diseño mecánico .....	2
1	Introducción.....	2
2	Selección del material.....	2
3	Presión de diseño .....	6
4	Temperatura de diseño.....	6
5	Espesor de la carcasa .....	7
6	Selección y dimensionamiento de los cabezales .....	8
7	Análisis de cargas .....	9
7.1	Carga por peso .....	10
7.2	Carga por viento.....	10
7.3	Carga sísmica .....	11
8	Análisis de esfuerzos .....	11
8.1	Esfuerzos primarios .....	12
8.2	Esfuerzos principales .....	12
8.3	Intensidad de esfuerzo permisible.....	13
8.4	Estabilidad elástica .....	13
9	Soporte del recipiente .....	14
10	Aberturas y conexiones .....	15
11	Diseño válvula de alivio .....	16
12	Bibliografía.....	19

## A) Dimensionamiento básico

En el *Anexo II. Cálculos Justificativos*, se recoge el diseño preliminar de varios de los equipos principales del proceso de producción de detergente tipo LABS. Estos equipos son los reactores R-101 A/B, recogido en la Parte B del anexo, la columna de destilación T-102, en la Parte C, y el reactor R-201, en la Parte D.

En los reactores R-101 A/B tiene lugar la primera reacción del proceso, la reacción de alquilación de benceno con dodeceno para obtener dodecilbenceno. El dimensionamiento básico de esta unidad se realiza basándose en la cinética química de esta reacción.

Asimismo, se diseña la columna de destilación T-102, segunda columna de la secuencia de separación, encargada de separar el dodecilbenceno del dodeceno no reaccionado. Es una operación de transferencia de materia regida por el equilibrio, por lo que su diseño se basa en la resolución de las ecuaciones MESH (Materia, equilibrio, sumatorio de fracciones molares y entalpía).

A su vez, el reactor R-201 lleva a cabo la reacción de sulfonación del dodecilbenceno con óleum, obteniendo como producto el ácido dodecilbencensulfónico. Para realizar el dimensionamiento de esta unidad también será necesario basarse en los datos cinéticos de esta reacción química.

## B) Diseño mecánico

### 1 Introducción

En el presente apartado del Anexo II: Cálculos Justificativos, se realizará una explicación de los aspectos a tener en cuenta para la realización del diseño mecánico y selección del material de los reactores R-101 A/B, la columna de destilación T-102 y el reactor R-201.

Estos equipos se considerarán como recipientes a presión, por lo que para la realización del diseño se seguirá la norma *ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII, Rules for the Construction of Pressure Vessels* (ASME BPV Code Sec. VIII).

### 2 Selección del material

La selección del material de construcción es una decisión importante para el diseño de los reactores y de la columna, para la que hay que tener en cuenta los siguientes aspectos fundamentales: el coste, la compatibilidad con los fluidos contenidos, la resistencia a la corrosión y las condiciones de operación. Para la correcta selección del material se aplicará la metodología Ashby (1).

Los recipientes a presión se pueden diseñar, por seguridad, siguiendo dos criterios:

- *Yield before break* o deformación antes de ruptura, el criterio más usado para el diseño de recipientes pequeños.
- *Leak before break* o vertido antes de la ruptura, el método empleado para equipos de mayor tamaño.

La metodología Ashby se basa en seleccionar materiales optimizando las propiedades según el objetivo de diseño. Para la selección del material de estos equipos siguiendo la metodología Ashby, el primer paso será establecer los requerimientos de diseño mostrados en la Tabla 1, Tabla 2 y Tabla 3.

Tabla 1. Requerimientos de diseño para los reactores R-101 A/B. Fuente: (1)

<b>Función</b>	Contener la presión de forma segura
<b>Limitaciones</b>	Diámetro de la carcasa Limitación económica Condiciones de temperatura y presión
<b>Objetivo</b>	Maximizar la seguridad mediante el criterio <i>Leak before break</i>
<b>Variables libres</b>	Material de construcción

Tabla 2. Requerimientos de diseño para la columna T-102. Fuente: (1)

<b>Función</b>	Contener la presión de forma segura
<b>Limitaciones</b>	Presión de vacío Diámetro de la carcasa Coste del equipo Temperatura de diseño
<b>Objetivo</b>	Maximizar la seguridad según el criterio <i>Leak before break</i>
<b>Variables libres</b>	Material de construcción

Tabla 3. Requerimientos de diseño para el reactor R-201. Fuente: (1)

<b>Función</b>	Recipiente a presión
<b>Limitaciones</b>	Condiciones de temperatura y presión de diseño Diámetro de la carcasa Minimizar el coste
<b>Objetivo</b>	Maximizar la seguridad usando el criterio <i>Leak before break</i>
<b>Variables libres</b>	Selección del material

Como se están diseñando equipos con un tamaño considerable, se empleará el criterio de *Leak before break*. En este caso, la seguridad puede garantizarse si una grieta, suficientemente grande como para atravesar las superficies interna y externa del recipiente, se mantiene estable. De forma que la fuga causada por la grieta podrá ser detectada a tiempo. Esto se consigue si se cumple la ecuación [1].

$$P \leq \frac{4 \cdot C^2}{\pi \cdot R} \cdot \left( \frac{K_{1C}^2}{\sigma_f} \right) \quad [1]$$

Por tanto, si se maximiza el término entre paréntesis de la ecuación [1], se podrá operar de forma segura a mayor presión. Por tanto, ese término será el índice de material a optimizar ( $M_1$ ), ecuación [2].

$$M_1 = \left( \frac{K_{1C}^2}{\sigma_f} \right) \quad [2]$$

Donde:

- P: Presión de operación (Pa)
- C: Constante, cuyo valor es próximo a la unidad

- R: Radio del recipiente a presión (m)
- $K_{1C}$ : Tenacidad a la fractura por deformación plana ( $\text{Pa} \cdot \text{m}^{1/2}$ )
- $\sigma_f$ : Límite elástico del material (Pa)
- $M_1$ : Índice del material ( $\text{Pa} \cdot \text{m}$ )

La segunda limitación a considerar es la de carácter económica, que busca minimizar el espesor del recipiente, reduciendo así la masa del material necesaria. Para ello, se seleccionan materiales con un elevado límite elástico, definiendo así el índice de material  $M_2$  con la ecuación [3].

$$M_2 = \sigma_f \quad [3]$$

Una vez definidos los índices de materiales, con el gráfico de la metodología Ashby que emplea estos índices, se determina qué materiales son más adecuados para el diseño de estos equipos, Figura 1. Se traza una línea paralela a la línea guía del índice  $M_1$  y una línea vertical para el índice  $M_2$ . A partir de ellas, se determinan los materiales óptimos para este diseño, que serían las aleaciones de níquel (*Ni alloys*), los aceros inoxidable (*Stainless steels*) y los aceros de baja aleación (*Low alloy steels*).

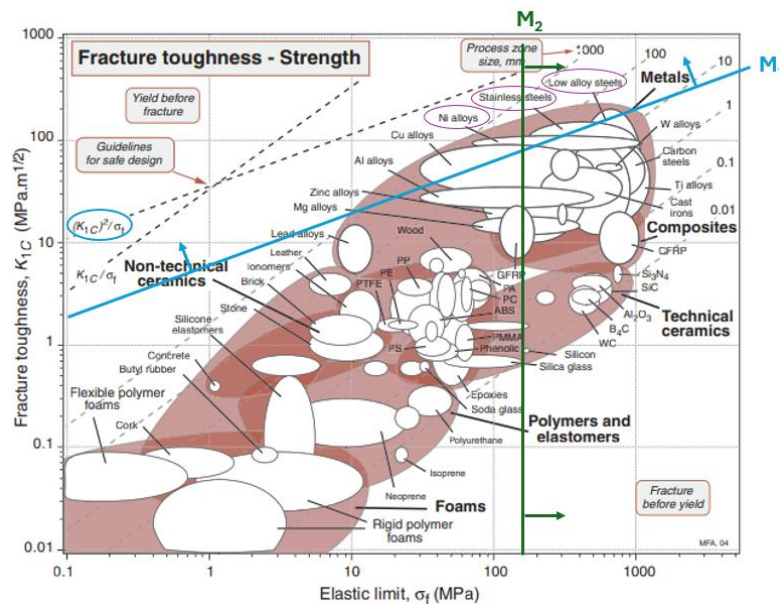


Figura 1. Diagrama de lóbulos, Tenacidad a la fractura vs Límite elástico. Fuente: (1)

Entre los materiales seleccionados anteriormente, se tendrá en cuenta el criterio económico. En la Figura 2 se muestra un diagrama con los precios de los materiales por unidad de masa, en él, se puede apreciar que, entre los materiales óptimos, los más barato son los aceros de baja aleación, luego aceros inoxidable y por último las aleaciones de níquel.

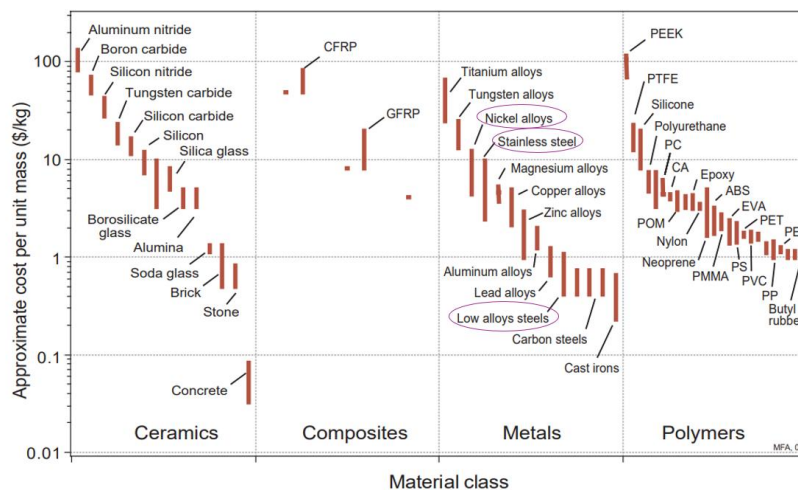


Figura 2. Coste de diferentes materiales por unidad de masa. Fuente: (1)

Por otro lado, es de gran importancia considerar la compatibilidad química del material seleccionado con los compuestos presentes en el reactor. En la Tabla 4 se muestra la compatibilidad química de varios metales con los compuestos presentes en los reactores R-101 A/B, la columna de destilación T-102 y el reactor R-201, y en la Tabla 5 se muestra la notación empleada. Cabe mencionar que no se encontró en dicha bibliografía la compatibilidad química del dodeceno, pero se asumirá la del isodecano, puesto que, al tratarse de un hidrocarburo de cadena larga, presentan propiedades muy similares. Asimismo, al regenerar el lecho del reactor R-101 A/B con aire, se comprobará también la compatibilidad química de los metales con el oxígeno y el nitrógeno.

Tabla 4. Compatibilidad química del material con los compuestos del reactor. Fuente: (2)

Compuesto Químico	Aluminio	Acero al carbono	Hierro Fundido/Dúctil	Acero Inoxidable 304	Acero Inoxidable 316
Dodeceno	B	-	B	B	-
Benceno	B	A	A	B	B
Dodecibenceno	A	-	A	A	-
Oxígeno	A	B	B	A	A
Nitrógeno	A	-	A	A	A
Óleum (22%)	B	-	-	B	B
Ácido dodecibencensulfónico	D	-	D	B	B

Tabla 5. Leyenda de la tabla de compatibilidad química. Fuente:(2)

Notación	Significado
A	Excelente
B	Bueno
C	Pobre
D	No recomendable
-	Sin datos

También es importante tener en cuenta la resistencia a la corrosión, así como a las condiciones de operación de cada equipo. Es por ello que finalmente, se empleará acero inoxidable, puesto que es un material resistente a la corrosión, a las altas temperatura y presiones. Además, es muy duradero y requiere bajo mantenimiento (3). Entre los tipos de acero inoxidable se seleccionará el acero inoxidable 304, puesto que la Tabla 4 garantiza que es compatible con los compuestos presentes en el reactor y resulta más económico que el acero inoxidable 316. Aunque este material tenga un coste mayor que los aceros de baja aleación, a largo plazo resultará más económico, ya que requiere menos mantenimiento y es más duradero.

Para concluir, el material seleccionado para los reactores R-101 A/B, R-201 y para la columna de destilación T-102 será el acero inoxidable 304.

### 3 Presión de diseño

Un recipiente se debe diseñar para poder soportar la máxima presión a la que pueda estar sometido durante su vida útil. Para los recipientes bajo presión interna, la presión de diseño o de trabajo permisible máxima se toma como la presión a la que se ajusta el dispositivo de descarga. El código seleccionado recomienda establecer como presión de diseño el mayor de los valores calculados con las ecuaciones [4] y [5]. (4)

$$P_{diseño\ 1} = 1,1 \cdot P_{operación} \quad [4]$$

$$P_{diseño\ 2} (psi) = 25\ psi + P_{operación}(psi) \quad [5]$$

### 4 Temperatura de diseño

Como la resistencia de los metales disminuye al aumentar la temperatura, el esfuerzo permisible máximo depende de la temperatura del material. Según el Código ASME BPV, la temperatura máxima de diseño, usada para evaluar el esfuerzo permisible máximo, se debe corresponder a la temperatura máxima de trabajo del material, incluyendo un margen para cualquier incertidumbre en la predicción de la temperatura de la pared del recipiente (4).

Para calcular la temperatura de diseño, se sobredimensiona la temperatura máxima de operación, sumándole 50°F, como se muestra en la ecuación [6].

$$T_{diseño} = T_{máx} + 50^{\circ}F \quad [6]$$

## 5 Espesor de la carcasa

Según el Código ASME BPV Sec. VIII Div. 1 existe un espesor mínimo que todos los recipientes a presión deben tener para poder soportar las cargas a las que puedan estar sometidos. Este código establece que el espesor de un recipiente a presión siempre debe superar 1,5 mm, sin tener en cuenta la corrosión y sin importar las dimensiones del recipiente.

En cuanto al espesor debido a la corrosión, se establece un aumento de 2 mm para fluidos poco corrosivos y de 4 mm para los casos de corrosión severa. Además, como guía general, el espesor de cualquier recipiente a presión nunca debe de ser menor que los valores presentes en la Tabla 6, donde se incluye el valor del espesor por corrosión de 2 mm (4).

Tabla 6. Espesores mínimos para recipientes a presión. Fuente:(4)

Diámetro del recipiente (m)	Espesor mínimo (mm)
1	5
1 a 2	7
2 a 2,5	9
2,5 a 3	10
3 a 3,5	12

Para recipientes cilíndricos, el espesor mínimo requerido para resistir la presión interna será el mayor de los espesores de la sección radial y de la longitudinal. Según el Código ASME BPV, se calculan respectivamente mediante las ecuaciones [7] y [8].

$$t_{radial} = \frac{P_i \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 1,2 \cdot P_i} \quad [7]$$

$$t_{longitudinal} = \frac{P_i \cdot D_i}{4 \cdot S \cdot E + 0,8 \cdot P_i} \quad [8]$$

Donde:

- $t_{radial}$ : Espesor mínimo de carcasa para tensión radial (m)
- $t_{longitudinal}$ : Espesor mínimo de carcasa para tensión longitudinal (m)
- $P_i$ : Presión interna de diseño (MPa)
- $D_i$ : Diámetro interno del recipiente (m)
- $S$ : Esfuerzo máximo permisible (MPa)
- $E$ : Eficiencia de unión soldada

El esfuerzo máximo permisible es un parámetro que depende tanto de la temperatura como del material seleccionado. Se buscará en la Figura 3 el valor del esfuerzo máximo permisible para el acero inoxidable 18 Cr, 8 Ni (Grado 304) a la temperatura tabulada siguiente a la de diseño de cada equipo.

Material	Grado	Resistencia a la tracción min. (ksi)	Resistencia a la fluencia min. (ksi)	Temperatura máxima (°F)	Esfuerzo máximo permisible a la temperatura (ksi = 1000 psi)				
					100	300	500	700	900
Acero al carbono	A285 Gr A	45	24	900	12,9	12,9	12,9	11,5	5,9
Acero al carbono apagado	A515 Gr 60	60	32	1000	17,1	17,1	17,1	14,3	5,9
Acero de baja aleación 1/4Cr, 1/2Mo, Si	A387 Gr22	60	30	1200	17,1	16,6	16,6	16,6	13,6
Acero inoxidable 13 Cr	410	65	30	1200	18,6	17,8	17,2	16,2	12,3
Acero inoxidable 18 Cr, 8 Ni	304	75	30	1500	20,0	15,0	12,9	11,7	10,8
Acero inoxidable 18 Cr, 10 Ni, Cb	347	75	30	1500	20,0	17,1	15,0	13,8	13,4
Acero inoxidable 18 Cr, 10 Ni, Ti	321	75	30	1500	20,0	16,5	14,3	13,0	12,3
Acero inoxidable 16 Cr, 12 Ni, 2 Mo	316	75	30	1500	20,0	15,6	13,3	12,1	11,5

Figura 3. Valores de esfuerzos máximos permisibles. Fuente:(4)

La eficiencia de unión soldada se selecciona en la Figura 4 y depende del tipo de unión y de la calidad de la soldadura. Para el caso de estos tres equipos, al presentar líquidos inflamables a una temperatura moderadamente elevada, se buscará una eficiencia del 100%, por tanto, se empleará una junta de unión a tope doblemente soldada y con examen radiográfico completo.

Descripción del trabajo	Categoría de la unión	Grado de examen radiográfico		
		Completo	Puntual	Ninguno
Unión a tope doblemente soldada o equivalente	A, B, C, D	1,0	0,85	0,70
Unión a tope, soldadura única con tira de apoyo	A, B, C, D	0,9	0,8	0,65
Unión a tope, soldadura única sin tira de apoyo	A, B, C	NA	NA	0,60
Unión de superposición doblemente rellena completa	A, B, C	NA	NA	0,55
Unión de superposición rellena completa con soldaduras de tapón	B, C	NA	NA	0,50
Unión de superposición rellena completa sin soldaduras de tapón	A, B	NA	NA	0,45

Figura 4. Eficiencia de unión soldada. Fuente:(4)

Finalmente, se selecciona el valor mayor de los dos espesores y se le añade el espesor debido a la corrosión. Es importante comprobar con el valor final del espesor de cada equipo, que sea mayor que el espesor mínimo mostrado en la Tabla 6.

## 6 Selección y dimensionamiento de los cabezales

Los extremos de los recipientes cilíndricos se cierran mediante cabezales. Los cabezales más habituales son los cabezales planos, hemisféricos, elípticos y torisféricos.

Los cabezales planos son los que presentan un menor coste, sin embargo, sus terminaciones no resultan eficientes cuando se trabaja a presiones elevadas, ya que requieren de un elevado espesor, por lo que quedan descartados. A continuación, se valorarán los diferentes tipos de cabezales abombados, mostrados en la Figura 5, donde (a) se corresponde con el cabezal hemisférico, (b) el elíptico y (c) el torisférico.

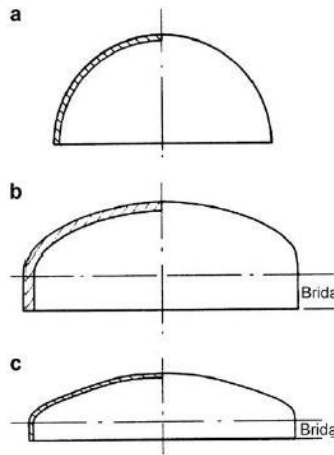


Figura 5. Esquema cabezales abombados. Fuente:(4)

Los cabezales torisféricos son económicos y fáciles de fabricar y son los más utilizados para recipientes con presiones menores a 15 bar. A presiones superiores se usan cabezales elípticos o hemisféricos, siendo el elíptico el más empleado. Las ventajas que ofrece el elíptico respecto al hemisférico es la buena integración estructural con la carcasa y un menor volumen interno.

Asimismo, el cabezal hemisférico presenta otras ventajas, como su alta resistencia mecánica y su bajo espesor requerido, pero su principal desventaja es su elevado coste, tanto en fabricación como en la unión con la carcasa.

Por otro lado, para seleccionar el tipo de cabezal a emplear es importante tener en cuenta el espesor mínimo requerido del cabezal. Según el Código ASME BPV Sec. VIII Div. 1, estos espesores se calculan con las ecuaciones [9], [10] y [11].

$$t_{hemisférico} = \frac{P_i \cdot D_i}{4 \cdot S \cdot E - 0,4 \cdot P_i} \quad [9]$$

$$t_{elíptico} = \frac{P_i \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P_i} \quad [10]$$

$$t_{torisférico} = \frac{0,885 \cdot P_i \cdot R_c}{S \cdot E - 0,1 \cdot P_i} \quad [11]$$

Donde:

- $P_i$ : Presión interna de diseño (MPa)
- $D_i$ : Diámetro interno del recipiente (m)
- $S$ : Esfuerzo máximo permisible (MPa)
- $E$ : Eficiencia de unión soldada
- $t$ : Espesor mínimo del cabezal (m)
- $R_c$ : Radio de la corona (m), se asume igual a  $D_i$

## 7 Análisis de cargas

Los recipientes a presión deben estar diseñados para soportar, además de la carga por presión, otro tipo de cargas. Las principales cargas a las cuales pueden estar sometidos son la carga por el propio peso del recipiente, carga del líquido contenido o hidrostática, carga por viento, carga sísmica y cargas externas impuestas por las tuberías y equipos asociados. (4)

## 7.1 Carga por peso

Para el cálculo de la carga por peso se tiene en cuenta el peso de la carcasa del equipo, accesorios del recipiente, accesorios internos, accesorios externos, aislamiento y el peso del líquido para llenar el recipiente. Para realizar un cálculo preliminar, el peso aproximado de un recipiente cilíndrico con terminaciones abombadas y espesor de pared uniforme se puede emplear la ecuación [12]. (4).

$$W_v = C_w \cdot \pi \cdot \rho_m \cdot D_m \cdot g \cdot (H_v + 0,8 \cdot D_m) \cdot t \cdot 10^{-3} \quad [12]$$

Donde:

- $W_v$ : Peso total de la carcasa (N)
- $C_w$ : Factor que incorpora el peso de las boquillas, agujeros, soportes internos... (1,08 para pocos accesorios y 1,15 para numerosos accesorios internos)
- $\rho_m$ : Densidad del material o recipiente ( $\text{kg/m}^3$ )
- $D_m$ : Diámetro medio del recipiente =  $D_i + t \cdot 10^{-3}$ , (m)
- $g$ : Aceleración de la gravedad,  $9,81 \text{ m/s}^2$
- $H_v$ : Longitud de la sección cilíndrica (m)
- $t$ : Espesor de la pared (mm)

El resto de las cargas por peso dependen del tipo de equipo, de sus accesorios internos y externos, y del fluido contenido. Por lo tanto, se explicarán en sus respectivas partes del *Anexo II. Cálculos justificativos*. La carga total por peso a la que están sometidos los equipos será la suma de dichas cargas.

## 7.2 Carga por viento

Al tratarse de equipos orientados en vertical instalados al aire libre, es importante tener en cuenta las cargas ejercidas por viento. Este tipo de recipiente sometido a cargas por viento se trata como una viga voladiza para el cálculo del momento de flexión, con la ecuación [13]. (4)

$$M_x = \frac{W \cdot x^2}{2} \quad [13]$$

Donde:

- $W$ : Carga por unidad de longitud (N/m)
- $x$ : Distancia medida desde la terminación libre (m)

El momento de flexión varía de forma parabólica desde cero en la parte superior del recipiente hasta el valor máximo en la parte inferior, como se muestra en la Figura 6

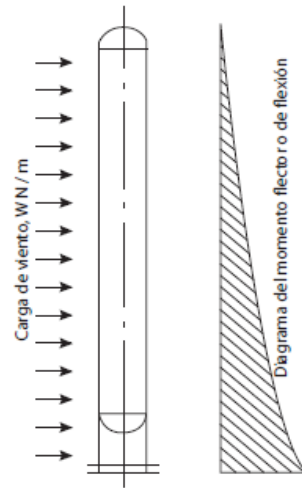


Figura 6. Momento de flexión debido a carga por viento. Fuente: (4)

La presión del viento se puede calcular a partir de la velocidad del viento con la ecuación [14]. Se debe diseñar el reactor para que soporte la máxima velocidad de viento posible en la zona. Para cálculos preliminares se suele usar una velocidad de 160 km/h. (4)

$$P_w = 0,05 \cdot u_w^2 \quad [14]$$

Donde:

- $P_w$ : Presión del viento ( $N/m^2$ )
- $u_w$ : Velocidad del viento (km/h)

La carga por unidad de longitud se obtiene multiplicando la presión de viento por el diámetro efectivo de la columna, como se muestra en la ecuación [15].

$$W = P_w \cdot D_{ef} \quad [15]$$

El diámetro efectivo varía dependiendo del equipo. Para los reactores R-101 A/B y la columna T-102 se calcula a partir de la ecuación [16], y para el reactor R-201 la ecuación [17].

$$D_{ef} = D_i + 2 \cdot t_{carcasa} + 2 \cdot t_{aislante} \quad [16]$$

$$D_{ef} = D_i + 2 \cdot t_{carcasa} + d_{ci} + 2 \cdot t_{camisa} \quad [17]$$

### 7.3 Carga sísmica

Es importante calcular la carga sísmica en zonas donde el riesgo sísmico es elevado. Sin embargo, al situar la planta en Tarragona, zona con una sismicidad muy baja, no será necesario realizar el cálculo de esta carga.

## 8 Análisis de esfuerzos

Una vez se tienen determinadas todas las cargas a las que pueden estar sometidos los equipos, es necesario realizar el análisis de esfuerzos. A partir de este, se determina si los equipos tienen la capacidad de soportar de forma segura las cargas a las que pueden estar sometidos durante su operación.

En este apartado se explicarán los cálculos de los esfuerzos o tensiones a los que está sometido cada equipo, para asegurarse de que no sean mayores que el esfuerzo máximo permisible del material.

### 8.1 Esfuerzos primarios

Primeramente, se calcularán los esfuerzos circunferenciales y longitudinales debidos a la presión, mediante las ecuaciones [18] y [19], respectivamente.

$$\sigma_h = \frac{P \cdot D_i}{2 \cdot t} \quad [18]$$

$$\sigma_L = \frac{P \cdot D_i}{4 \cdot t} \quad [19]$$

Donde:

- P: Presión de diseño (MPa)
- Di: Diámetro interno del reactor (m)
- t: Espesor del reactor (m)
- $\sigma_h$ : Esfuerzo circunferencial (MPa)
- $\sigma_L$ : Esfuerzo longitudinal (MPa)

Se calculará también el esfuerzo directo debido al peso del recipiente, su contenido y accesorios internos a partir de la ecuación [20]. Dicho esfuerzo será de expansión, es decir, positivo, para los puntos situados por debajo del plano de los soportes del recipiente, mientras que para los puntos por encima del soporte será un esfuerzo compresivo, negativo. (4)

$$\sigma_w = \frac{W_{total}}{\pi \cdot (D_i + t) \cdot t} \quad [20]$$

El esfuerzo de flexión resultante de los momentos de flexión a los que está sometido el reactor se obtiene de la ecuación [21].

$$\sigma_b = \pm \frac{M_x}{I_v} \cdot \left( \frac{D_i}{2} + t \right) \quad [21]$$

$$I_v = \frac{\pi}{64} \cdot (D_0^4 - D_i^4) \quad [22]$$

Donde:

- $\sigma_b$ : Esfuerzo de flexión (MPa)
- $M_x$ : Momento total de flexión al plano, calculado en Carga por viento (kN·m)
- $I_v$ : Momento segundo del área del recipiente alrededor del plano de flexión, ecuación [22] ( $m^4$ )
- Di: Diámetro interno del reactor (m)
- D<sub>0</sub>: Diámetro externo del reactor (m)
- t: espesor de la pared (m)

### 8.2 Esfuerzos principales

Se calculará el esfuerzo total longitudinal mediante la ecuación [23], a partir de los esfuerzos calculados en el apartado anterior.

$$\sigma_z = \sigma_L + \sigma_w \pm \sigma_b \quad [23]$$

Donde la expresión positiva muestra el esfuerzo con el viento en contra y la negativa, a favor del viento.

Los esfuerzos principales se calculan a partir de las ecuaciones [24] y [25].

$$\sigma_1 = \frac{1}{2} \cdot \left[ \sigma_h + \sigma_z + \sqrt{(\sigma_h - \sigma_z)^2 + 4 \cdot \tau^2} \right] \quad [24]$$

$$\sigma_2 = \frac{1}{2} \cdot \left[ \sigma_h + \sigma_z - \sqrt{(\sigma_h - \sigma_z)^2 + 4 \cdot \tau^2} \right] \quad [25]$$

El esfuerzo de cizalladura de torsión ( $\tau$ ) normalmente tiene un valor muy pequeño, por lo que en diseños preliminares del recipiente puede ser despreciado. (4)

El tercer esfuerzo principal ( $\sigma_3$ ), en la dirección radial, para recipientes con pared fina generalmente es despreciable, pero se puede tomar como aproximación el valor obtenido con la ecuación [26]. Este esfuerzo es compresivo, y por tanto negativo.

$$\sigma_3 = 0,5 \cdot P \quad [26]$$

### 8.3 Intensidad de esfuerzo permisible

La intensidad máxima de esfuerzo permitida depende de la teoría particular de fallos adoptada. Para este caso, al tratarse de un recipiente a presión, se empleará la teoría de esfuerzo de corte máximo. Según esta teoría, la intensidad máxima de esfuerzo en cualquier punto se toma como el mayor valor de las ecuaciones [27], [28] y [29]. (4)

$$\sigma_1 - \sigma_2 \quad [27]$$

$$\sigma_1 - \sigma_3 \quad [28]$$

$$\sigma_2 - \sigma_3 \quad [29]$$

Para que el espesor de la pared del recipiente sea suficiente, debe cumplirse que la intensidad máxima de esfuerzo permisible no supere el valor del esfuerzo máximo permisible del material (S). (4)

### 8.4 Estabilidad elástica

Para el caso de recipientes sometidos a presión interna, al ser el esfuerzo total longitudinal ( $\sigma_z$ ) debido a las cargas combinadas expansivo, es decir, positivo, el recipiente no puede fallar por inestabilidad elástica, también conocida como pandeo. Por lo tanto, no será necesario hacer dicho cálculo.

En cambio, para el diseño de recipientes sometidos a presión externa, en los cuales el principal modo de fallo es por pandeo, el esfuerzo total longitudinal ( $\sigma_z$ ) será compresivo y por tanto será necesario comprobar que el recipiente no fallará por inestabilidad elástica. Dicho cálculo se llevará a cabo en la *Parte C: Anexo II. Cálculos Justificativos* y *Parte D: Anexo II. Cálculos Justificativos*.

## 9 Soporte del recipiente

La selección del soporte para un recipiente depende de múltiples factores como su tamaño, forma y peso; la temperatura y presión de diseño; la ubicación y disposición del recipiente; y los accesorios internos y externos. (4)

Los soportes se diseñan de forma que puedan soportar todas las cargas a las que puedan estar sometidos. Además, el propio soporte provoca otras cargas en la pared del recipiente. Es de gran importancia comprobar que las concentraciones de esfuerzos resultantes son menores que el esfuerzo máximo permisible.(4)

Existen tres tipos principales de soportes para recipientes a presión, mostrados en la Figura 7. Los soportes de falda se suelen emplear para columnas verticales y altas. Los soportes de silla son más comunes para recipientes cilíndricos horizontales. Por último, los soportes de abrazadera se utilizan en recipientes verticales de pequeño volumen.

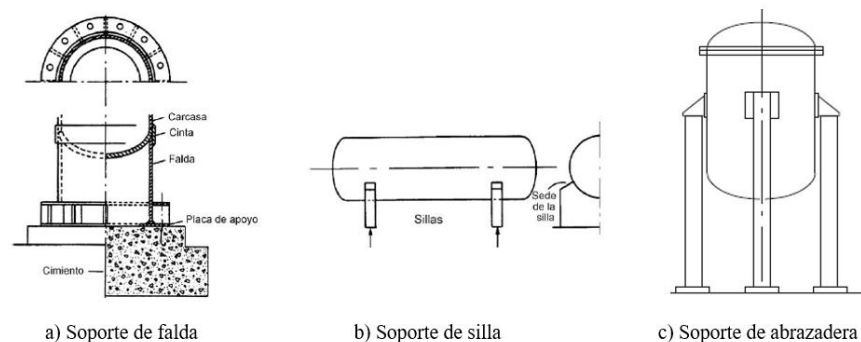


Figura 7. Tipos de soportes para recipientes a presión. Fuente:(4)

En la Figura 8 se muestran dos tipos de soportes tipo falda, la falda recta (a) y la cónica (b). Los soportes de falda se basan en una carcasa con forma cónica o cilíndrica que se encuentra soldada a la base del recipiente. La carga se transmite a los cimientos a partir de una brida en el fondo de la falda. (4)

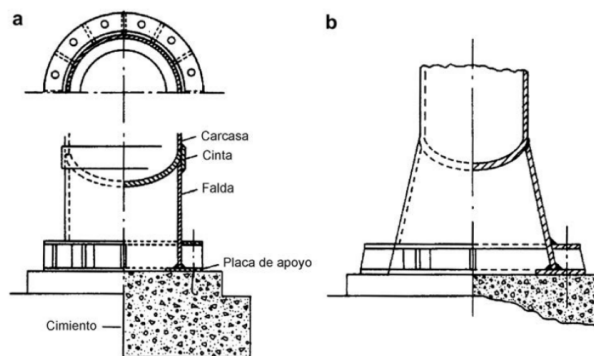


Figura 8. Ejemplos de soportes de falda. Fuente:(4)

El soporte debe ser diseñado de manera que pueda resistir las cargas por peso y los momentos de flexión impuestos por el recipiente. Esto habrá que tenerlo en cuenta a la hora de seleccionar el espesor de la falda. Los esfuerzos resultantes en la falda serán los de las ecuaciones [30] y [31].

$$\sigma_s = (\text{tensión}) = \sigma_{bs} - \sigma_{ws} \quad [30]$$

$$\sigma_s = (\text{compresivo}) = \sigma_{bs} + \sigma_{ws} \quad [31]$$

El esfuerzo de flexión en la falda ( $\sigma_{bs}$ ) se calcula con la ecuación [32] y el esfuerzo por el peso propio en la falda ( $\sigma_{ws}$ ) con la ecuación [33].

$$\sigma_{bs} = \frac{4 \cdot M_s}{\pi \cdot (D_s + t_{sk}) \cdot t_{sk} \cdot D_s} \quad [32]$$

$$\sigma_{ws} = \frac{W_v}{\pi \cdot (D_s + t_{sk}) \cdot t_{sk}} \quad [33]$$

Donde:

- $M_s$ : Momento máximo de flexión (kN·m)
- $D_s$ : Diámetro interno de la falda (m)
- $t_{sk}$ : Espesor de la falda (m)
- $W_v$ : Peso total del recipiente y su contenido (kN)

Para comprobar que el espesor de la falda seleccionado puede soportar la peor combinación de cargas por viento y peso propio se deben verificar los siguientes criterios de diseño, ecuaciones [34] y [35].

$$\sigma_s(\text{Tensión}) < S_s \cdot E \cdot \text{sen}(\theta_s) \quad [34]$$

$$\sigma_s(\text{Compresivo}) < 0,125 \cdot E_Y \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) \cdot \text{sen}(\theta_s) \quad [35]$$

Donde:

- $S_s$ : Esfuerzo máximo permisible (kPa)
- $E$ : Eficiencia de la unión soldada
- $\theta_s$ : Ángulo base de una falda
- $E_Y$ : Módulo de Young (kPa)

## 10 Aberturas y conexiones

Todos los recipientes industriales requieren aberturas para conexiones de las corrientes de entrada y salida de los equipos, bocas de hombre y accesorios. También serán necesarias boquillas para los instrumentos de control del equipo requeridos, así como para la válvula de alivio.

Por otra parte, las aberturas debilitan la carcasa debido a que producen concentraciones de esfuerzo mayores. Para compensar dicho efecto, es importante aumentar el espesor de la pared en la región adyacente a la abertura. Los métodos más comunes para compensar las aberturas son los asientos soldados (a), con una boquilla interior (b) y mediante anillo reforzados con bridas (c), como se muestran en la Figura 9. (4)

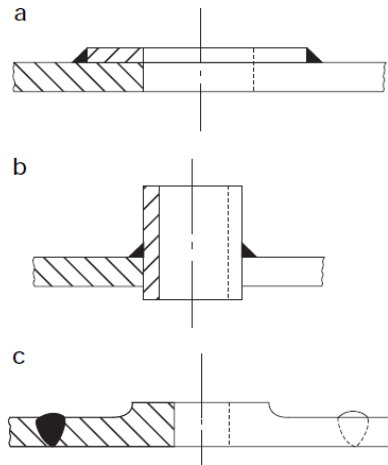


Figura 9. Tipos de compensación para aberturas. Fuente:(4)

## 11 Diseño válvula de alivio

Para garantizar la operación segura de un equipo a presión, son indispensables los dispositivos de liberación de presión. Estos dispositivos están diseñados para abrirse a una presión determinada y proteger el recipiente del exceso de presión mediante la extracción de fluido de dicho recipiente. El Código ASME BPV Sección VIII División I obliga a todos los recipientes a presión a disponer de una válvula de alivio de presión. (5)

Se realizará el diseño de la válvula de alivio de presión para líquidos. Esta válvula actuará en caso de que la presión en el interior del reactor supere la presión de trabajo máxima permitida, evitando posibles fallos estructurales graves.

Para el diseño preliminar de estas válvulas de alivio de presión se seguirá el Estándar API 520 Sizing, Selection, and Installation of Pressure-Relieving Devices in Refineries Part I, de acuerdo con el Código ASME BPV Sec. VIII.

Se desea calcular el área de descarga requerida, mediante la ecuación [36].

$$A = \frac{11,78 \cdot Q}{K_d \cdot K_w \cdot K_c \cdot K_v} \cdot \sqrt{\frac{G}{P_1 - P_2}} \quad [36]$$

Donde:

- A: Área requerida de descarga (mm<sup>2</sup>)
- Q: Caudal de descarga (L/min)
- K<sub>d</sub>: Coeficiente de descarga
- K<sub>w</sub>: Coeficiente de corrección de contrapresión
- K<sub>c</sub>: Factor de corrección por el uso de un disco de ruptura
- K<sub>v</sub>: Factor de corrección por viscosidad
- G: Densidad relativa del líquido referida al agua en condiciones estándar
- P<sub>1</sub>: Presión de tarado (kPa)
- P<sub>2</sub>: Contrapresión manométrica (kPa)

El coeficiente de corrección de contrapresión (K<sub>w</sub>) se obtiene de la Figura 10, a partir de la relación de contrapresión. En estos casos, como la válvula descarga al exterior, donde la presión es igual a la atmosférica, la relación de contrapresión es 0, y K<sub>w</sub> será 1.

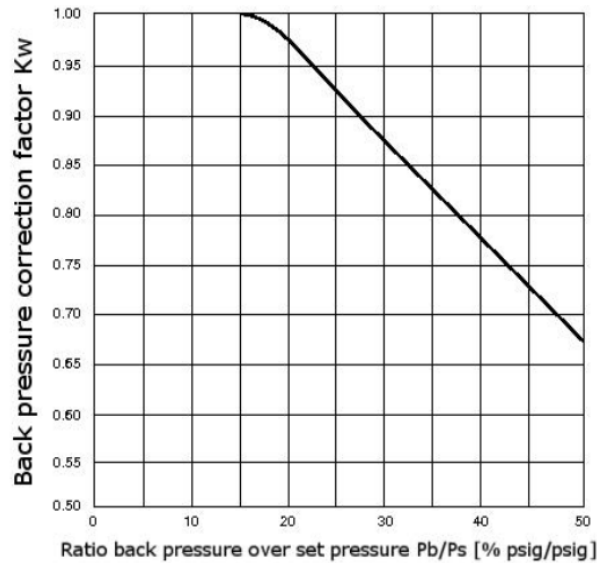


Figura 10. Factor de corrección de contrapresión para líquidos. Fuente:(5)

El factor de corrección por el uso de un disco de ruptura ( $K_c$ ), al no haber disco de ruptura, tomará el valor de 1. En el caso de que se empleara disco de ruptura, este factor sería de 0,9.

El factor de corrección por viscosidad ( $K_v$ ) se obtiene a partir del número de Reynolds. Para la primera estimación se asumirá 1 como factor de corrección y luego, se comprobará esa suposición y se recalculará en caso de que sea necesario.

El coeficiente de descarga ( $K_d$ ) se obtiene de la Figura 11, cogiendo la fila de medio líquido. Para el primer cálculo se emplea el indicado por API RP 520. Una vez se conoce el tipo de orificio, es cuando se emplea el valor indicado por el Código ASME Sec VIII LESER API Series 526.

Medium	API RP 520	ASME Code Sect. VIII LESER API Series 526
	$K_{d-effective} [-]$	$K_{actual} [-]$
Gas, vapors, steam	0.975	0.455 (Orifice D) 0.801 (Orifice E-T)
Liquid	0.65	0.343 (Orifice D) 0.579 (Orifice E-T)
Two-phase flows	0.85	No certification procedure

Figura 11. Coeficiente de descarga. Fuente:(5)

La presión de tarado se estima aplicando un factor de sobrepresión de 1,1 a la presión de diseño del equipo. Mientras la contrapresión manométrica se corresponde con la presión atmosférica. Ambas presiones hay que expresarlas en kPa.

A partir de los parámetros mencionados, se aplica la ecuación [36] obteniendo el área mínima efectiva necesaria. Con esa área calculada, se obtiene mediante la Figura 12, el área efectiva de descarga según API RP 520, que es el valor del área del orificio de descarga que sea igual o inmediatamente superior al valor calculado.

Orifice letter	API RP 520 Effective discharge area		ASME VIII Actual discharge area LESER API Series 526	
	[in <sup>2</sup> ]	[mm <sup>2</sup> ]	[in <sup>2</sup> ]	[mm <sup>2</sup> ]
D	0.110	71	0.239	154
E	0.196	126	0.239	154
F	0.307	198	0.394	254
G	0.503	325	0.616	398
H	0.785	506	0.975	625
J	1.287	830	1.58	1018
K	1.838	1186	2.25	1452
L	2.853	1841	3.48	2248
M	3.600	2322	4.43	2846
N	4.340	2800	5.30	3421
P	6.380	4116	7.79	5026
Q	11.050	7129	13.55	8742
R	16.000	10322	19.48	12668
T	26.000	16774	31.75	20485

Figura 12. Áreas de descarga según API RP 520 y ASME VIII. Fuente: (5)

Con el área efectiva de descarga, es necesario comprobar el valor del número de Reynolds del fluido a través del orificio, mediante la ecuación [37].

$$Re = \frac{Q \cdot (18800 \cdot G)}{\mu \cdot \sqrt{A}} \tag{37}$$

Una vez se tiene el valor del Reynolds, se recalcula el valor del factor de corrección por viscosidad a partir de la Figura 13.

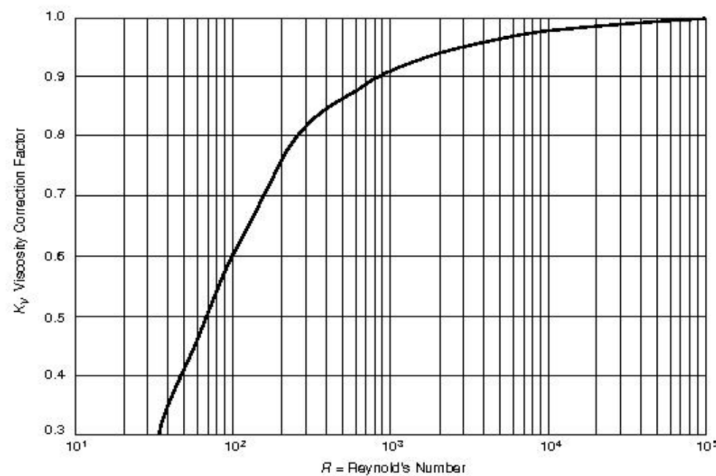


Figura 13. Factor de corrección por viscosidad. Fuente:(5)

Al conocerse el tipo de orificio, se toma el nuevo valor del coeficiente de descarga de la Figura 11 y se recalculará la nueva área mínima efectiva y el área real de descarga.

## 12 Bibliografía

1. ASHBY, M. F. *Materials selection in mechanical design*. 3.<sup>a</sup> ed. Oxford: Elsevier, 2005. ISBN 978-0-7506-6168-3.
2. GRACO. *Chemical compatibility guide*. En línea. [s. l.]: Graco Inc., [sin fecha]. Disponible en: [https://www.graco.com/content/dam/graco/ipd/literature/misc/chemical-compatibility-guide/Graco\\_ChemCompGuideEN-D.pdf](https://www.graco.com/content/dam/graco/ipd/literature/misc/chemical-compatibility-guide/Graco_ChemCompGuideEN-D.pdf) [Consulta: 30-04-2025]
3. EAGLE STAINLESS TUBE & FABRICATION, INC. *Stainless steel characteristics & properties | Eagle Stainless*. En línea. [s. l.]: Eagle Stainless Tube & Fabrication, Inc., [sin fecha]. Disponible en: <https://eagletube.com/about-us/news/stainless-steel-characteristics/> [Consulta: 30-04-2025]
4. SINNOTT, Ray, TOWLER, Gavin y COSTA LÓPEZ, José. *Diseño en ingeniería química*. 1.<sup>a</sup> ed. Barcelona: Reverté, 2012. ISBN 84-291-9504-1.
5. AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE. *Sizing, selection, and installation of pressure-relieving devices in refineries: Part I – Sizing and selection (API Recommended Practice 520)*. 7.<sup>a</sup> ed. Washington D. C.: American Petroleum Institute, enero 2000.

PARTE B:  
REACTORES  
R-101 A/B

## Índice

1	Introducción.....	3
2	Estudio de la reacción química.....	3
3	Selección y caracterización del catalizador.....	5
4	Desactivación del catalizador.....	6
5	Regeneración del catalizador.....	7
6	Pasos reacción catalítica heterogénea.....	7
6.1	Resistencia a la difusión en los poros.....	8
7	Cinética de la reacción.....	11
8	Condiciones de operación.....	12
9	Modo de operación.....	13
10	Selección del tipo de reactor y su configuración.....	14
11	Balances de materia.....	14
12	Balances de energía.....	15
12.1	Entalpía de reacción.....	17
12.2	Capacidades caloríficas.....	18
12.3	Evolución de la temperatura.....	19
13	Cálculos previos.....	20
14	Cálculo de la masa de catalizador.....	21
15	Justificación selección de la conversión.....	23
16	Dimensionamiento del reactor.....	24
17	Comprobación parámetros del reactor.....	25
17.1	Caída de presión.....	26
18	Diseño mecánico.....	27
18.1	Selección del material.....	27
18.2	Presión de diseño.....	27
18.3	Temperatura de diseño.....	28
18.4	Espesor de la carcasa.....	28

18.5	Selección de la orientación .....	29
18.6	Selección y dimensionamiento de los cabezales.....	29
18.7	Diseño del aislante .....	30
18.7.1	Caracterización del aire ambiente .....	33
18.7.2	Caracterización del reactor.....	34
18.7.3	Pérdidas sin aislante .....	35
18.7.4	Elección del aislante y espesor.....	35
18.8	Análisis de cargas .....	37
18.8.1	Carga por peso.....	37
18.8.2	Carga por viento.....	39
18.9	Análisis de esfuerzos .....	39
18.9.1	Esfuerzos primarios.....	39
18.9.2	Esfuerzos principales .....	40
18.9.3	Intensidad de esfuerzo permisible.....	41
18.9.4	Estabilidad elástica.....	41
18.10	Soporte del recipiente .....	41
18.11	Aberturas y conexiones .....	42
18.12	Accesorios internos .....	42
18.13	Diseño válvula de alivio .....	44
19	Hoja de especificaciones .....	45
20	Bibliografía.....	46

## 1 Introducción

El reactor es comúnmente conocido como el corazón de un proceso químico, esto se debe a que es la unidad del proceso en la que tiene lugar la conversión de las materias primas en los productos deseados. Dentro del diseño global de un proceso, el diseño del reactor es de vital importancia. (1)

Es por lo que en la presente parte del anexo se llevará a cabo el diseño de los reactores R-101 A/B. En dichos reactores tiene lugar la reacción de alquilación de benceno con 1-dodeceno en presencia de un catalizador para la obtención de dodecibenceno.

A lo largo del anexo, se emplearán las abreviaturas relativas a los compuestos químicos presentes en la reacción que se muestran en la Tabla 1.

*Tabla 1. Nomenclatura de los compuestos. Fuente: Elaboración propia*

Compuesto	Abreviatura
Benceno	B
Dodeceno	D
Dodecibenceno (LAB)	DB

## 2 Estudio de la reacción química

Los alquilbencenos de cadena larga son compuestos sintetizados a nivel industrial que se utilizan como productos intermedios en la fabricación de surfactantes industriales, como puede ser el detergente para la ropa. Los alquilbencenos lineales (LAB) se producen a partir de la alquilación de benceno con  $\alpha$ -olefinas.

La alquilación de aromáticos con olefinas se produce mediante el mecanismo de Friedel-Crafts. El mecanismo varía ligeramente en función de la naturaleza del catalizador empleado. Para ambos casos, tanto para catalizadores homogéneos como heterogéneos, se emplea el catalizador ácido para protonar el alqueno.

En sistemas homogéneos, el catalizador actúa como ácido de Lewis protonando al alqueno y formando un carbocatión en solución. Mientras que, para el caso de catalizadores sólidos, la protonación se produce sobre la superficie ácida de Bronsted, generando un ion carbenio adsorbido. (2, 3)

El carbocatión generado se puede reorganizar para dar lugar a especies más estables, antes de reaccionar con el benceno. Finalmente, el benceno ataca al carbocatión, produciéndose una sustitución electrofílica, dando lugar al alquilbenceno. Debido a la reorganización del carbocatión, se pueden formar cinco isómeros estables de alquilbenceno lineal, de 2-LAB a 6-LAB. (2, 3)

En la Figura 1 se muestra un esquema del mecanismo de alquilación de Friedel-Crafts entre el benceno y un alqueno.

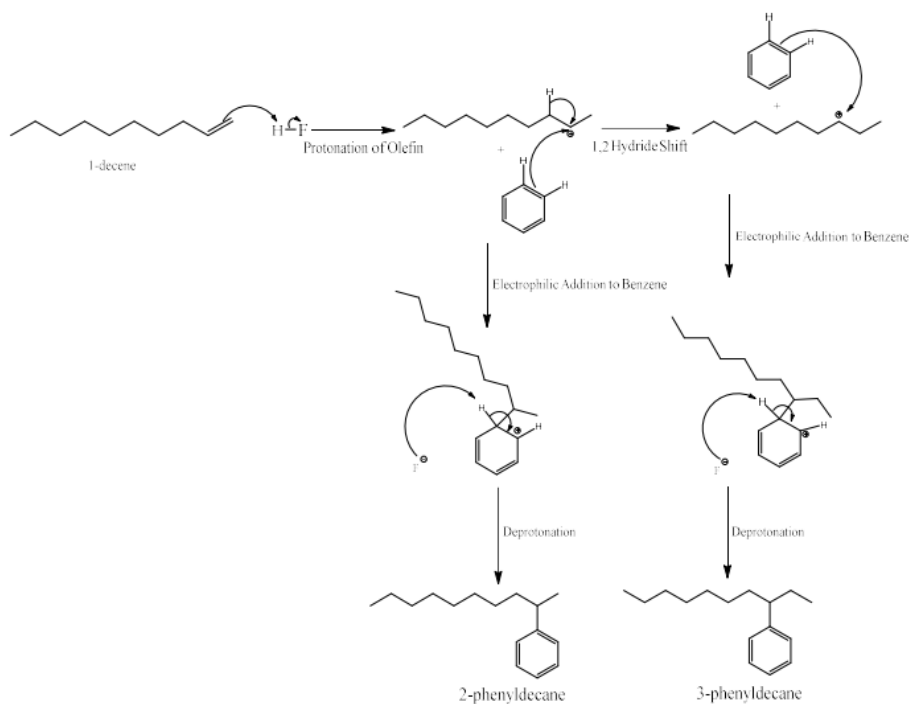


Figura 1. Mecanismo de reacción de la alquilación Friedel-Crafts. Fuente:(2)

Además, podrían producirse reacciones secundarias como la alquilación consecutiva dando lugar a multialquilbencenos y la polimerización de 1-dodeceno. Sin embargo, las condiciones de operación se pueden optimizar para evitar la existencia de reacciones secundarias. De esta manera, la cinética de la alquilación de benceno con 1-dodeceno se simplifica mediante un conjunto de reacciones paralelas que producen los diferentes isómeros del dodecilbenceno desde 2-LAB hasta 6-LAB, como se muestra en la Figura 2. (3)

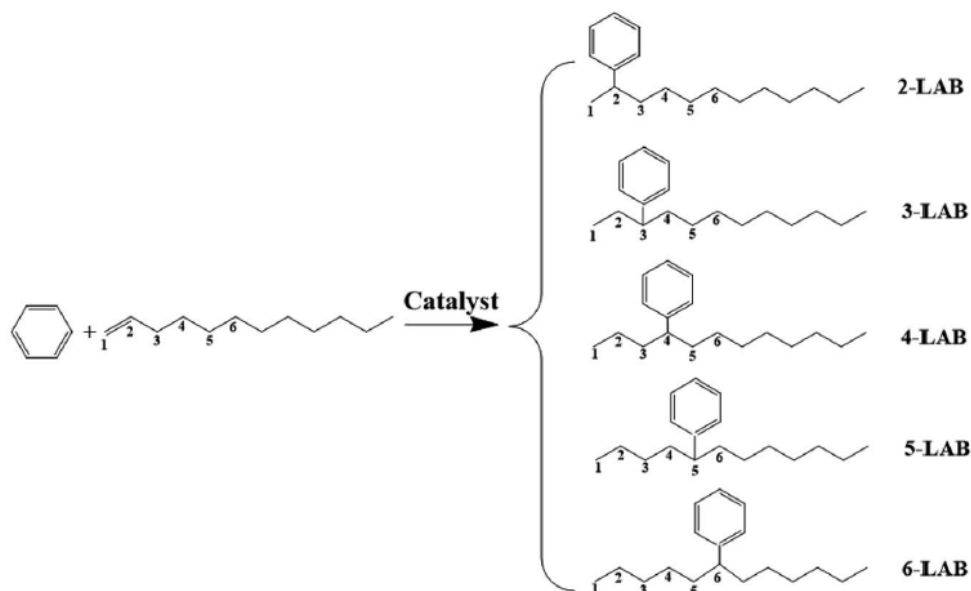


Figura 2. Reacción de alquilación de benceno con 1-dodeceno. Fuente:(4)

Además, se ha determinado mediante el cálculo de la constante de equilibrio, que esta reacción de alquilación se puede considerar irreversible, describiéndose de manera general como en la ecuación [1].



Cabe destacar que, aunque en la reacción de alquilación se formen 2-LAB, 3-LAB, 4-LAB, 5-LAB y 6-LAB, a lo largo de este proyecto se considerará como una mezcla de isómeros de LAB y se asumirán mismas propiedades. Esto se debe a la gran similitud de sus parámetros y a la falta de información bibliográfica para algunos de estos isómeros.

### 3 Selección y caracterización del catalizador

Un catalizador se trata de una sustancia que afecta a la velocidad de una reacción sin producir cambios en su equilibrio termodinámico. Generalmente, modifica una velocidad de reacción al emplear un mecanismo de reacción distinto, afectando al rendimiento y a la selectividad. Los catalizadores químicos comerciales son de gran importancia y están en continua investigación.

(5)

Cabe diferenciar entre la catálisis homogénea y heterogénea. En la catálisis homogénea, el catalizador se encuentra en solución con al menos uno de los reactivos. Mientras que en una reacción catalítica heterogénea se distingue más de una fase, normalmente el catalizador es un sólido y los reactivos y productos se encuentran en fase líquida o gaseosa. (5)

El alquilbenceno lineal (LAB) se usa como producto intermedio para la producción de detergente biodegradable con sulfonato de alquilbenceno lineal. Generalmente, el benceno se alquila con los hidrocarburos  $C_{11}$ - $C_{12}$  para obtener una mezcla de isómeros de LAB. Tradicionalmente, en la industria se empleaba el cloruro de aluminio ( $AlCl_3$ ) y el ácido fluorhídrico (HF) como catalizadores de dicha reacción. Sin embargo, estos catalizadores homogéneos presentaban numerosos inconvenientes, entre los que destacan la corrosión de los equipos, la contaminación ambiental, problemas en la separación y dificultades para su manipulación. Se ha trabajado en la búsqueda de tecnologías de producción de LAB para superar dichas limitaciones. (6)

En 1995, UOP y Petresa llevaron a cabo el desarrollo de un catalizador ácido sólido para la producción de LAB. Desde entonces, se ha ido incrementando entre los fabricantes de LAB la adopción de catalizadores ácidos sólidos en sus procesos. Se ha demostrado que diversos materiales ácidos sólidos, como arcillas, zeolitas, heteropoliácidos (HPAs) y fluoruros de sílice y alúmina, son activos en la alquilación del benceno con diversas olefinas. (6, 7)

Dentro de los catalizadores heterogéneos, existen numerosas características que hay que tener en cuenta a la hora de seleccionar el más adecuado para el proceso, entre ellas cabe destacar la selectividad de la reacción y el grado de conversión alcanzado, las condiciones de operación requeridas, el área interfacial, la regeneración del catalizador y la selectividad hacia cada isómero del LAB. Entre los isómeros del LAB se busca maximizar la selectividad del 2-LAB, puesto que se trata del más biodegradable y por tanto produce un detergente más respetuoso con el medio ambiente. (8)

Recientemente, se ha investigado el uso de ácido tungstofosfórico soportado en  $SiO_2$  como catalizador para esta reacción de alquilación. Este catalizador ácido destaca por su alta selectividad del LAB, y concretamente del isómero 2-LAB. Este consiste en un heteropoliácido (HPA) inmovilizado en un soporte sólido. En las últimas décadas, los heteropoliácidos se han aplicado en numerosos procesos tanto a escala de laboratorio como industrial. Destacan en la aplicación de la catálisis ácida debido a su fuerte acidez Bronsted. El soporte inmovilizador evita la descomposición del ácido y facilita la regeneración del catalizador. (3, 9)

El catalizador seleccionado para este reactor será el ácido tungstofosfórico soportado en sílice, debido a que permite alcanzar una conversión prácticamente del 100% del LAB, además de que permite alcanzar una selectividad del isómero 2-LAB casi del 40%. Además, presenta una gran área interfacial, lo que permitirá alcanzar una velocidad de reacción significativa. (3)

Las propiedades de dicho catalizador se muestran en la Tabla 2 y la porosidad de la partícula se obtiene con la ecuación [2].

$$\varepsilon_{partícula} = \frac{\text{Volumen poro}}{\text{Volumen total}} \quad [2]$$

Tabla 2. Propiedades del catalizador HPW-SiO<sub>2</sub>-28. Fuente: (10)

Propiedad	Valor
Área superficial BET (m <sup>2</sup> /g)	100
Volumen poro (cm <sup>3</sup> /g), V <sub>poro</sub>	0,76
Diámetro poro (nm), D <sub>poro</sub>	32
Densidad partícula (g/cm <sup>3</sup> ), ρ <sub>partícula</sub>	0,83
Diámetro de partícula (mm), D <sub>p</sub>	4,70
Longitud de partícula (mm), L <sub>p</sub>	4,72
Peso (g)	0,068
Volumen total (cm <sup>3</sup> /g)	1,20
Porosidad partícula, ε <sub>partícula</sub>	0,63
Densidad aparente del lecho (g/cm <sup>3</sup> ), ρ <sub>lecho</sub>	0,53

#### 4 Desactivación del catalizador

La mayoría de los catalizadores no pueden mantener su actividad al mismo nivel indefinidamente, sino que experimentan un proceso de desactivación. En este proceso de desactivación, la actividad catalítica se va reduciendo con el paso del tiempo. Esta desactivación se debe generalmente a tres fenómenos: el envejecimiento, el envenenamiento y a al ensuciamiento o coquización. (5)

El envejecimiento, conocido también como sinterización, consiste en la pérdida de superficie activa debido a estar expuesto de manera prolongada a altas temperaturas en fase gaseosa, provocando la pérdida de actividad catalítica. Para esta reacción, este fenómeno de desactivación podría quedar descartado debido a que en la reacción no interviene ningún compuesto en fase gaseosa. (5)

La desactivación por coquización o ensuciamiento se produce en reacciones con hidrocarburos y se debe a que el coque se deposita sobre la superficie del catalizador. La pérdida de actividad catalítica por coquización sí que tendrá lugar en el reactor R-101.(5)

En la desactivación debida al envenenamiento del catalizador, las moléculas contaminantes experimentan una quimiadsorción irreversible sobre los sitios activos, lo que conlleva una reducción del número de sitios disponibles para la reacción. Este contaminante podría ser tanto un reactivo, producto o impureza. Debido a que la alimentación al reactor R-101 no presenta impurezas y que los reactivos y productos no presentan moléculas contaminantes, este fenómeno prácticamente no se producirá en esta reacción. (3)

En conclusión, el catalizador de ácido tungstofosfórico soportado en sílice se desactivará principalmente debido a la coquización. Se ha estudiado que este catalizador mantiene constante su actividad catalítica durante 400 horas, y a partir de este tiempo empieza a disminuir. Para solucionar este problema será necesario emplear dos reactores en paralelo, de manera que mientras uno opera con plena actividad catalítica, el otro se estará regenerando. Por lo tanto, las unidades a diseñar serán los reactores R-101A/B, que serán unidades exactamente iguales. (2)

## 5 Regeneración del catalizador

Durante la reacción de alquilación, se irá produciendo una acumulación de coque sobre la superficie del catalizador, que provocará la desactivación de este. Por tanto, una vez se produzca la desactivación, será necesario regenerar el lecho. Para llevar a cabo la regeneración de catalizadores de ácido tungstofosfórico soportado en sílice por coquización, existen varios métodos.

Generalmente, para la regeneración de catalizadores convencionales se emplea la combustión del coque con oxígeno a temperaturas entre 450°C y 550°C. Sin embargo, este tipo de catalizadores, heteropoliaácidos (HPA), se descomponen a temperaturas superiores a 445°C. Por tanto, es necesario buscar otros métodos alternativos para dicha desactivación. (11)

Se conoce que la adición de paladio (Pd) permite reducir significativamente la temperatura de combustión del coque hasta 350°C. Asimismo, el dopaje con paladio inhibe la formación de coque poliaromático, una clase de coque difícil de eliminar. Por tanto, uno de los métodos de desactivación es la oxidación aeróbica con dopaje de Pd, por la que se hace circular una corriente de aire u oxígeno a 350°C. (11)

Otro método es la extracción mediante disolventes como el diclorometano (DCM), tolueno o ciclohexano, pero estos solo resultan efectivos cuando el catalizador está solo ligeramente coquificado. (11)

Asimismo, se puede emplear ozono como oxidante del coque a una temperatura de 150°C. Este método permite eliminar todos los tipos de coque sin dañar la estructura del catalizador. Sin embargo, este método presenta gran complejidad y un coste elevado (11).

Finalmente, debido a ser el método más simple y económico, se seleccionará la regeneración por combustión con aire a 350°C con adición de paladio.

## 6 Pasos reacción catalítica heterogénea

Al presentar los reactivos y productos en fase líquida y el catalizador en fase sólida, se trata de una reacción heterogénea. Las reacciones de catálisis heterogéneas se pueden dividir en los siguientes pasos, cada uno representado en la Figura 3.

1. Transferencia de masa (difusión) de los reactivos (benceno y 1-dodeceno) del seno del fluido a la superficie externa de la partícula del catalizador.
2. Difusión de los reactivos de la boca del poro, a través de los poros del catalizador, hacia la vecindad inmediata de la superficie catalítica interna.
3. Adsorción de los reactivos sobre la superficie del catalizador.
4. Reacción sobre la superficie del catalizador.
5. Desorción de los productos (dodecibenceno) de la superficie.

6. Difusión de los productos del interior de la partícula a la boca del poro en la superficie externa.
7. Transferencia de masa de los productos de la superficie externa de la partícula al seno del fluido. (5)

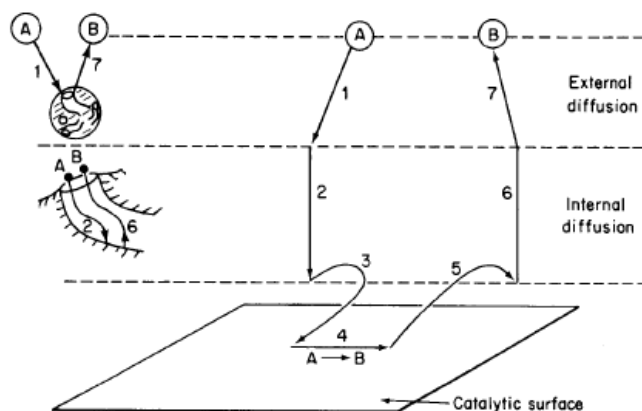


Figura 3. Pasos en una reacción catalítica heterogénea. Fuente: (5)

La velocidad total de reacción se corresponde con la velocidad del paso más lento en el mecanismo. Por tanto, para conocer la velocidad de reacción global, será necesario buscar cual será el paso limitante.

Para el caso de una reacción sobre una partícula porosa de catalizador, la velocidad de reacción dependerá de:

- La cinética de superficie, que puede implicar la adsorción del reactivo en la superficie, la reacción sobre la superficie o la desorción del producto.
- La resistencia a la difusión en los poros, lo que podría provocar que no exista reactivo en el interior de la partícula. (12)

### 6.1 Resistencia a la difusión en los poros

Para medir la disminución de la velocidad de reacción debida a la resistencia a la difusión en los poros, se define un factor denominado eficacia del catalizador ( $\eta$ ), que sigue la ecuación [3].

$$\eta = \frac{\text{Velocidad real media de reacción dentro del poro}}{\text{Velocidad sin tener en cuenta la disminución por la difusión en el poro}} \quad [3]$$

Este factor de eficacia se obtiene gráficamente a partir de una magnitud adimensional, denominada módulo de Thiele ( $M_T$ ). Sin embargo, este módulo solo se puede emplear para el caso en el que se garantiza que la velocidad de reacción disponible es la real.

Los parámetros cinéticos disponibles en la bibliografía (3) son obtenidos a través de experimentos a escala laboratorio, lo que se conoce como cinética observada. Para este caso, hay otro módulo que incluye las cantidades observables y medibles, el módulo de Wagner-Weisz-Wheeler ( $M_W$ ). A pesar de que en la bibliografía se indica que para esas condiciones a escala laboratorio, los efectos de la difusión interna y externa se consideran despreciables, se tratarán dichas velocidades de reacción como cinéticas observadas, para optar por un diseño más conservador. (12)

Al tratar la reacción en escala industrial y emplear partículas de catalizador de mayor tamaño, es necesario verificar si bajo estas condiciones la velocidad de reacción estaría limitada por la resistencia a la difusión interna en los poros.

El módulo de Wagner-Weisz-Wheeler se calcula con la expresión [4]. (12)

$$M_W = L^2 \cdot \frac{\left(-\frac{r_A'''}{C_A}\right)_{obs}}{D_{eff}} \quad [4]$$

Donde:

- $M_W$ : Módulo de Wagner-Weisz-Wheeler
- $L$ : Longitud característica de la partícula (m)
- $-r_A'''$ : Velocidad de reacción basada en el volumen del catalizador ( $\text{mol}/(\text{m}_{\text{cat}}^3 \cdot \text{s})$ )
- $k'''$ : Constante cinética por volumen de catalizador ( $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ )
- $C_A$ : Concentración del reactivo limitante ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )
- $D_{eff}$ : Difusividad efectiva ( $\text{m}^2/\text{s}$ )

La longitud característica de la partícula depende de la forma de esta, en este caso, al tratarse de una partícula cilíndrica, sigue la ecuación [5], donde  $R$  es el radio de la partícula. (3, 9)

$$L = \frac{R}{2} \quad [5]$$

La difusividad efectiva sigue la ecuación [6]. (13)

$$D_{eff} = D_m \cdot \frac{\varepsilon}{\tau} \quad [6]$$

Donde:

- $D_m$ : Difusividad molecular del reactivo limitante, dodeceno ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
- $\varepsilon$ : Porosidad de la partícula
- $\tau$ : Tortuosidad

La difusividad molecular para el dodeceno se calcula con la ecuación [7]. (14)

$$D_m = a \cdot M^b \quad [7]$$

Donde:

- $D_m$ : Difusividad molecular ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )
- $a$  y  $b$ : Parámetros que dependen del componente
- $M$ : Peso molecular del componente ( $\text{g}/\text{mol}$ )

La tortuosidad ( $\tau$ ) se calcula con la ecuación [8], donde  $\varepsilon$  es la porosidad de la partícula. (15)

$$\tau = \frac{\varepsilon}{1 - (1 - \varepsilon)^{\frac{2}{3}}} \quad [8]$$

En la Tabla 3 se muestran los resultados del cálculo de la difusividad efectiva.

Tabla 3. Cálculo de la difusividad efectiva. Fuente:(14)

Parámetro	Valor
Porosidad partícula	0,63
$M_{\text{dodeceno}}$ (g/mol)	168,32
a	1,84
b	-0,502
$D_m$ ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )	0,14
Tortuosidad	1,30
$D_{eff}$ ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )	0,068

Una vez se dispone del valor de la difusividad efectiva, se procede al cálculo del módulo de Wagner-Weisz-Wheeler. Para ello, se necesita emplear el valor observado de la velocidad de reacción y de la concentración del reactivo.

Sin embargo, estos parámetros varían a lo largo del reactor, debido al cambio de la conversión y de la temperatura. Por tanto, se decide seleccionar el caso más desfavorable, es decir, el que proporcione mayor resistencia a la difusión en los poros y, por tanto, un mayor valor del módulo. De esta manera se evalúa el posible riesgo de limitación por difusión en condiciones extremas, que serán a la salida del reactor.

Tras calcular el módulo de Wagner-Weisz-Wheeler, se obtiene el factor de eficacia con la Figura 4. Se muestra en la Tabla 4 los resultados obtenidos.

Tabla 4. Cálculo del factor de eficacia del catalizador. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
R (mm)	2,35
L (mm)	1,17
Densidad partícula (kg/m <sup>3</sup> )	830,00
-r <sub>D</sub> <sup>'''</sup> (mol/(m <sup>3</sup> s))	0,090
C <sub>D,s</sub> (mol/m <sup>3</sup> )	21,50
MW	8,52E-04
Efectividad	1,00

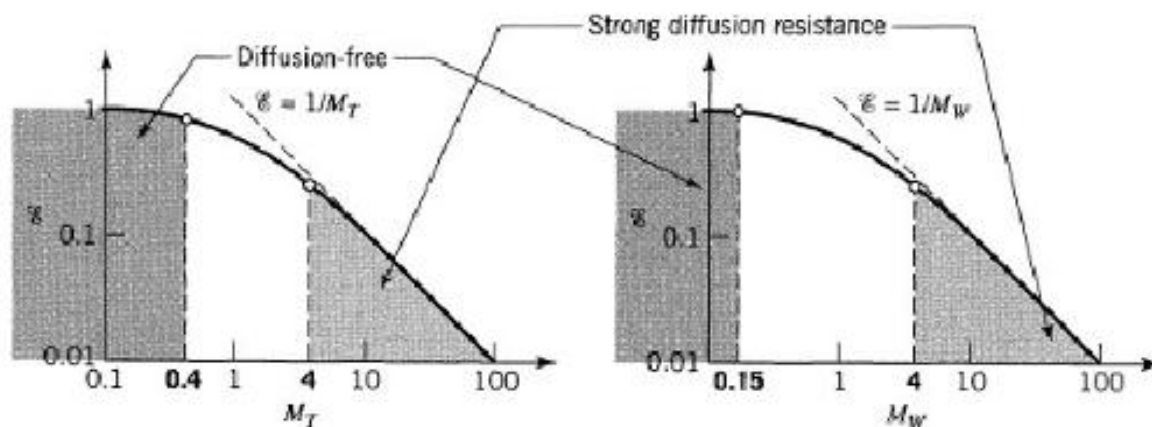


Figura 4. Factor de eficacia del catalizador en función de  $M_T$  y  $M_W$ . Fuente: (12)

Finalmente, al obtenerse un factor de eficacia del catalizador de 1, se concluye que no hay resistencias a la difusión en el poro para estas condiciones. Por lo que la etapa limitante será la cinética de reacción en la superficie.

## 7 Cinética de la reacción

La velocidad de reacción se ha establecido mediante la siguiente expresión [9].

$$r_i = k_{0,i} \cdot e^{\left(\frac{-E_i}{R \cdot T}\right)} \cdot C_B^{n_{B,i}} \cdot C_D^{n_{D,i}} \quad [9]$$

Donde:

- $r_i$ : Velocidad de la reacción de formación del isómero i-LAB (kmol/(kgcat·h))
- $k_{0,i}$ : Contante de la velocidad de reacción de formación del isómero i-LAB ( $m^6/(kgcat \cdot h \cdot kmol)$ )
- $E_i$ : Energía de activación de formación del isómero i-LAB (kJ/kmol)
- $R$ : Constante de los gases ideales (kJ/(kmol·K))
- $T$ : Temperatura (K)
- $C_B$ : Concentración de benceno (kmol/m<sup>3</sup>)
- $C_D$ : Concentración de dodeceno (kmol/m<sup>3</sup>)
- $n_{B,i}$ : Orden parcial de reacción respecto al benceno para el isómero i
- $n_{D,i}$ : Orden parcial de reacción respecto al 1-dodeceno para el isómero i

En la bibliografía se han determinado experimentalmente los parámetros cinéticos de cada reacción, mostrados en la Tabla 5. Además, se establece que el orden de reacción es 1 para cada reactivo y por tanto es de orden global 2. (3)

Tabla 5. Valores de los parámetros cinéticos de cada reacción. Fuente:(3)

Reacción	$k_{0,i}$ ( $m^6/(kgcat \cdot h \cdot kmol)$ )	$E_i$ (kJ/mol)
2-LAB	402,8	45,7
3-LAB	743,9	46,6
4-LAB	792,1	48,0
5-LAB	892,2	48,3
6-LAB	217,8	48,2

Además, las concentraciones de benceno y dodeceno de la mezcla se pueden expresar en función de la concentración inicial y de la conversión, teniendo en cuenta que el dodeceno es el reactivo limitante, se obtienen las expresiones [10] y [11].

$$C_D = C_{D,0} \cdot (1 - X_D) \quad [10]$$

$$C_B = C_{B,0} - C_{D,0} \cdot X_D \quad [11]$$

Despejando dichas expresiones de la concentración en la ecuación de la velocidad de reacción, se obtiene la ecuación [12].

$$r_i = k_{0,i} \cdot e^{\left(\frac{-E_i}{R \cdot T}\right)} \cdot C_{D,0} \cdot (1 - X_D) \cdot (C_{B,0} - C_{D,0} \cdot X_D) \quad [12]$$

A partir de la velocidad de formación de cada isómero de LAB se puede obtener la velocidad de desaparición del dodeceno, ecuaciones [13] y [14].

$$-r_D = r_{2-LAB} + r_{3-LAB} + r_{3-LAB} + r_{4-LAB} + r_{5-LAB} + r_{6-LAB} \quad [13]$$

$$-r_D = \left( k_{2-LAB} \cdot e^{\left(\frac{-E_{2-LAB}}{R \cdot T}\right)} + k_{3-LAB} \cdot e^{\left(\frac{-E_{3-LAB}}{R \cdot T}\right)} + k_{4-LAB} \cdot e^{\left(\frac{-E_{4-LAB}}{R \cdot T}\right)} + k_{5-LAB} \cdot e^{\left(\frac{-E_{5-LAB}}{R \cdot T}\right)} + k_{6-LAB} \cdot e^{\left(\frac{-E_{6-LAB}}{R \cdot T}\right)} \right) \cdot c_B^{n_{B,i}} \cdot c_D^{n_{D,i}} \quad [14]$$

## 8 Condiciones de operación

En el presente apartado se decidirá la temperatura, la presión y la relación molar de alimentación de los reactivos que permitan producir dodecibenceno de la manera más efectiva posible.

La presión de operación seleccionada será de 10 bar, siguiendo el estudio del que se obtuvo el modelo cinético (3). Esta presión permite operar a temperaturas más elevadas asegurándose de que todos los compuestos se encuentren en fase líquida. Además, las altas presiones reducen la posibilidad de que se produzcan reacciones secundarias como la polialquilación. Por otro lado, se ha buscado una solución de compromiso entre la búsqueda de una presión elevada pero que no suponga un gran aumento de los costes de diseño mecánico.

Según la bibliografía, el rango de temperatura de operación habitual se encuentra entre los 90°C y 150°C, permitiendo alcanzar la energía de activación requerida, pero sin posibilidad de que se produzca una reacción fuera de control. Se conoce que a partir de los 160°C se podrían comenzar a producir reacciones secundarias, como la polimerización de las olefinas, además de la desactivación del catalizador. (7, 16)

Se ha comprobado calculando la velocidad de reacción a distintas temperaturas para una conversión del 95%, que cuanto mayor sea la temperatura, mayor será la velocidad de reacción. Se ha elaborado un gráfico mediante la herramienta de Excel que representa dichos resultados, que se puede ver en la Figura 5. Por tanto, dentro del rango recomendable de operación, se buscarán temperaturas altas para maximizar la velocidad de reacción y alcanzar altas conversiones.

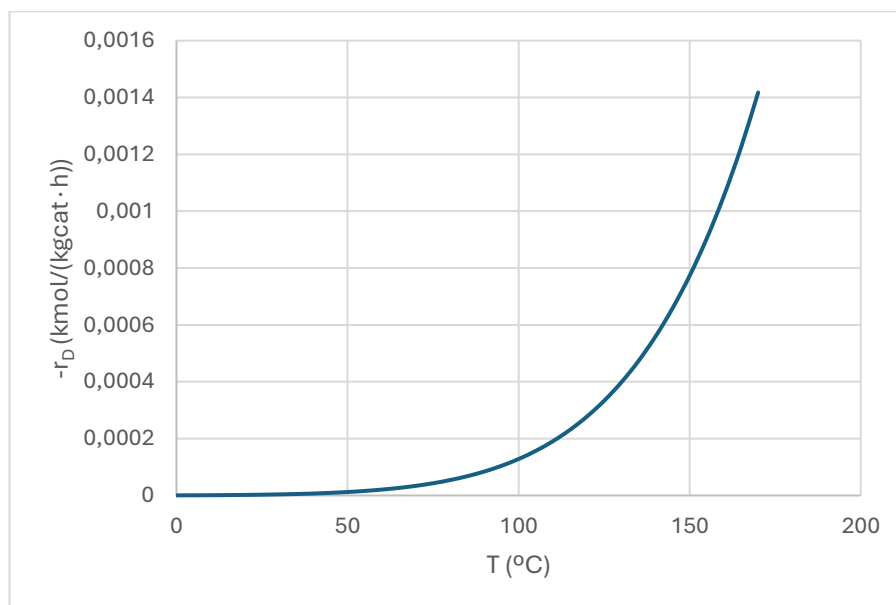


Figura 5. Velocidades de reacción en función de la temperatura. Fuente: Elaboración propia

Otro factor importante a considerar en la operación del reactor es la relación molar de alimentación entre el benceno y el dodeceno. Se ha comprobado que, cuanto mayor sea la relación de benceno en exceso, mayor será la selectividad hacia el LAB. Esto se debe a que los grupos alquilo actúan como sustituyentes activantes, lo que hace que el dodecibenceno sea más reactivo que el benceno. Por tanto, es difícil evitar que se produzcan alquilaciones múltiples. (17)

La solución a este problema es utilizar un gran exceso de benceno, de forma que la concentración de dodecibenceno será siempre baja y, por tanto, será más probable que el electrófilo reaccione con benceno que con el dodecibenceno. (17)

Por esta razón, se decide operar con una relación molar de alimentación benceno:dodeceno de 20:1, lo que permite maximizar la selectividad hacia el LAB. Dado que el benceno en exceso de la salida del reactor se recupera en la columna de destilación T-101 y se recircula a los reactores R-101 A/B, esta relación molar no implica un aumento significativo de los costes de operación.

Finalmente, se resumen en la Tabla 6 las condiciones de operación seleccionadas para los reactores R-101 A/B.

Tabla 6. Condiciones de operación de los reactores R-101 A/B. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
Presión de operación (bar)	10
Relación molar de alimentación (B:D)	20:1
Rango temperatura de operación recomendado (°C)	90-150

## 9 Modo de operación

Otra decisión importante que hay que tomar para el diseño de un reactor es su modo de operación. Los principales modos de operación posibles son operación adiabática o isotérmica.

Si se opera de forma adiabática, es decir, sin intercambio de calor, la temperatura de la reacción aumentará o disminuirá en función de si la reacción es exotérmica o endotérmica, respectivamente. Sin embargo, si el reactor es isotérmico, la temperatura de la mezcla se mantiene constante mediante un sistema de intercambio de calor que se encarga de aportar o retirar el calor de reacción necesario.

Para el caso de los reactores R-101 A/B se ha optado por operar en modo adiabático. Esta decisión se debe a que la reacción no presenta un carácter fuertemente exotérmico y por tanto, el aumento de temperatura a lo largo del lecho se espera que no sea muy significativo. Esto permitiría mantener el sistema dentro del rango de temperatura de operación recomendado y sin riesgo de reacciones descontroladas ni desactivación térmica del catalizador. Este modo de operación simplifica el diseño del equipo y reduce los costes de este, al no requerir de un sistema de intercambio de calor.

Hay que seleccionar una temperatura de alimentación al reactor que permita estar siempre dentro del rango de operación recomendado, pero al mismo tiempo tratando de maximizar la velocidad. La temperatura de alimentación seleccionada será de 125°C, de manera que se estima que la temperatura de salida no superará los 150°C. Una vez se haya realizado el balance de energía se confirmará si el modo de operación y la temperatura seleccionada son adecuados.

## 10 Selección del tipo de reactor y su configuración

En los reactores R-101 A/B se lleva a cabo una reacción catalítica heterogénea, en la que intervienen dos fases: líquida, los reactivos y sólida, el catalizador. Se trata de un proceso continuo y en régimen adiabático. Para estas condiciones existen principalmente tres tipos de reactores, en función del contacto entre el lecho de partículas de catalizador y el fluido, que se pueden apreciar en la Figura 6.

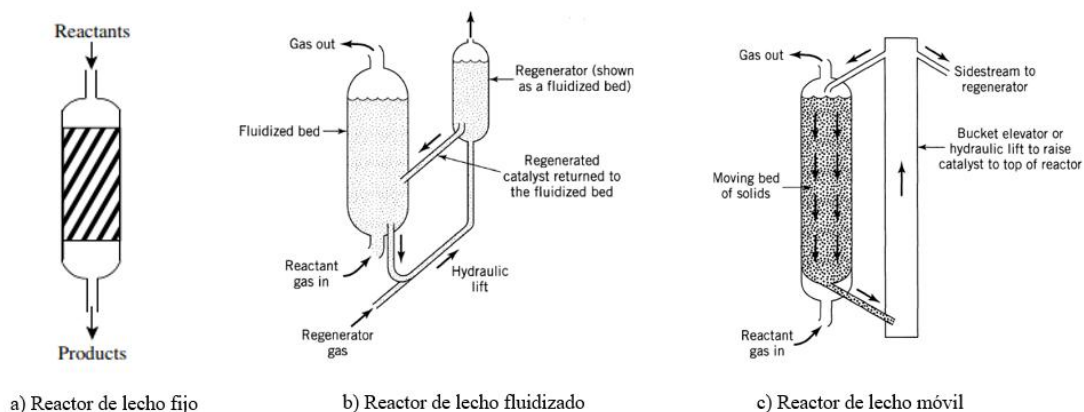


Figura 6. Ejemplos de reactores heterogéneos. Fuente:(12)

En el reactor de lecho fijo, el lecho se encuentra empacado con partículas de catalizador sólido. Su diseño se puede aproximar al comportamiento de un reactor de flujo en pistón.

Los reactores de lecho fluidizado mantienen las partículas sólidas de catalizador en suspensión por la circulación ascendente del fluido reactivo. Esta configuración permite unas elevadas velocidades de transferencia de masa y de calor, y previene la formación de puntos calientes. Aunque requiere un tamaño de partícula de catalizador muy pequeño y es más habitual para fluidos en fase gaseosa. (18)

En los reactores de lecho móvil, el catalizador se mantiene en movimiento debido al flujo de entrada y salida del reactor, lo que permite retirar continuamente el catalizador para su regeneración. (18)

La principal ventaja de los reactores de lecho fluidizado y lecho móvil es la posibilidad de extraer el catalizador para su regeneración. Sin embargo, aunque el catalizador empleado requiere regenerarse cada 400 horas, esta regeneración puede realizarse en el interior del reactor, sin necesidad de extraerlo.

Finalmente, se opta por un reactor de lecho fijo por ser la configuración más empleada en la industria para este tipo de reacciones y además destaca por presentar un diseño más simple, mayor facilidad para su control y operación y ser más económico.

## 11 Balances de materia

Aunque los balances de materia a cada unidad del proceso se encuentran en el *Anexo I. Balances de materia y energía*, en el presente apartado se realizará una explicación más detallada del balance a los reactores R-101 A/B para facilitar la comprensión del diseño.

Aunque según la bibliografía (3) es posible alcanzar la conversión completa del dodeceno, esta requeriría una elevada cantidad de catalizador. Por lo que se realizará una optimización de estos parámetros, fijando una conversión del 95%, esta decisión se justificará en el apartado 15.

Justificación selección de la conversión. Asimismo, no se tendrán en cuenta ninguna reacción secundaria dentro del reactor.

Se dispone de los siguientes parámetros sobre la reacción de alquilación en la Tabla 7.

Tabla 7. Parámetros de la reacción de alquilación. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
Conversión, $X_D$	95 %
Relación molar alimentación B:D	20:1

Para poder satisfacer la producción anual establecida de 120.000 toneladas anuales de detergente, será necesario que de este reactor salgan 1776,20 kg/h de dodecilbenceno, teniendo en cuenta la eficiencia de los posteriores equipos del proceso y que la planta opera 24 horas al día durante 330 días al año. A partir de este, de los parámetros de la Tabla 7 y aplicando las ecuaciones [15], [16], [17] y [18], se realizan los cálculos necesarios para obtener el flujo de los demás corrientes mostrados en la Tabla 8.

$$F_{B,0} = 20 \cdot F_{D,0} \quad [15]$$

$$F_D = F_{D,0} \cdot (1 - X_D) \quad [16]$$

$$F_B = F_{B,0} - F_{D,0} \cdot X_D \quad [17]$$

$$F_{DB} = F_{D,0} \cdot X_D + F_{DB,0} \quad [18]$$

Donde:

- $F_{D,0}$ : Flujo molar de dodeceno a la entrada del reactor (kmol/h)
- $F_D$ : Flujo molar de dodeceno a la salida del reactor (kmol/h)
- $F_{B,0}$ : Flujo molar de benceno a la entrada del reactor (kmol/h)
- $F_B$ : Flujo molar de benceno a la salida del reactor (kmol/h)
- $F_{DB,0}$ : Flujo molar de dodecilbenceno a la entrada del reactor (kmol/h)
- $F_{DB}$ : Flujo molar de dodecilbenceno a la salida del reactor (kmol/h)
- $X_D$ : Conversión del dodeceno

Tabla 8. Balances de materia al reactor R-101 A/B. Fuente: Elaboración propia

Componente	Entrada (Corriente 7)		Salida (Corriente 8)	
	Flujo másico (kg/h)	Flujo molar (kmol/h)	Flujo másico (kg/h)	Flujo molar (kmol/h)
Benceno	11.292,89	144,57	10.756,48	137,70
Dodeceno	1.216,72	7,23	60,84	0,36
Dodecilbenceno	83,90	0,34	1.776,20	7,21
<b>Total</b>	<b>12593,51</b>	<b>152,14</b>	<b>12.593,51</b>	<b>152,14</b>

## 12 Balances de energía

El balance de energía es un punto clave para la decisión de operar en modo isotérmico o adiabático. En este apartado se comprobará si es adecuado diseñar los reactores R-101 A/B en régimen adiabático, en función del valor de la temperatura de salida del reactor calculada.

Para realizar el balance de energía, se aplicará la primera ley de la termodinámica a un sistema abierto como el de la Figura 7. Los reactores de flujo continuo se consideran sistemas abiertos, ya que su masa atraviesa los límites del sistema.

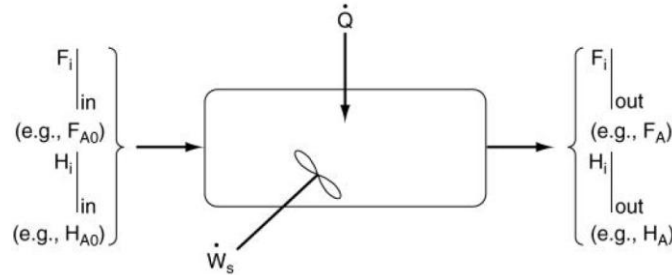


Figura 7. Balance de energía para un sistema abierto. Fuente: (5)

La ecuación [19] representa el balance de energía a un sistema abierto

$$\frac{d\hat{E}_{sistema}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{i=1}^n E_i \cdot F_i|_{entrada} - \sum_{i=1}^n E_i \cdot F_i|_{salida} \quad [19]$$

Donde:

- $\frac{d\hat{E}_{sistema}}{dt}$ : Velocidad de acumulación de energía en el interior del sistema (J/s)
- $\dot{Q}$ : Flujo de calor hacia el sistema procedente de los alrededores (J/s)
- $\dot{W}$ : Flujo de trabajo realizado por el sistema sobre los alrededores (J/s)
- $F_i$ : Flujo molar de  $i$  (mol de  $i$ /s)
- $E_i$ : Energía de  $i$  (J/mol de  $i$ )

El término de trabajo ( $\dot{W}$ ) se suele dividir en flujo de trabajo y otro tipo de trabajo ( $\dot{W}_s$ ), como se muestra en la ecuación [20]. El término  $\dot{W}_s$ , conocido como trabajo de corte, es producido por elementos como un agitador. El flujo de trabajo es el trabajo necesario para hacer que la masa entre y salga del sistema.

$$\dot{W} = - \sum_{i=1}^n F_i \cdot P \cdot \tilde{V}_i|_{entrada} + \sum_{i=1}^n F_i \cdot P \cdot \tilde{V}_i|_{salida} + \dot{W}_s \quad [20]$$

Donde:

- $P$ : Presión (Pa)
- $\tilde{V}_i$ : Volumen molar específico de la especie  $i$  ( $m^3/mol$  de  $i$ )

La energía  $E_i$  es la suma de la energía interna ( $U_i$ ), la energía cinética ( $u_i^2/2$ ), la energía potencial ( $g \cdot z_i$ ) y otras energías como eléctrica, magnética, luminosa..., como en la ecuación [21].

$$E_i = U_i + \frac{u_i^2}{2} + g \cdot z_i + otras \quad [21]$$

En la mayoría de los balances a reactores químicos, los términos de energía cinética, potencial y otras son despreciables comparados con el término de la entalpía, la transferencia de calor y trabajo. Por tanto, la ecuación del balance podría simplificarse a la ecuación [22]. Se tiene en cuenta que  $H_i = U_i + P \cdot \tilde{V}_i$ .

$$\frac{d\hat{E}_{sistema}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{i=1}^n F_{i0} \cdot H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i \cdot H_i \quad [22]$$

Para este caso, al tratarse de un reactor operando en estado estacionario, se anula el término de acumulación de energía. Además, al estar en régimen adiabático y ser un sistema sin agitación, se anulan también los términos de flujo de calor y de trabajo, ecuación [23].

$$\sum_{i=1}^n F_{i0} \cdot H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i \cdot H_i = 0 \quad [23]$$

A continuación, se expresarán los flujos molares en función de la conversión, como en ecuación [24].

$$F_A = F_{A0} \cdot (\theta_i + v_i \cdot X) \quad [24]$$

Sustituyendo la ecuación [24] en la ecuación [23] y aplicándola a la reacción de alquilación, se obtiene la ecuación [25].

$$\sum_{i=1}^n F_{i0} \cdot H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i \cdot H_i = F_{D0} \cdot [(H_{D0} - H_D) + \theta_B \cdot (H_{B0} - H_B) + \theta_{DB} \cdot (H_{DB0} - H_{DB})] - (v_{DB} \cdot H_{DB} - v_D \cdot H_D - v_B \cdot H_B) \cdot F_{D0} \cdot X \quad [25]$$

Al siguiente término se le conoce como calor de reacción a la temperatura T, ecuación [26].

$$\Delta H_{RX}(T) = (v_{DB} \cdot H_{DB} - v_D \cdot H_D - v_B \cdot H_B) \quad [26]$$

Nuevamente, sustituyendo la ecuación [26] en la ecuación [25], se obtiene la siguiente ecuación [27].

$$\sum_{i=1}^n F_{i0} \cdot H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i \cdot H_i = F_{D0} \cdot \sum_{i=1}^n \theta_i \cdot (H_{i0} - H_i) - \Delta H_{RX}(T) \cdot F_{D0} \cdot X = 0 \quad [27]$$

La entalpía molar de la especie i ( $H_i$ ), a una temperatura y presión dadas, despreciando cualquier cambio de entalpía resultante de la mezcla y teniendo en cuenta que no hay cambios de fase, se puede expresar como en la ecuación [28].

$$H_i = H_i^\circ(T_R) + \int_{T_R}^T C_{p_i} dT \quad [28]$$

Por tanto, para calcular el cambio de entalpía cuando un fluido se calienta sin sufrir un cambio de fase, se utiliza la ecuación [29].

$$H_i - H_{i0} = \left[ H_i^\circ(T_R) + \int_{T_R}^T C_{p_i} dT \right] - \left[ H_i^\circ(T_R) + \int_{T_R}^{T_{i0}} C_{p_i} dT \right] = \int_{T_{i0}}^T C_{p_i} dT \quad [29]$$

Sustituyendo la ecuación [29] en la [27] se obtiene la expresión [30].

$$F_{D0} \cdot \sum_{i=1}^n \theta_i \cdot \int_{T_{i0}}^T C_{p_i} dT - \Delta H_{RX}(T) \cdot F_{D0} \cdot X = 0 \quad [30]$$

## 12.1 Entalpía de reacción

El calor de reacción a la temperatura T está expresado en la ecuación [26], en la que sustituyendo la ecuación [28], se obtiene la expresión [31].

$$\Delta H_R = \Delta H_R^\circ + v_{DB} \int_{T_R}^T C_{p_{DB}} dT - v_B \int_{T_R}^T C_{p_B} dT - v_D \int_{T_R}^T C_{p_D} dT \quad [31]$$

Donde la entalpía de reacción estándar se calcula con la ecuación [32].

$$\Delta H_R^\circ = \sum_{i=1}^n v_i \cdot H^\circ_{f i \text{ producto}} - \sum_{i=1}^n v_i \cdot H^\circ_{f i \text{ reactivo}} \quad [32]$$

En la Tabla 9 se muestran los valores obtenidos para las entalpías de formación de cada compuesto a partir de Aspen Hysys, junto con los coeficientes estequiométricos de cada componente en la reacción.

Tabla 9. Datos de entalpías de formación estándar. Fuente: Aspen Hysys

Compuesto	Coefficiente estequiométrico	$\Delta H_f^\circ$ (kJ/kmol)
Benceno	1	82977
Dodeceno	1	-165500
Dodecibenceno	1	-178500

Aplicando los datos de la Tabla 9 en la ecuación [32], se obtiene la entalpía de formación estándar de esta reacción.

$$\Delta H_R^\circ = -95977 \text{ kJ/kmol}$$

## 12.2 Capacidades caloríficas

Como la capacidad calorífica varía con la temperatura, a menudo se expresa como una función cuadrática de la temperatura, como en la ecuación [33].

$$C_p(T) = A \cdot T^2 + B \cdot T + C \quad [33]$$

No se dispone de dichas constantes en bibliografía para los compuestos presentes en esta reacción. Por tanto, se han tomado datos de la capacidad calorífica de cada compuesto a diferentes temperaturas mediante la herramienta de Aspen Hysys y se han ajustado dichos datos a un polinomio de grado 2 mediante Excel. Se tomaron valores cada 5°C desde la temperatura de referencia (25°C) hasta 165°C, mostrados en la Figura 8.

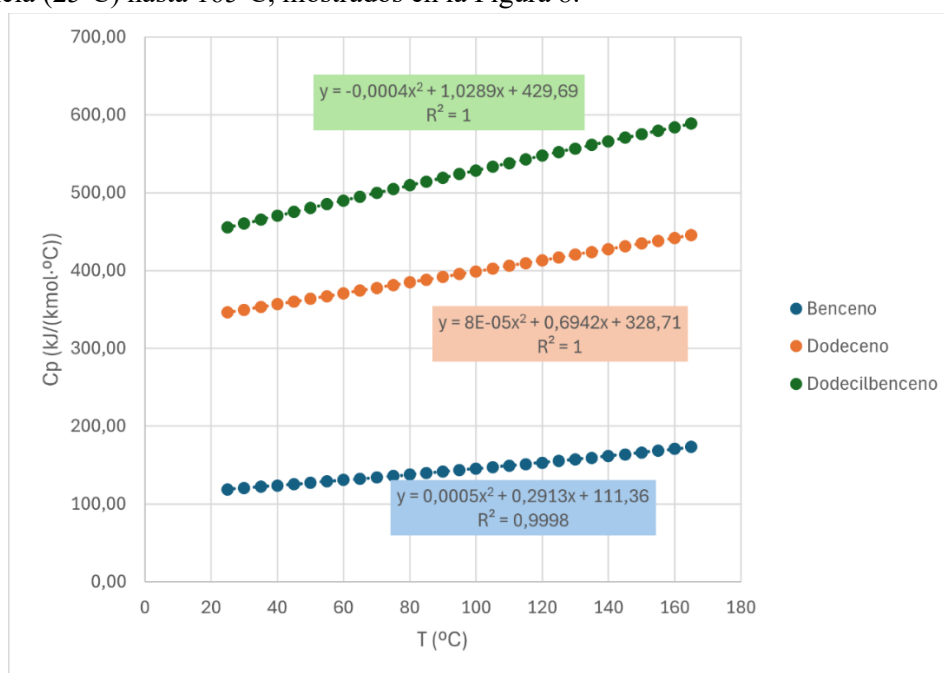


Figura 8. Capacidades caloríficas de los compuestos en función de la temperatura. Fuente: Aspen Hysys

A partir de los datos de la Figura 8 se obtienen las constantes para el cálculo de la capacidad calorífica de cada compuesto en función de la temperatura, presentes en la Tabla 10.

Tabla 10. Constantes para el cálculo de la capacidad calorífica en kJ/(kmol·°C). Fuente: Elaboración propia

Compuesto	A	B	C
Benceno	4,95E-04	0,29	111,36
Dodeceno	7,99E-05	0,69	328,71
Dodecibenceno	-3,96E-04	1,03	429,69

### 12.3 Evolución de la temperatura

Al tratarse de un reactor operando en régimen adiabático, la temperatura va cambiando a lo largo del reactor y al ser una reacción exotérmica, la temperatura de la mezcla irá aumentando a medida que avance por el reactor. Es por tanto de gran importancia conocer la temperatura de salida del reactor, para asegurarse de que es factible operar en régimen adiabático.

Para poder conocer la temperatura de salida del reactor, habrá que despejar la temperatura en el balance de energía, en la ecuación [30]. Se desarrolla dicha expresión del balance para esta reacción concreta en la ecuación [34]. Sin embargo, despejar la temperatura de salida (T) en dicha expresión no resulta sencillo, ya que la capacidad calorífica de los compuestos depende de esta temperatura. Como el cambio de la capacidad calorífica con la temperatura es considerable, no se puede asumir constante. Por ello, se calculará la temperatura de salida del reactor mediante la herramienta de Solver en Excel. Esta herramienta, busca de manera iterativa el valor de la temperatura que iguale el balance a 0.

$$\left( \int_{T_0}^T C_{pD} dT + \theta_B \cdot \int_{T_0}^T C_{pB} dT + \theta_{DB} \cdot \int_{T_0}^T C_{pDB} dT \right) - \left( \Delta H_R^\circ + v_{DB} \int_{T_R}^T C_{pDB} dT - v_B \int_{T_R}^T C_{pB} dT - v_D \int_{T_R}^T C_{pD} dT \right) \cdot X_D = 0 \quad [34]$$

En la Tabla 11 y Tabla 12 se muestran los resultados de los cálculos anteriormente explicados. Para dichos cálculos se empleará una conversión del 95%, selección que se explicará en el apartado 15. Justificación selección de la conversión. Se obtiene que la temperatura de salida del reactor para dicha conversión es de 147,17°C. Por lo que se confirma que es adecuado operar en adiabático ya que el  $\Delta T$  no es muy elevado y las temperaturas se encuentran dentro del rango recomendado.

Tabla 11. Parámetros balance de energía. Fuente: Elaboración propia

Compuestos	$v_i$	$\theta_i$	$\int_{T_R}^T C_{p_i} dT$ (kJ/kmol)	$\int_{T_0}^T C_{p_i} dT$ (kJ/kmol)
Benceno	1	20	17192,05	3551,92
1-Dodeceno	1	1	47545,79	9416,46
Dodecilbenceno	1	1	62899,54	12469,61

Tabla 12. Parámetros balance de energía. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$T_0$ (°C)	125
$\Delta H_r^\circ$ (kJ/kmol)	-95977
$T_R$ (°C)	25
$\sum \theta_i \cdot \int_{T_{i0}}^T C_{p_i} dT$ (kJ/kmol)	92924,53
$\Delta H_R$ (kJ/kmol)	-97815,30
$X_D$	0,95
T (°C)	147,17

A continuación, utilizando el mismo método que para la conversión de salida, se calcula la temperatura de salida del reactor para todas las conversiones. Realizando la representación de estos datos, se obtiene la recta de operación adiabática representada en la Figura 9.

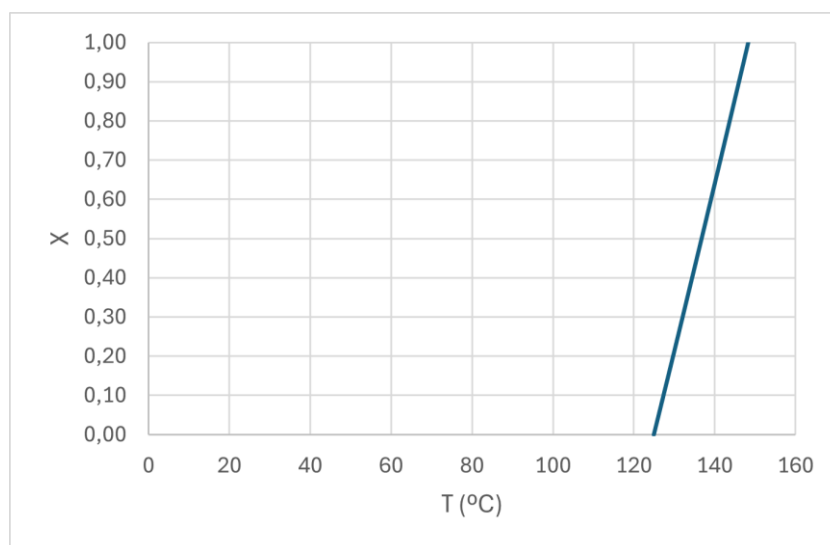


Figura 9. Recta de operación adiabática. Fuente: Elaboración propia

Se ajustan mediante Excel los datos de la recta a la expresión [35], obteniendo los parámetros mostrados en la Tabla 13.

$$X = T \cdot a + b \quad [35]$$

Tabla 13. Parámetros recta adiabática. Fuente: Elaboración propia

a	b
0,0429	-5,366

### 13 Cálculos previos

En este apartado se determinarán propiedades de las mezclas a la entrada y a la salida del reactor que se requerirán para cálculos posteriores del anexo. Para ello, primero se mostrarán en la Tabla 14 las fracciones másicas (w) y molares (x) de las corrientes de entrada y salida al reactor R-101 A/B.

Tabla 14. Fracciones másicas y molares de las corrientes de entrada y salida del reactor. Fuente: Elaboración propia

	Corriente de entrada		Corriente de salida	
	W <sub>i</sub>	X <sub>i</sub>	W <sub>i</sub>	X <sub>i</sub>
Benceno	0,897	0,950	0,854	0,948
Dodeceno	0,097	0,048	0,005	0,002
Dodecibenceno	0,007	0,002	0,141	0,050

A continuación, se muestran las densidades y viscosidades de cada componente en las condiciones de entrada y salida del reactor, Tabla 15.

Tabla 15. Valores de densidad y viscosidad de cada componente. Fuente: Aspen Hysys

Compuestos	Condiciones de entrada		Condiciones de salida	
	$\rho_i$ (kg/m <sup>3</sup> )	$\mu_i$ (cP)	$\rho_i$ (kg/m <sup>3</sup> )	$\mu_i$ (cP)
Benceno	757,47	0,198	728,46	0,160
Dodeceno	679,27	0,364	661,19	0,300
Dodecibenceno	779,97	1,200	763,60	0,908

Una vez se dispone de las propiedades de cada compuesto, es necesario calcular la densidad y la viscosidad de la mezcla. Para calcular las propiedades de una mezcla líquida orgánica se emplean las ecuaciones [36] y [37]. (1)

$$\frac{1}{\rho_{mezcla}} = \sum \frac{w_i}{\rho_i} \quad [36]$$

$$\frac{1}{\mu_{mezcla}} = \sum \frac{w_i}{\mu_i} \quad [37]$$

En la Tabla 16 se muestran los resultados obtenidos para estas propiedades de las mezclas de las corrientes de entrada y salida al reactor, así como la media de ambas.

Tabla 16. Valores de densidad y viscosidad de la mezcla. Fuente: Elaboración propia

	$\rho_{mezcla}$ (kg/m <sup>3</sup> )	$\mu_{mezcla}$ (cP)
<b>Entrada</b>	749,28	0,208
<b>Salida</b>	732,85	0,181
<b>Media</b>	741,065	0,195

## 14 Cálculo de la masa de catalizador

Para poder dimensionar el reactor, se necesita conocer la cantidad de catalizador requerida para alcanzar la conversión fijada. Un reactor de lecho fijo se comporta de manera análoga a un reactor de flujo en pistón, donde la composición del fluido varía progresivamente a lo largo de la trayectoria del flujo. Por lo que su ecuación de diseño es la misma, pero refiriéndose a la masa de catalizador en lugar del volumen del reactor, ecuación [38].

$$\frac{W}{F_{A0}} = \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{-r'_A} \quad [38]$$

Donde:

- W: Masa de catalizador (kg)
- $F_{A0}$ : Flujo molar del reactivo limitante en la alimentación (kmol/h)
- $X_A$ : Conversión
- $-r'_A$ : Velocidad global de reacción (kmol/(kg cat·h))

Para calcular dicha integral se utilizará el método de los trapecios, un método de integración numérica que permite calcular de manera aproximada el valor de una integral definida, siguiendo la ecuación [39].

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \cdot \left( \frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right) \quad [39]$$

Donde:

- a: Límite inferior de la integral
- b: Límite superior de la integral
- $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$
- $x_i = a + \frac{b-a}{n} \cdot i$  para  $i=0, 1, \dots, n$
- $h = \frac{b-a}{n}$

Se calculará la velocidad de reacción global para diferentes conversiones desde 0 a 0,95 con un paso de 0,01, utilizando la ecuación [40], que se obtuvo de la combinación de las ecuaciones [12]

y [14]. La decisión de dicha conversión se justificará en el apartado 15. Justificación selección de la conversión. Para ello es necesario conocer la temperatura de reacción, que depende de la conversión. Por tanto, se hará la media entre la temperatura de entrada (125°C) y la de salida, que se obtuvo en el apartado de 12.3 Evolución de la temperatura.

$$-r_D = \left( k_{2-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{2-LAB}}{RT}\right)} + k_{3-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{3-LAB}}{RT}\right)} + k_{4-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{4-LAB}}{RT}\right)} + k_{5-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{5-LAB}}{RT}\right)} + k_{6-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{6-LAB}}{RT}\right)} \right) \cdot C_{D,0} \cdot (1 - X_D) \cdot (C_{B,0} - C_{D,0} \cdot X_D) \quad [40]$$

Además, es necesario conocer las concentraciones iniciales del benceno y dodeceno, que se calcularán a partir de las ecuaciones [41] y [42].

$$C_{i0} = \frac{F_{i0}}{\dot{V}} \quad [41]$$

$$\dot{V} = \frac{\dot{m}}{\rho_{mezcla,0}} \quad [42]$$

Donde:

- $C_{i0}$ : Concentración molar en la alimentación del componente i (kmol/m<sup>3</sup>)
- $F_{i0}$ : Flujo molar de alimentación del componente i (kmol/h)
- $\dot{V}$ : Flujo volumétrico de la corriente de alimentación (m<sup>3</sup>/h)
- $\dot{m}$ : Flujo másico total de la corriente de alimentación (kg/h)
- $\rho_{mezcla}$ : Densidad global de la corriente de alimentación (kg/m<sup>3</sup>)

Una vez se tienen calculadas todas las velocidades de reacción, se calcula la integral de la ecuación [38], mediante la ecuación [39]. Finalmente, para obtener el valor de la masa de catalizador se multiplica el resultado de la integral por el flujo molar del dodeceno. En la Tabla 17 se muestran los cálculos realizados para obtener dicha masa de catalizador.

Tabla 17. Cálculo masa de catalizador. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$F_{D0}$ (kmol/h)	7,23
$F_{B0}$ (kmol/h)	144,57
$\dot{m}$ (kg/h)	12593,51
$\rho_{mezcla,0}$ (kg/m <sup>3</sup> )	749,28
$\dot{V}$ (m <sup>3</sup> /h)	16,81
$C_{D0}$ (kmol/m <sup>3</sup> )	0,43
$C_{B0}$ (kmol/m <sup>3</sup> )	8,60
$\int_0^{0,95} \frac{dX}{-r'_D}$ (kmol/(kg cat·h))	336,65
W (kg catalizador)	2433,45

## 15 Justificación selección de la conversión

Para seleccionar la conversión, se realizará una representación de la conversión frente a la inversa de la velocidad de reacción, Figura 10, calculada ya anteriormente mediante la ecuación [40]. Esto es porque, como se puede apreciar en la ecuación [38], la cantidad de catalizador es proporcional a la inversa de la velocidad.

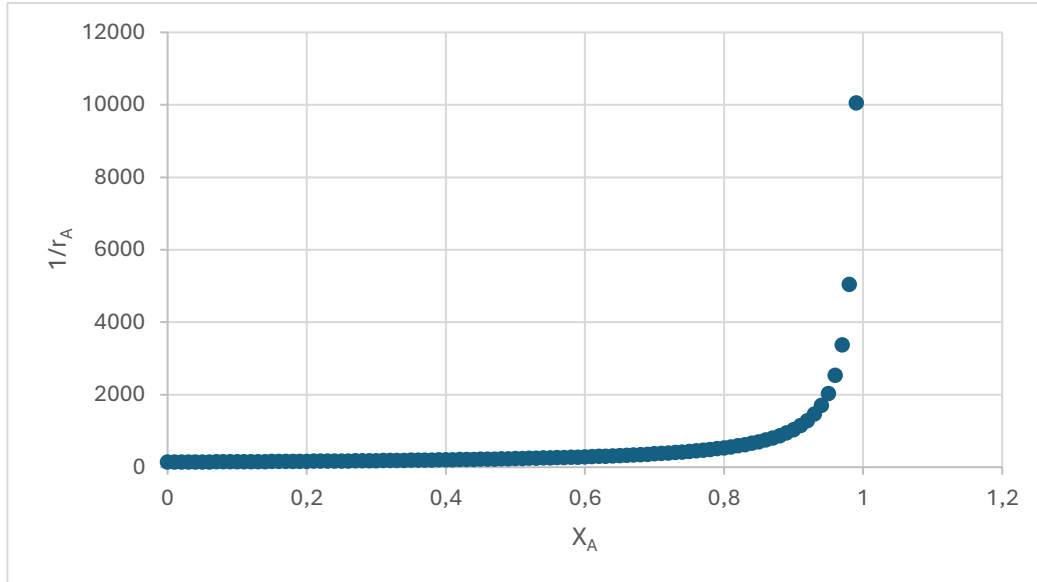


Figura 10. Representación de la conversión frente a la inversa de la velocidad. Fuente: Elaboración propia

En la Figura 10 se puede ver como a conversiones próximas al 100%, la velocidad de reacción disminuye drásticamente, lo que conlleva a requerir una elevada cantidad de catalizador. Por tanto, hay que buscar una solución de compromiso que maximice la conversión sin requerir una gran cantidad de catalizador. El punto óptimo seleccionado será una conversión del 95%.

Una vez se dispone de la conversión final, las velocidades de reacción y temperaturas de salida, se realiza el mapa de reacción, Figura 11. Este gráfico muestra si es posible alcanzar la conversión deseada con las condiciones fijadas, y a qué velocidades reaccionaría a lo largo del sistema.

En el mapa de reacción, se representa para diferentes velocidades la temperatura frente a la conversión de reacción. Para ello, es necesario despejar el término de la conversión en la ecuación [40]. Para facilitar el cálculo se hará la sustitución de la ecuación [43].

$$K_{LAB} = \left( k_{2-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{2-LAB}}{R \cdot T}\right)} + k_{3-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{3-LAB}}{R \cdot T}\right)} + k_{4-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{4-LAB}}{R \cdot T}\right)} + k_{5-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{5-LAB}}{R \cdot T}\right)} + k_{6-LAB} \cdot e^{\left(-\frac{E_{6-LAB}}{R \cdot T}\right)} \right) \quad [43]$$

Obteniendo la ecuación [44] de la que habrá que despejar  $X_D$ , obteniendo la ecuación [45].

$$-r_D = K_{LAB} \cdot C_{D,0} \cdot (1 - X_D) \cdot (C_{B,0} - C_{D,0} \cdot X_D) \quad [44]$$

$$X_D = \frac{K_{LAB} \cdot C_{D,0} \cdot (C_{D,0} + C_{B,0}) \pm \sqrt{\left(K_{LAB} \cdot C_{D,0} \cdot (C_{D,0} + C_{B,0})\right)^2 - 4 \cdot K_{LAB} \cdot C_{D,0}^2 \cdot (K_{LAB} \cdot C_{D,0} \cdot C_{B,0} - (-r_D))}}{2 \cdot K_{LAB} \cdot C_{D,0}^2} \quad [45]$$

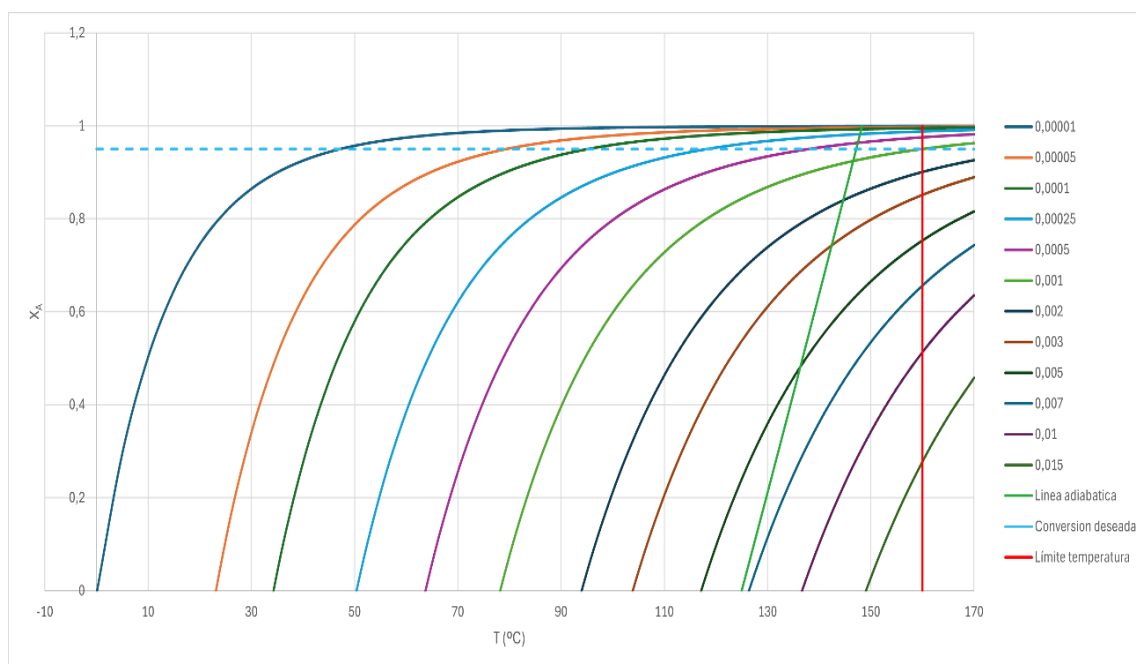


Figura 11. Mapa de reacción. Fuente: Elaboración propia

En la Figura 11 se puede ver que la recta de operación adiabática (línea verde) llega a la recta de conversión deseada (línea azul punteada) sin llegar a aproximarse al límite de temperatura (línea roja). Por lo que finalmente se confirma que las condiciones y el modo de operación son adecuados.

## 16 Dimensionamiento del reactor

El dimensionamiento del reactor consiste en establecer las medidas del lecho catalítico y su respectivo recipiente a partir de la masa de catalizador calculado en el apartado 14. Cálculo de la masa de catalizador.

Primeramente, cabe mencionar que se realizará un sobredimensionamiento del 15% de la masa de catalizador calculada teóricamente. Se toma esta decisión con el objetivo de garantizar la producción de dodecibenceno fijada, compensando posibles desviaciones operacionales, desactivación del catalizador o por una incorrecta distribución del flujo.

El volumen del lecho catalítico se obtiene relacionando la masa de catalizador con la densidad del lecho, disponible en el apartado 3. Selección y caracterización del catalizador, mediante la ecuación [46].

$$V_{lecho} = \frac{W}{\rho_{lecho}} \tag{46}$$

En la Tabla 18 se pueden observar los parámetros obtenidos en el cálculo del volumen del lecho catalítico.

Tabla 18. Cálculo volumen del lecho catalítico. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
W (kg de catalizador)	2433,45
Factor sobredimensionamiento (%)	15
W sobredimensionado (kg de catalizador)	2798,46
$\rho_{lecho}$ (kg/m <sup>3</sup> )	530
$V_{lecho}$ (m <sup>3</sup> )	5,28

A partir del volumen del lecho se pueden establecer las dimensiones de este. El reactor tendrá una forma cilíndrica, por lo que seguirá la siguiente ecuación [47].

$$V_{lecho} = \pi \cdot \frac{D_{lecho}^2}{4} \cdot L_{lecho} \quad [47]$$

Se fijará una relación L/D y a partir de esta se calcularán las dimensiones del lecho. Según las heurísticas (19) la relación L/D recomendada para este tipo de recipientes es entre 2 y 5. Para este caso, al tener un caudal volumétrico bajo, se tratará de maximizar la velocidad del fluido y por tanto se busca un diámetro bajo, por lo que la relación L/D será de 5. Asimismo, un diámetro bajo favorecerá el flujo axial de los reactivos y productos. Se utiliza la ecuación [48] para determinar las dimensiones y en la

Tabla 19 se presentan dichos cálculos.

$$D_{lecho} = \left( \frac{V_{lecho} \cdot 4}{\pi \cdot \frac{L_{lecho}}{D_{lecho}}} \right)^{1/3} \quad [48]$$

Tabla 19. Dimensionamiento del lecho catalítico. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$V_{lecho}$ (m <sup>3</sup> )	5,28
L/D	5,00
$D_{lecho}$ (m)	1,10
$L_{lecho}$ (m)	5,52

Se comprueba que los valores de longitud y diámetro se encuentran dentro de los rangos recomendados por las heurísticas, pues el diámetro debería estar entre 0,3 y 2 m, y la longitud entre 2 y 10 m. (19)

A partir de las dimensiones del lecho se pueden obtener las dimensiones del reactor, mostradas en la Tabla 20. Habitualmente, el diámetro del lecho coincide con el diámetro interno del reactor. Sin embargo, el reactor requiere de un espacio libre en la parte superior e inferior del lecho para accesorios internos, que se aproximará a un 30% adicional de longitud. (19)

Tabla 20. Dimensionamiento del reactor. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$D_{reactor}$ (m)	1,10
$L_{reactor}$ (m)	7,17
$V_{reactor}$ (m <sup>3</sup> )	6,86

## 17 Comprobación parámetros del reactor

Se calculará la velocidad del fluido por el lecho mediante las ecuaciones [49] y [50]. En la Tabla 21 se presentan los resultados para dichos cálculos.

$$u_{superficial} = \frac{\dot{V}}{A_{lecho}} \quad [49]$$

$$u_{real} = \frac{v_{superficial}}{\varepsilon} \quad [50]$$

Donde:

- $u_{superficial}$ : velocidad superficial del fluido (m/s)
- $\dot{V}$ : Flujo volumétrico del fluido (m<sup>3</sup>/s)
- $A_{lecho}$ : Área transversal del lecho (m<sup>2</sup>)
- $u_{real}$ : velocidad real del fluido (m/s)
- $\varepsilon$ : Porosidad

Tabla 21. Cálculo de la velocidad del fluido. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$A_{lecho}$ (m <sup>2</sup> )	0,96
$\dot{V}$ (m <sup>3</sup> /s)	0,0048
$u_{superficial}$ (m/s)	0,0050
$\varepsilon$	0,63
$u_{real}$ (m/s)	0,0079

Se ha calculado también el tiempo de residencia del fluido ( $\tau$ ) en el reactor para comprobar si se encuentra dentro de los valores recomendados. Se ha empleado la ecuación [51] y se ha obtenido un valor de 16,39 min. Dicho valor se encuentra dentro del rango recomendado para reactores industriales de estas condiciones, que es entre 0,5 s a 1 h (5).

$$\tau = \frac{V_{lecho}}{\dot{V}} \quad [51]$$

## 17.1 Caída de presión

Un parámetro importante a tener en cuenta en el diseño del reactor de lecho fijo es la caída de presión generada por el rozamiento del fluido con el lecho catalítico sólido. Este parámetro se calcula mediante la ecuación de Ergun, ecuación [52].

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{150 \cdot (1 - \varepsilon)^2 \cdot \mu \cdot u}{\varepsilon^3 \cdot d_p^2} + \frac{1,75 \cdot (1 - \varepsilon) \cdot \rho \cdot u^2}{\varepsilon^3 \cdot d_p} \quad [52]$$

Donde:

- $\Delta P$ : Caída de presión (Pa)
- $L$ : Altura del lecho (m)
- $\varepsilon$ : Porosidad
- $D_p$ : Diámetro de la partícula (m)
- $\mu$ : Viscosidad media de la mezcla en las condiciones de operación (kg/(m·s))
- $\rho$ : Densidad media de la mezcla en las condiciones de operación (kg/m<sup>3</sup>)
- $u$ : Velocidad real del fluido (m/s)

Para poder aplicar la ecuación de Ergun, se necesita la densidad y la viscosidad media de la mezcla a lo largo del reactor, mostrada en la Tabla 16. En la Tabla 22 se muestran los cálculos para la obtención de la caída de presión en el lecho.

Tabla 22. Cálculos de la caída de presión. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
L (m)	5,52
$\varepsilon$	0,63
$\mu$ (kg/(m·s))	0,00019
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	741,07
D <sub>p</sub> (mm)	4,7
u <sub>real</sub> (m/s)	0,0079
$\Delta P/L$ (Pa/m)	30,83
$\Delta P$ (Pa)	170,15

La caída de presión obtenida es de 0,17 kPa, un valor bastante bajo, que se considera adecuado.

## 18 Diseño mecánico

En este apartado se llevará a cabo el diseño mecánico de los reactores R-101 A/B, siguiendo las explicaciones y ecuaciones explicadas en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones generales*.

Como se mencionaba anteriormente, estos reactores se considerarán como un recipiente cilíndrico a presión interna, puesto que los fluidos contenidos en este se encuentran a 10 bar, una presión superior a la atmosférica. Es por ello que, para la realización de este diseño, se seguirá la normativa *ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII, Rules for the Construction of Pressure Vessels (ASME BPV Code Sec. VIII)*.

### 18.1 Selección del material

En el apartado 2. *Selección del material* de la *Parte A: Anexo II. Cálculos Justificativos* se explica detalladamente la selección del material para la carcasa de los reactores R-101 A/B. Para la selección del material de construcción se aplica la metodología Ashby, explicada con detalle en dicha parte del anexo.

Este recipiente a presión se diseña siguiendo el criterio *Leak before break*, es decir, vertido antes de ruptura, con el objetivo de maximizar la seguridad de este. Finalmente, teniendo en cuenta el criterio seleccionado, la compatibilidad química del material con los reactivos presentes, las condiciones de operación y el coste, el material seleccionado será el acero inoxidable 304.

### 18.2 Presión de diseño

Según el código de diseño seguido, la presión de diseño se calcula empleando el mayor de los valores obtenidos con las *Ecuaciones [4] y [5]* de la *Parte A: Consideraciones generales*. En la Tabla 23 se muestran los resultados obtenidos con ambas ecuaciones. Se establece por tanto una presión de diseño de 11,72 bar.

Tabla 23. Cálculo de la presión de diseño. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
P <sub>operación</sub> (bar)	10
P <sub>diseño 1</sub> (bar)	11
P <sub>diseño 2</sub> (bar)	11,72

### 18.3 Temperatura de diseño

Según el Código ASME BPV, la temperatura de diseño se obtiene sobredimensionando la temperatura máxima de operación, sumándole 50°F, como se muestra en la *Ecuación [6]* de la *Parte A: Consideraciones generales*. En la Tabla 24 se muestra el cálculo de dicha temperatura de diseño.

Tabla 24. Cálculo de la temperatura de diseño. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$T_{\text{máx}}$ (°C)	147,17
$T_{\text{diseño}}$ (°C)	174,95

### 18.4 Espesor de la carcasa

Según el Código ASME BPV Sec. VIII Div. 1 el espesor mínimo requerido para resistir la presión interna de la carcasa de los reactores R-101 A/B será el mayor de los espesores de la sección radial y longitudinal, calculados con las *Ecuaciones [7] y [8]* de la *Parte A: Consideraciones generales*. Para aplicar dichas ecuaciones es necesario conocer el esfuerzo máximo permisible del material a la temperatura de diseño y la eficiencia de unión soldada, que se obtienen de las *Figuras 3 y 4* de la *Parte A: Consideraciones generales*.

Una vez se dispone del mayor de esos dos espesores, hay que añadirle el espesor debido a la corrosión que, en este caso, al no presentar fluidos altamente corrosivos, será de 2 mm. En la Tabla 25 se muestran los cálculos para la obtención del espesor de la carcasa de los reactores R-101 A/B.

Tabla 25. Parámetros y cálculos de los espesores mínimos requeridos. Fuente: Elaboración propia a partir de (1)

Parámetro	Valor
$D_i$ (m)	1,10
$P_i$ (MPa)	1,17
$S$ (MPa)	88,94
$E$	1,00
$t_{\text{radial}}$ (mm)	7,33
$t_{\text{longitudinal}}$ (mm)	3,63
Corrosión permisible (mm)	2,00
$t_{\text{reactor}}$ (mm)	9,33

Con el valor final del espesor del reactor, se comprueba que es mayor que el espesor mínimo mostrado en la *Tabla 4* de la *Parte A: Consideraciones generales* (7 mm), por lo que se confirma que este valor es adecuado.

### 18.5 Selección de la orientación

La orientación de los reactores R-101 A/B será vertical, pues es la configuración más adecuada para reactores de lecho fijo que trabajan con fases solido- líquido. De esta manera, la gravedad favorece un flujo uniforme y bien distribuido a través del lecho, reduciendo la aparición de canalizaciones y zonas muertas. (20)

### 18.6 Selección y dimensionamiento de los cabezales

Los extremos de los reactores R-101 A/B, al igual que cualquier recipiente cilíndrico, se cierran mediante cabezales. Los cabezales más habituales son los cabezales planos, hemisféricos, elípticos y torisféricos. Uno de los criterios a tener en cuenta para la selección del tipo de cabezal es el espesor mínimo requerido de este. Según el Código ASME BPV Sec. VIII Div. 1, estos espesores se calculan con las Ecuaciones [9], [10] y [11] de la Parte A: Consideraciones generales.

En la Tabla 26 se muestran los cálculos de los espesores para los diferentes tipos de cabezales abombados, los parámetros empleados coinciden con los seleccionados para el cálculo del espesor de la carcasa del reactor.

Tabla 26. Cálculo espesores mínimos de los cabezales. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$D_i$ (m)	1,10
$P_i$ (MPa)	1,17
$S$ (MPa)	88,94
$E$	1,00
$R_c$ (m)	1,10
$t_{\text{hemisférico}}$ (mm)	3,64
$t_{\text{elíptico}}$ (mm)	7,28
$t_{\text{torisférico}}$ (mm)	12,89

Se ha seleccionado un cabezal elíptico, a pesar de que la presión de diseño (11,72 bar) se encuentra dentro del rango máximo de presión aceptada para los cabezales torisféricos (15 bar). Esta decisión se basa en tomar un mayor margen de seguridad ante posibles incrementos de presión y que su espesor requerido es aproximadamente la mitad del que requeriría un cabezal torisférico. Además, el espesor del cabezal elíptico es muy próximo al de la carcasa del reactor, lo que facilita su integración con la carcasa. El cabezal hemisférico, a pesar de ser el que requiere un menor espesor, se descarta debido a que presenta un coste muy superior, ya que está diseñado para presiones elevadas.

Finalmente, el cabezal seleccionado será el elíptico con un espesor de 9,28 mm, pues hay que añadirle al valor calculado el espesor debido a la corrosión. Su material de construcción será el mismo que el del reactor, acero inoxidable AISI 304. Se dimensiona el cabezal elíptico 2:1 siguiendo la norma DIN 28013, con las ecuaciones [53], [54], [55], [56], [57] y [58]. (21)

$$D_0 = D_i + 2 \cdot t \quad [53]$$

$$CR = 0,8 \cdot D_0 \quad [54]$$

$$KR = 0,154 \cdot D_0 \quad [55]$$

$$SF = 3 \cdot t \quad [56]$$

$$DH = 0,255 \cdot D_0 - 0,635 \cdot t \quad [57]$$

$$TH_i = SF + DH \quad [58]$$

Donde:

- $D_0$ : Diámetro exterior del cabezal
- $D_i$ : Diámetro interior del cabezal
- $CR$ : Radio de la corona
- $KR$ : Radio del borde
- $SF$ : Altura del faldón recto
- $DH$ : Profundidad del abombamiento
- $TH_i$ : Altura total interna del cabezal
- $t$ : Espesor de la pared

Dichos parámetros se representan en la Figura 12 y se muestran dichos cálculos en la Tabla 27. (21)

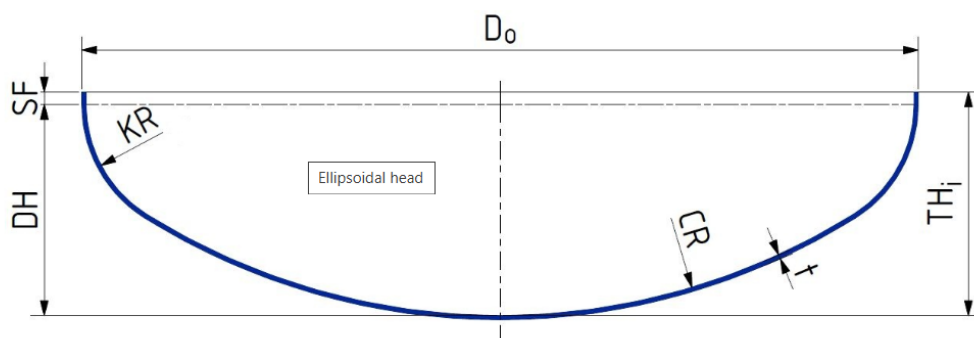


Figura 12. Esquema dimensionamiento cabezal elíptico. Fuente:(21)

Tabla 27. Dimensionamiento del cabezal elíptico. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$D_i$ (m)	1,10
$t$ (mm)	9,28
$D_0$ (m)	1,12
$CR$ (m)	0,90
$KR$ (m)	0,17
$SF$ (mm)	27,85
$DH$ (m)	0,28
$TH_i$ (m)	0,31

## 18.7 Diseño del aislante

Dado que los reactores R-101 A/B operan en régimen adiabático, requieren de un aislamiento térmico. Esto se debe a que la velocidad de reacción y la conversión obtenidas dependen directamente de la temperatura. Por lo tanto, cualquier pérdida de calor provocaría desviaciones en el producto obtenido. Además, un aislante es un elemento de seguridad que evita el riesgo de quemaduras al entrar en contacto con los reactores.

La transmisión de calor entre dos cuerpos siempre fluye desde el cuerpo con mayor temperatura hacia el de menor temperatura. Para este caso, la reacción que transcurre en los reactores es

exotérmica, es decir, libera calor, y además opera a temperaturas altas. Por lo tanto, al encontrarse el reactor a mayor temperatura que el entorno, la transmisión de calor irá desde reactor hacia el exterior.

Existen tres mecanismos de transmisión de calor, pero en este sistema se tendrán en cuenta dos: la conducción y la convección.

La conducción consiste en el transporte de energía en un medio debido a un gradiente de temperatura, y su mecanismo físico es el de la actividad aleatoria atómica o molecular. La ecuación que rige este proceso de transferencia de calor es la Ley de Fourier, ecuación [59]. (22)

$$q = k \cdot A \cdot \frac{dT}{dx} \quad [59]$$

Mientras que, en la convección, la transferencia de calor se produce en un fluido debido a dos mecanismos simultáneos, al movimiento molecular aleatorio y al movimiento global o macroscópico del fluido. Existen dos tipos de convección, la natural y la forzada. La ecuación que modela la convección es la Ley de enfriamiento de Newton, ecuación [60]. (22)

$$q = h \cdot A \cdot (T_s - T_\infty) \quad [60]$$

Donde:

- q: Calor transmitido (W)
- k: Conductividad térmica del material (W/m·K)
- A: Área de transferencia de calor (m<sup>2</sup>)
- $\frac{dT}{dx}$ : Gradiente de temperatura en la dirección del flujo (°C/m)
- h: Coeficiente de transferencia de calor por convección (W/m<sup>2</sup>·°C)
- T<sub>s</sub>: Temperatura de la superficie del cuerpo (°C)
- T<sub>∞</sub>: Temperatura del fluido circulante (°C)

El sistema estudiado consiste en el reactor de acero inoxidable recubierto del aislante, como se muestra en la Figura 13.

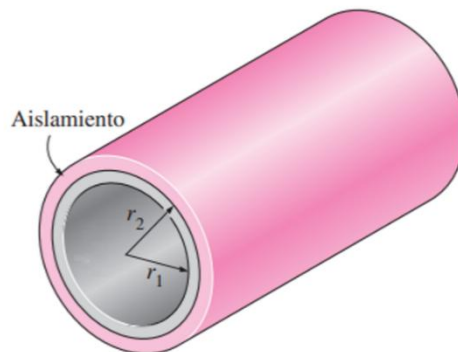


Figura 13. Esquema reactor con el aislante. Fuente:(23)

Por tanto, la transferencia de calor en el sistema tiene lugar por conducción a través de la pared del reactor, por conducción en la pared del aislante y por convección en el aire exterior. Es importante tener en cuenta que se trata de una pared cilíndrica.

Para facilitar el diseño del aislante se aplicará la analogía eléctrica. Esta establece una relación entre las leyes de transmisión de calor (Ley de Fourier [59] y del enfriamiento de Newton [60]), con la ley de Ohm [61], propia de los circuitos eléctricos.

$$I = \frac{\Delta V}{R} \quad [61]$$

En la Tabla 28 se muestran las correspondencias de dicha analogía y la ecuación [62] presenta la equivalencia a la ley de Ohm en transferencia de calor.

Tabla 28. Analogía de la transferencia de calor a un circuito eléctrico. Fuente: Elaboración propia a partir de (23)

Sistema térmico	Sistema eléctrico
Transferencia de calor	Corriente eléctrica
Resistencia térmica	Resistencia eléctrica
Diferencia de temperatura	Caída de voltaje

$$q = \frac{\Delta T}{R_{t\acute{e}rmica}} \tag{62}$$

Para la transferencia de calor por convección, la ley de Newton del enfriamiento (ecuación [60]), se puede ajustar para que tenga la estructura de la ley de Ohm, ecuación [63].

$$q = \frac{T_s - T_\infty}{R_{conv}} \tag{63}$$

Donde la resistencia térmica de la superficie a la convección es la ecuación [64].

$$R_{conv} = \frac{1}{h \cdot A} \tag{64}$$

Por otro lado, la conducción en la pared del reactor y en la del aislante, es a través de una pared cilíndrica, por tanto, se rige por la ecuación [65] y la resistencia térmica a la conducción en una pared cilíndrica es [66].

$$q = \frac{(T_{s,1} - T_{s,2})}{\frac{\ln \frac{r_2}{r_1}}{2 \cdot \pi \cdot L \cdot k}} \tag{65}$$

$$R_{cond,c} = \frac{\ln \frac{r_2}{r_1}}{2 \cdot \pi \cdot L \cdot k} \tag{66}$$

Por tanto, el sistema a estudiar se trata de transferencia de calor a través de paredes compuestas, es decir, varias capas de materiales diferentes. Para facilitar el cálculo se puede usar el concepto de resistencias térmicas conectadas en serie, análogo al de las resistencias eléctricas conectadas en serie, ecuación [67].

$$q = \frac{\Delta T}{\sum R_t} \tag{67}$$

Se muestra en la Figura 14 el esquema del problema de paredes compuestas analizado.

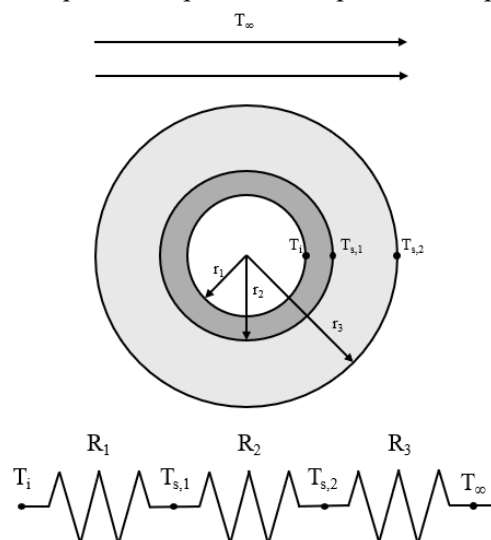


Figura 14. Esquema del circuito térmico estudiado. Fuente: Elaboración propia a partir de (22)

De esta manera se puede realizar el diseño del aislante conociendo únicamente la temperatura de la pared interna del reactor y la del aire ambiente. Se asumirá que la temperatura de la pared interna del reactor es igual a la temperatura en el interior del reactor y que la transferencia de calor solamente tiene lugar en la dirección radial. Teniendo en cuenta las anteriores consideraciones, la ecuación a aplicar será [68].

$$q = \frac{T_i - T_\infty}{\frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{k_{reactor} \cdot 2 \cdot \pi \cdot L} + \frac{\ln\left(\frac{r_3}{r_2}\right)}{k_{aislante} \cdot 2 \cdot \pi \cdot L} + \frac{1}{h_\infty \cdot 2 \cdot \pi \cdot r_3 \cdot L}} \quad [68]$$

Donde:

- q: Flujo de calor (W)
- $T_i$ : Temperatura pared interna del reactor (°C)
- $T_\infty$ : Temperatura del aire ambiente (°C)
- $r_1$ : Radio interno del reactor (m)
- $r_2$ : Radio externo del reactor (m)
- $r_3$ : Radio externo del aislante (m)
- $k_{reactor}$ : Conductividad térmica del material del reactor, acero inoxidable 304 (W/m·K)
- $k_{aislante}$ : Conductividad térmica del aislante seleccionado (W/m·K)
- $h_\infty$ : Coeficiente de convección térmica del aire ambiente (W/m<sup>2</sup>·K)
- L: Altura del reactor (m)

### 18.7.1 Caracterización del aire ambiente

Para definir la resistencia térmica a la convección, es necesario caracterizar las condiciones del aire ambiente. Con el objetivo de diseñar un sistema de aislamiento más seguro, se considerará una corriente de aire a la mínima temperatura y con la máxima velocidad de viento registradas históricamente en Tarragona. De esta forma, la resistencia a la transmisión de calor del aire será la mínima posible y las pérdidas de calor, máximas. Garantizando así el funcionamiento eficiente del aislante para cualquier tipo de condición meteorológica. Se muestran los parámetros característicos de esta corriente de aire en la Tabla 29.

Tabla 29. Propiedades del aire ambiente. Fuentes: (24, 25)

Parámetro	Valor
Presión, P (kPa)	101,33
Temperatura, $T_\infty$ (°C)	-6,50
Velocidad viento, u (m/s)	33,33
Densidad, $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1,32
Viscosidad, $\mu$ (Pa·s)	1,75E-05
Conductividad térmica, k (W/(m·°C))	0,02
Capacidad calorífica, $C_p$ (J/kg·°C)	987,11

Se necesita calcular el coeficiente de convección del aire mediante la correlación adecuada. Como el movimiento del aire es provocado por factores externos, se considerará un sistema de convección forzada alrededor de un cilindro. Las correlaciones disponibles para este caso se muestran en la Tabla 30.

Tabla 30. Correlaciones para convección forzada, flujo exterior alrededor de un cilindro. Fuente: (22)

Correlación	Expresión	Condiciones
Hilpert	$\overline{Nu}_D = C \cdot Re_D^m \cdot Pr^{1/3}$	$0,4 \leq Re_D \leq 4 \cdot 10^5$ $Pr \geq 0,7$
Zukauskas	$\overline{Nu}_D = C \cdot Re_D^m \cdot Pr^n \cdot \left(\frac{Pr}{Pr_s}\right)^{1/4}$	$1 \leq Re_D \leq 10^6$ $0,7 \leq Pr \leq 500$
Churchill-Bernstein	$\overline{Nu} = 0,3 + \frac{0,62 \cdot Re_D^{1/2} \cdot Pr^{1/3}}{\left[1 + \left(\frac{0,4}{Pr}\right)^{2/3}\right]^{1/4}} \cdot \left[1 + \left(\frac{Re_D}{282000}\right)^{5/8}\right]^{4/5}$	$Pr \cdot Re_D > 0,2$

Para conocer qué correlación es la adecuada, es necesario calcular el número Reynolds y Prandtl, ecuaciones [69] y [70].

$$Re_D = \frac{\rho \cdot u \cdot D}{\mu} \quad [69]$$

$$Pr = \frac{C_p \cdot \mu}{k} \quad [70]$$

A partir del número Nusselt que se calcula con la correlación de Churchill-Bernstein de la Tabla 30, se obtiene el coeficiente de convección, según la ecuación [71].

$$Nu = \frac{h \cdot D}{k_f} \quad [71]$$

En la Tabla 31 se muestran los cálculos necesarios para la obtención del coeficiente de convección del aire ambiente.

Tabla 31. Parámetros para el cálculo del coeficiente de convección del aire. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$Re_D$	2,66E+06
$Pr$	0,77
$Pr \cdot Re_D$	2,05E+06 (> 0,2)
$Nu$	2998,99
$h_\infty$ (W/(m <sup>2</sup> ·°C))	63,61

### 18.7.2 Caracterización del reactor

Los datos del reactor necesarios para el cálculo de la resistencia a la conducción de su pared se calcularon en apartados anteriores, pero se muestra un resumen en la Tabla 32.

Tabla 32. Caracterización de los reactores R-101 A/B. Fuente: Elaboración propia a partir de (22)

Parámetro	Valor
Radio interno, $r_1$ (m)	0,55
Radio externo, $r_2$ (m)	0,56
Espesor, $t$ (mm)	9,33
Conductividad térmica, $k_{\text{reactor}}$ (W/m $\cdot$ °C)	14,90
Temperatura interna, $T_i$ (°C)	147,17
Altura, $L$ (m)	7,17

### 18.7.3 Pérdidas sin aislante

Para conocer las máximas pérdidas de calor que se podrían producir en el sistema, se calculará el flujo de calor que saldría del sistema si no estuviera aislado el reactor. Para ello, se empleará la ecuación [68], pero anulando el término de la resistencia a la conducción del aislante. En la Tabla 33 se muestran dichos cálculos.

Tabla 33. Cálculo pérdidas de calor sin aislante. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$Q_{\text{sin aislante}}$ (kW)	236,34

### 18.7.4 Elección del aislante y espesor

El objetivo de colocar un aislante a los reactores R-101 A/B es minimizar las pérdidas de calor de los reactores. Para ello, el aislante debe ser de materiales con una conductividad térmica muy baja, de forma que su resistencia térmica por conducción sea elevada. Asimismo, otro factor importante es la densidad del material, puesto que su peso no debe comprometer la estabilidad del reactor.

Entre los principales materiales aislantes empleados en la industria hay que destacar la lana de roca, la fibra de vidrio, la fibra cerámica y el silicato de calcio (26). Para este caso el material seleccionado para el aislante de los reactores R-101 A/B será la fibra de vidrio, concretamente el modelo Fiberglas Thermal Insulating Wool (TIW) Type I-HP de la empresa Owens Corning (27). Este material destaca por su baja conductividad térmica y densidad, además de una temperatura máxima de servicio bastante elevada. En la Tabla 34 se muestran sus principales propiedades.

Tabla 34. Propiedades del aislante Fiberglas Thermal Insulating Wool Type I-HP. Fuente: (27)

Parámetro	Valor
Densidad, $\rho$ (kg/m $^3$ )	16,10
Conductividad térmica, $k_{\text{aislante}}$ (W/m $\cdot$ °C)	0,06
Máxima temperatura de servicio, $T_{\text{máx}}$ (°C)	538

Una vez seleccionado el material del aislante es necesario determinar su espesor. Para ello, se calcularán las pérdidas de calor generadas con diferentes espesores mediante la ecuación [68], mostrando la gráfica en la Figura 15.

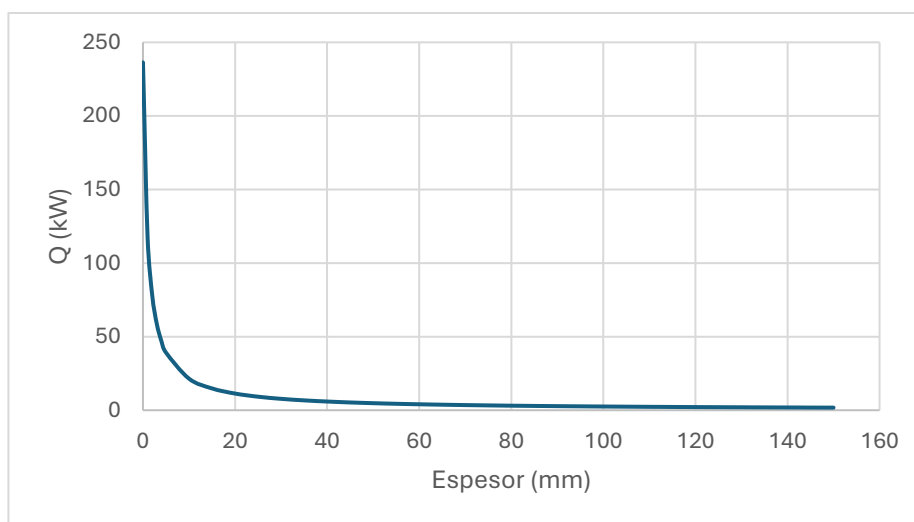


Figura 15. Pérdidas de calor en función del espesor del aislante. Fuente: Elaboración propia

Asimismo, se calcula el porcentaje de reducción de calor generado por el aislante mediante la ecuación [72] y se muestra en la Figura 16 una gráfica con dichos resultados.

$$\% \text{ Reducción pérdidas de calor} = \frac{Q_{\text{sin aislante}} - Q_{\text{con aislante}}}{Q_{\text{sin aislante}}} \cdot 100 \quad [72]$$

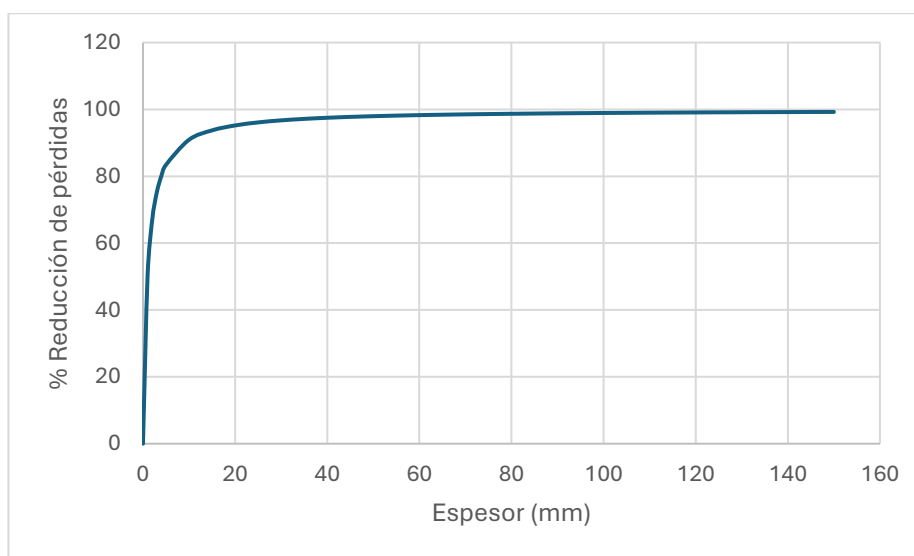


Figura 16. Porcentaje de reducción de pérdidas de calor en función del espesor del aislante. Fuente: Elaboración propia

Debido a que el aislante se comercializa únicamente en espesores estándar, habrá que seleccionar uno de los siguientes: 1”, 1,5”, 2”, 3” o 4”. Por tanto, analizando como varía el porcentaje de reducción de las pérdidas de calor en función del espesor del aislante, se seleccionará un espesor de 25,4 mm (1”) puesto que, a partir de ese espesor, la eficiencia del aislante mejora muy lentamente. En la Tabla 35 se muestran los resultados obtenidos para un aislante con ese espesor.

Tabla 35. Pérdidas de calor generadas con el aislante seleccionado. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
Espesor (mm)	25,40
Pérdidas de calor, $Q_{\text{con aislante}}$ (kW)	7,80
Reducción de pérdidas con aislante (%)	96,2

## 18.8 Análisis de cargas

Como se ha explicado en la *Parte A: Consideraciones generales*, los recipientes a presión deben de estar diseñados para soportar la peor combinación de cargas sin fallar. Las principales cargas a las cuales pueden estar sometidos los reactores R-101 A/B son la carga por el propio peso del recipiente y su contenido y la carga por viento. La carga sísmica será despreciada puesto que la actividad sísmica en Tarragona, lugar donde se emplaza la planta, es prácticamente nula. (1)

### 18.8.1 Carga por peso

La carga por peso del reactor será la suma del peso de la carcasa del reactor, de las partículas de catalizador, accesorios internos, accesorios externos, aislamiento y la carga hidrostática. Para realizar un cálculo preliminar del peso de la carcasa se empleará la *Ecuación [12]* de la *Parte A: Consideraciones generales* y se muestran estos cálculos en la Tabla 36. (1)

Tabla 36: Cálculo de la carga por peso de la carcasa del reactor. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$C_w$	1,08
$\rho_m$ (kg/m <sup>3</sup> )	7900
$D_m$ (m)	1,11
$H_v$ (m)	7,17
$t$ (mm)	9,33
$W_v$ (kN)	22,03

A la carga del peso del recipiente hay que añadirle el peso del lecho catalítico, que se calcula mediante la ecuación [73]. Los cálculos se muestran en la Tabla 37.

$$W_{cat} = m_{cat} \cdot g \quad [73]$$

Donde:

- $W_{cat}$ : Peso del catalizador (N)
- $m_{cat}$ : Masa del catalizador (kg)
- $g$ : Aceleración de la gravedad, 9,81 m/s<sup>2</sup>

Tabla 37. Cálculos de la carga por peso del catalizador. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$m_{cat}$ (kg)	2798,46
$W_{cat}$ (kN)	27,45

Asimismo, hay que tener en cuenta el peso del aislante, que se calcula mediante la ecuación [74] y cuyos resultados se muestran en la Tabla 38. Cabe destacar que la carga por peso del aislante se debe sobredimensionar doblando el valor resultante para así tener en cuenta los accesorios fijos, el sellado y la absorción de humedad. (1)

$$W_{aislante} = \rho_{aislante} \cdot \pi \cdot (r_3^2 - r_2^2) \cdot H \cdot g \quad [74]$$

Donde:

- $W_{aislante}$ : Carga por peso del aislante (N)
- $\rho_{aislante}$ : Densidad del material del aislante (kg/m<sup>3</sup>)

- $r_3$ : Radio externo del aislante (m)
- $r_2$ : Radio externo del reactor (m)
- H: Altura del reactor (m)
- g: Aceleración de la gravedad, 9,81 m/s<sup>2</sup>

Tabla 38. Cálculos de la carga por peso del aislante. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$\rho_{\text{aislante}}$ (kg/m <sup>3</sup> )	16,1
$r_3$ (m)	0,59
$r_2$ (m)	0,56
H (m)	7,17
$W_{\text{aislante}}$ (kN)	0,10
$W_{\text{aislante sobredimensionado}}$ (kN)	0,21

Además, hay que añadir la carga por el peso del líquido contenido dentro del reactor. Para ello, se calcula el volumen que ocupa la mezcla, restando al volumen total del reactor, el volumen ocupado por las partículas sólidas, sin tener en cuenta el espacio intersticial ni los poros, ecuación [75]. El volumen de las partículas de catalizador se obtiene mediante la ecuación [76] y la carga por peso del fluido reaccionante con la ecuación [77]. Se muestran los resultados obtenidos en la Tabla 39. Debido a que la densidad del fluido es menor que la del agua, para mayor seguridad se realizará el cálculo para carga hidráulica.

$$V_{\text{agua}} = V_{\text{reactor}} - V_{\text{cat}} \quad [75]$$

$$V_{\text{cat}} = \frac{m_{\text{cat}}}{\rho_{\text{sólido}}} \quad [76]$$

$$W_{\text{agua}} = V_{\text{agua}} \cdot \rho_{\text{agua}} \cdot g \quad [77]$$

Donde:

- $V_{\text{agua}}$ : Volumen del reactor ocupado por agua (m<sup>3</sup>)
- $V_{\text{reactor}}$ : Volumen del reactor, sin incluir los cabezales (m<sup>3</sup>)
- $V_{\text{cat}}$ : Volumen del reactor ocupado por las partículas sólidas de catalizador (m<sup>3</sup>)
- $m_{\text{cat}}$ : Masa de catalizador contenida en el reactor (kg)
- $\rho_{\text{agua}}$ : Densidad de la partícula catalítica (kg/m<sup>3</sup>)
- $W_{\text{agua}}$ : Peso del fluido contenido en el reactor (N)
- $\rho_{\text{agua}}$ : Densidad del agua (kg/m<sup>3</sup>)
- g: Aceleración de la gravedad, 9,81 m/s<sup>2</sup>

Tabla 39. Cálculos de la carga por el peso del fluido. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$V_{\text{reactor}}$ (m <sup>3</sup> )	6,86
$m_{\text{cat}}$ (kg)	2798,46
$\rho_{\text{catalizador}}$ (kg/m <sup>3</sup> )	830,00
$V_{\text{cat}}$ (m <sup>3</sup> )	3,37
$V_{\text{fluido}}$ (m <sup>3</sup> )	3,49
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	997,00
$W_{\text{fluido}}$ (kN)	34,16

Finalmente, se obtiene la carga total del reactor realizando la suma de todas las cargas anteriores, ecuación [78]. Se presenta el resultado en la Tabla 40.

$$W_{total} = W_v + W_{aislante,s} + W_{cat} + W_{fluido} \quad [78]$$

Tabla 40. Cálculo de la carga total del reactor. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$W_{total}$ (kN)	83,85

### 18.8.2 Carga por viento

Al tratarse de un reactor orientado en vertical instalado al aire libre, es importante tener en cuenta las cargas ejercidas por viento. Como se explica en la *Parte A: Consideraciones generales* se tratará como una viga voladiza para el cálculo del momento de flexión, con la *Ecuación [13]* de la *Parte A Consideraciones generales*.

Primero, hay que calcular la presión de viento mediante la *Ecuación [14]* de la *Parte A: Consideraciones generales*, para lo cual se toma una velocidad del viento de 160 km/h, recomendado por la bibliografía (1). A partir de esta y determinando el diámetro efectivo con la *Ecuación [16]*, se calcula la carga por unidad de longitud con la *Ecuación [15]* de la *Parte A: Consideraciones generales*. En la Tabla 41 se muestran los resultados obtenidos para las cargas por viento.

Tabla 41. Cálculos para la carga por viento. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
u (km/h)	160
$P_w$ (N/m <sup>2</sup> )	1280
$D_i$ (m)	1,10
$t_{carcasa}$ (mm)	9,33
$t_{aislante}$ (mm)	25,40
$D_{ef}$ (m)	1,17
W (N/m)	1501,68
$M_x$ (kN·m)	38,65

## 18.9 Análisis de esfuerzos

En este apartado se calcularán los esfuerzos o tensiones a los que están sometidos los reactores R-101 A/B, siguiendo las explicaciones del *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: D Consideraciones generales*. Este análisis de esfuerzos permite determinar si los reactores pueden soportar de forma segura las cargas a las que están sometidos.

### 18.9.1 Esfuerzos primarios

Primeramente, se calcularán los esfuerzos circunferenciales y longitudinales debidos a la presión, mediante las *Ecuaciones [18]* y *[19]* de la *Parte A: Consideraciones generales*.

Se calculará también el esfuerzo directo debido al peso del recipiente, su contenido y accesorios internos a partir de la *Ecuación [20]* de la *Parte A: Consideraciones generales*. Asimismo, el esfuerzo de flexión resultante de los momentos de flexión a los que está sometido el reactor se obtiene de la *Ecuación [21]* y *[22]* de la *Parte A: Consideraciones generales*.

En la Tabla 42 se muestran los cálculos para la obtención de los esfuerzos primarios explicados anteriormente.

Tabla 42. Resultados de los esfuerzos primarios. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
P (MPa)	1,17
$D_i$ (m)	1,10
t (mm)	9,33
$\sigma_h$ (MPa)	69,33
$\sigma_L$ (MPa)	34,66
$W_{total}$ (kN)	83,85
$\sigma_w$ (MPa)	-2,57
$D_0$ (m)	1,12
$I_v$ (m <sup>4</sup> )	5,05E-03
$M_x$ (kN·m)	38,65
$\sigma_b$ (MPa)	4,29

El esfuerzo directo debido al peso ( $\sigma_w$ ) es compresivo, y por tanto tendrá signo negativo.

### 18.9.2 Esfuerzos principales

Se calculará el esfuerzo total longitudinal mediante la Ecuación [23] de la Parte A: Consideraciones generales, a partir de los esfuerzos calculados en el apartado anterior. Donde la expresión positiva muestra el esfuerzo con el viento en contra y la negativa, a favor del viento. Se muestran los resultados en la Tabla 43.

Tabla 43. Resultados de los esfuerzos longitudinales totales. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
( $+\sigma_b$ ) $\sigma_z$ (MPa)	36,39
( $-\sigma_b$ ) $\sigma_z$ (MPa)	27,80

Los esfuerzos principales ( $\sigma_1$  y  $\sigma_2$ ) se calculan a partir de las Ecuaciones [24] y [25] de la Parte A: Consideraciones generales. En ella, el esfuerzo de cizalladura de torsión ( $\tau$ ) normalmente tiene un valor muy pequeño, por lo que en diseños preliminares del recipiente puede ser despreciado.

(1)

El tercer esfuerzo principal ( $\sigma_3$ ), en la dirección radial, para recipientes con pared fina generalmente es despreciable, pero se puede tomar como aproximación el valor obtenido con la Ecuación [26] de la Parte A: Consideraciones generales. Este esfuerzo es compresivo, y por tanto negativo.

Se muestra en la Tabla 44 los resultados de los esfuerzos principales calculados.

Tabla 44. Esfuerzos principales. Fuente: Elaboración propia

	( $+\sigma_b$ )	( $-\sigma_b$ )
$\sigma_1$ (MPa)	69,33	69,33
$\sigma_2$ (MPa)	36,39	27,80
$\sigma_3$ (MPa)		-0,59

### 18.9.3 Intensidad de esfuerzo permisible

La intensidad máxima de esfuerzo permitida se tomará como el mayor valor de las *Ecuaciones* [27], [28] y [29] de la *Parte A: Consideraciones generales*.

Para que el espesor de la pared del recipiente sea suficiente, debe cumplirse que la intensidad máxima de esfuerzo permisible no supere el valor del esfuerzo máximo permisible del material (S) (1). Los resultados se muestran en la Tabla 45, con estos se verifica que el espesor del recipiente es suficiente.

Tabla 45. Intensidad máxima de esfuerzo permitida. Fuente: Elaboración propia

	( $+\sigma_b$ )	( $-\sigma_b$ )
( $\sigma_1-\sigma_2$ ) (MPa)	32,94	41,52
( $\sigma_1-\sigma_3$ ) (MPa)	69,91	69,91
( $\sigma_2-\sigma_3$ ) (MPa)	36,97	28,39
S (MPa)	88,94	

### 18.9.4 Estabilidad elástica

Como se indica en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones generales*, al presentar un esfuerzo total longitudinal ( $\sigma_z$ ) debido a las cargas combinadas expansivo, es decir, positivo, el recipiente no puede fallar por inestabilidad elástica, también conocida como pandeo. Por lo tanto, no será necesario realizar dicho cálculo.

### 18.10 Soporte del recipiente

La selección del soporte para un recipiente depende de múltiples factores como su tamaño, forma y peso; la temperatura y presión de diseño; la ubicación y disposición del recipiente; y los accesorios internos y externos. (1)

En el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones generales* se explican los tres tipos de soportes más utilizados y sus características y utilidades principales.

Para los reactores R-101 A/B se ha seleccionado un soporte tipo falda, puesto que se tratan de recipientes con orientación vertical y una relación L/D de 5. Este tipo de soporte se recomienda para recipientes verticales, debido a que no impone cargas concentradas en la carcasa del recipiente. Aunque el reactor presenta un volumen relativamente pequeño (6,86 m<sup>3</sup>), se decide descartar el soporte de abrazadera puesto que, al presentar una altura considerable, podría suponer problemas de estabilidad y resistencia mecánica.

El material seleccionado para el soporte será el mismo que para la carcasa del reactor, es decir, acero inoxidable AISI 304, por sus buenas propiedades mecánicas. Se selecciona un soporte de falda tipo recta, por lo que el ángulo base de falda es de 90°. La eficiencia de la soldadura elegida será de 0,85, puesto que el soporte no requiere un examen radiográfico tan exhaustivo como la carcasa.

El espesor mínimo de falda según (1) es de 6 mm, por tanto, se comprobará si ese valor es suficiente. Se utilizan las *Ecuaciones* [30], [31], [32] y [33] del *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones generales*, para determinar los esfuerzos a los que está sometida la falda. A partir de dichos esfuerzos, se comprueba si se cumplen los criterios de las *Ecuaciones* [34] y [35] de la parte mencionada del anexo, para garantizar si el espesor seleccionado es válido. En la Tabla 46 se puede ver que con el espesor mínimo se cumplen los criterios y por tanto, será ese el espesor elegido.

Tabla 46. Cálculos espesor del soporte tipo falda. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$M_s$ (kN·m)	38,65
$D_s$ (m)	1,10
$t_{sk}$ (m)	0,006
$\sigma_{bs}$ (MPa)	6,70
$W_v$ (kN)	84,85
$\sigma_{ws}$ (MPa)	4,01
$\sigma_s$ (MPa) (Tensión)	2,69
$\sigma_s$ (MPa) (Compresivo)	10,70
$S_s$ (kPa)	88,94
E	0,85
$\Theta_s$ (°)	90,00
$S_s \cdot E \cdot \text{sen}(\Theta_s)$ (kPa)	75,60
$E_Y$ (GPa)	193
$0,125 \cdot E_Y \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) \cdot \text{sen}(\theta_s)$	131,15

### 18.11 Aberturas y conexiones

Los reactores necesitan siempre aberturas para conexiones, bocas de hombre y accesorios, como se indica en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones generales*. Primeramente, se requiere una abertura en la parte superior de recipiente para la entrada de los reactivos, así como otra en la parte inferior para la salida de productos. Asimismo, para poder regenerar el lecho por combustión, habrá una conexión para la entrada del aire caliente, y otra para su salida.

Además, la normativa ASME BPV Sección VIII División I, establece que, al presentar un diámetro interno mayor de 36 in (0,91 m), el recipiente debe llevar una boca de hombre, para facilitar la inspección interna, mantenimiento y limpieza del reactor. Esta boca de hombre presentará forma circular, y su diámetro debe ser mayor de 15 in. Finalmente, se decide que la boca de hombre del reactor R-101 A/B presentará un diámetro de 18 in (457,2 mm). (28)

También serán necesarias boquillas para los instrumentos de control del equipo requeridos, así como para la válvula de alivio PSV-101, que se diseñará en el apartado 18.13 Diseño válvula de alivio.

Por otra parte, como se explica en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones generales*, es importante tener en cuenta que las aberturas debilitan la carcasa. Por lo que hay que compensarlos mediante diferentes métodos.

### 18.12 Accesorios internos

Los accesorios internos son elementos de gran importancia para el diseño de un reactor. Estos son esenciales para garantizar el correcto funcionamiento del equipo y la seguridad de este. A continuación, se describen los accesorios internos requeridos en los reactores R-101 A/B:

- Distribuidor de entrada. Está diseñado para distribuir de manera uniforme el líquido a la bandeja de distribución posterior, manteniendo un nivel de líquido uniforme. (29)
- Bandeja distribuidora de líquido. Se encarga de asegurar una distribución uniforme del fluido reactivo sobre el lecho catalítico, evitando la formación de canalizaciones preferenciales y zonas muertas. De esta manera se maximiza la eficiencia del catalizador. (29)
- Scale traps. Consisten en una serie de pantallas con arreglo cilíndrico utilizadas en equipos con flujo descendente para evitar el arrastre de contaminantes o incrustaciones que puedan obstruir el lecho. (29)
- Soporte de catalizador. Su función es soportar el peso del catalizador y del fluido de proceso, así como soportar la caída de presión sobre el lecho. (29)
- Colector de salida. Permite garantizar una distribución uniforme del flujo tras atravesar el lecho catalítico y evita el arrastre de partículas hacia las tuberías y equipos posteriores. (29)

En la Figura 17 se muestra un reactor de lecho fijo con sus principales accesorios internos.

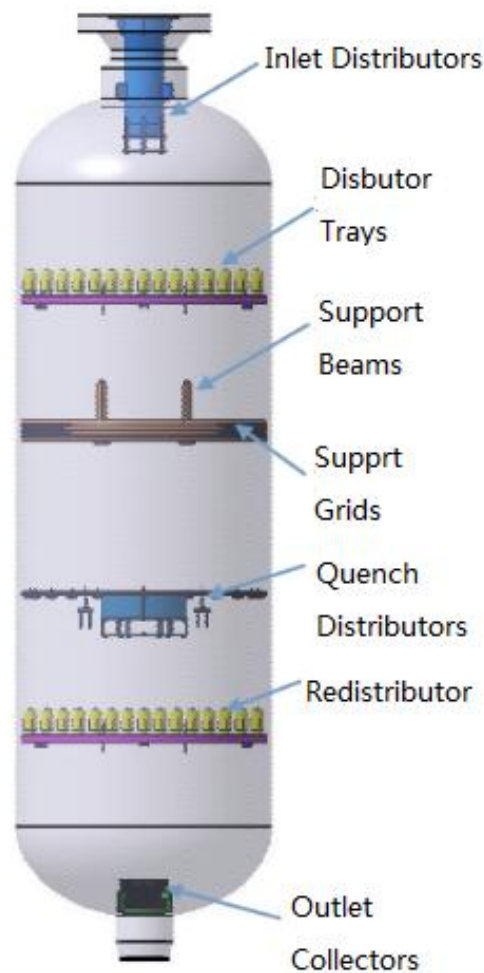


Figura 17. Accesorios internos de un reactor de lecho fijo. Fuente:(30)

### 18.13 Diseño válvula de alivio

Como se indica en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones generales*, es necesario instalar una válvula de alivio en los reactores R-101 A/B para garantizar la operación segura de estos.

Para el diseño de la válvula de alivio se sigue el Estándar API 520 *Sizing, Selection, and Installation of Pressure-Relieving Devices in Refineries Part I*, de acuerdo con el Código ASME BPV Sec. VIII.

Siguiendo las explicaciones de los cálculos para el dimensionamiento de la válvula de alivio del *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones generales*, se obtienen los resultados mostrados en la Tabla 47.

Tabla 47. Cálculos dimensionamiento de la válvula de alivio. Fuente: Elaboración propia

Parámetros	Valor
Relación contrapresión (%)	0
$K_w$	1
$K_c$	1
$K_v$	1
$K_d$	0,65
$P_{\text{disparo}}$ (kPa)	1172,37
Sobrepresión (%)	010
$P_1$ (kPa)	1390,91
$P_2$ (kPa)	101,33
Q (L/min)	280,13
G	0,74
Área mínima efectiva necesaria (mm <sup>2</sup> )	122
Área mínima efectiva válvula	126
$\mu$ (cP)	0,19
Re	1790660,24
$K_{v, \text{recalculado}}$	1,00
$K_{d, \text{actual}}$	0,58
Área real de descarga necesaria (mm <sup>2</sup> )	137
Área real de descarga válvula (mm <sup>2</sup> )	154

## 19 Hoja de especificaciones

Planta de producción de detergente tipo LABS		<b>HOJA DE ESPECIFICACIONES DEL REACTOR R-101 A/B</b>	
		<b>TAG EQUIPO</b>	R-101 A/B
		<b>SECCIÓN</b>	100
<b>DATOS GENERALES</b>			
<b>DENOMINACIÓN EQUIPO</b>		Reactor catalítico de lecho fijo	
<b>FUNCIÓN</b>	Hacer reaccionar benceno con dodeceno para obtener dodecibenceno		
<b>DATOS DE OPERACIÓN</b>			
<b>REACTIVOS</b>		Benceno y dodeceno	
<b>PRODUCTO</b>		Dodecibenceno	
<b>MODO DE OPERACIÓN</b>		Adiabático	
<b>TEMPERATURA DE OPERACIÓN (°C)</b>		<b>IN</b>	<b>OUT</b>
		125	147,24
<b>FRACCIÓN DE VAPOR</b>		0	0
<b>DENSIDAD (kg/m<sup>3</sup>)</b>		749,28	732,85
<b>VISCOSIDAD (cP)</b>		0,208	0,181
<b>PRESIÓN DE OPERACIÓN (bar)</b>		10	
<b>VELOCIDAD (m/s)</b>		0,01	
<b>FLUJO MÁSSICO (kg/s)</b>		3,50	
<b>DATOS DE DISEÑO</b>			
<b>TEMPERATURA DE DISEÑO (°C)</b>		174,95	
<b>PRESIÓN DE DISEÑO (bar)</b>		11,72	
<b>ORIENTACIÓN</b>		Vertical	
<b>MODO DE FLUJO</b>		Descendente	
<b>MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN</b>		Acero Inoxidable 304	
<b>NORMA DE DISEÑO</b>		Código ASME BPV Sec.VIII Div. 1	
<b>CABEZALES</b>		Elíptico	
<b>SOPORTE</b>		Falda	
<b>LECHO CATALÍTICO</b>			
<b>TIPO DE CATALIZADOR</b>		Ácido tungstofosfórico soportado en SiO <sub>2</sub>	
<b>MASA DE CATALIZADOR (kg)</b>		2798,46	
<b>VOLUMEN (m<sup>3</sup>)</b>		5,28	
<b>DIÁMETRO (m)</b>		1,10	
<b>LONGITUD (m)</b>		5,52	
<b>L/D</b>		5,00	
<b>POROSIDAD</b>		0,63	
<b>CARCASA</b>			
<b>VOLUMEN (m<sup>3</sup>)</b>		6,86	
<b>DIÁMETRO (m)</b>		1,10	
<b>LONGITUD (m)</b>		7,17	
<b>ESPESOR (mm)</b>		9,33	
<b> AISLANTE</b>			
<b>MATERIAL</b>		Fibra de vidrio	
<b>MODELO COMERCIAL</b>		Fiberglas Thermal Insulating Wool Type I-HP	
<b>ESPESOR (mm)</b>		25,40	
<b>ACCESORIOS INTERNOS</b>			
Distribuidor de entrada		Bandeja distribuidora de líquido	
Scale traps		Soporte de catalizador	
Colector de salida		Válvula de alivio	

## 20 Bibliografía

1. SINNOTT, Ray, TOWLER, Gavin y COSTA LÓPEZ, José. *Diseño en ingeniería química*. 1.<sup>a</sup> ed. Barcelona: Reverté, 2012. ISBN 84-291-9504-1.
2. CUTRIGHT, Josh T. *Friedel-Crafts alkylation of benzene with a superacid catalyst*. En línea. [S. l.]: East Tennessee State University, [s. f.]. Disponible en: <https://dc.etsu.edu/honors/676>
3. ZHANG, Jinchang, ZHU, Zuogang, LI, Chengyue, WEN, Langyou y MIN, Enze. Characterization and kinetic investigation of tungstophosphoric supported on SiO<sub>2</sub> for alkylation of benzene with 1-dodecene to synthesize linear alkylbenzene. *Applied Catalysis A: General*, vol. 241 (2003), n.º 1, pp. 133–142. [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(02\)00449-5](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(02)00449-5).
4. LI, Ruimin, XING, Shiyong, ZHANG, Shuai y HAN, Minghan. Effect of surface silicon modification of H-beta zeolites for alkylation of benzene with 1-dodecene. *RSC Advances*. En línea. vol. 10 (2020), n.º 17, pp. 10006–10016. <https://doi.org/10.1039/d0ra00393j>.
5. FOGLER, H. Scott. *Essentials of chemical reaction engineering*. 2.<sup>a</sup> ed. Boston: Pearson Education, 2018. ISBN 978-0-13-388751-8.
6. ASLAM, Waqas, HOSSAIN, Mohammad M., BARI SIDDIQUI, Mohammed A., ABUSSAUD, Basim A. y AL-KHATTAF, Sulaiman S. Kinetics of liquid phase alkylation of benzene with dodecene over mordenite. *Canadian Journal of Chemical Engineering*. En línea. vol. 93 (2015), n.º 5, pp. 870–880. <https://doi.org/10.1002/cjce.22167>.
7. LIANG, Ben, LIU, Meng Nan, AN, Ning, REN, Fang, LUO, Qun Xing, CHEN, Huiyong, HU, Jun, MA, Xiaoxun y HAO, Qing Qing. Achieving long-lived MWW zeolite catalyst for alkylation of benzene with 1-dodecene: Insights into confinement effect of surface cavities and underlying mechanism. *Chemical Engineering Journal*. En línea. vol. 489 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.151109>.
8. LIU, Baoyu, LU, Weijian, LIU, Yikuan, FENG, Qilong, HUANG, Yi, SHANG, Jin, ZHU, Yihan y DONG, Jinxiang. Synthesis of dodecylbenzene via the alkylation of benzene and 1-dodecene over mesopore Beta zeolites. *AIChE Journal*. En línea. vol. 69 (2023), n.º 11. <https://doi.org/10.1002/aic.18201>.
10. MORALES, Dolores, ROMANELLI, Gustavo P. y PIZZIO, Luis R. Ácido tungstofosfórico inmovilizado en sílice mesoporosa ordenada para su aplicación en catálisis heterogénea. *Anales de la Asociación Química Argentina*, vol. 106 (2019), n.º 1, pp. 40–46.
11. DREIBELBIS, John A. *Silica catalyst supports*. Sol.: 15-08-1984. Conc.: 14-10-1986. US Patent 4,617,060. Disponible en: <https://patentimages.storage.googleapis.com/f6/27/8e/6e2abc9fcf0f82/US4617060.pdf>

10. KOZHEVNIKOV, Ivan V., HOLMES, Stephen y SIDDIQUI, M. R. H. Coking and regeneration of  $H_3PW_{12}O_{40}/SiO_2$  catalysts. *Applied Catalysis A: General*, vol. 209 (2001), n.º 1, pp. 229–237. [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(00\)00736-4](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(00)00736-4).
12. LEVENSPIEL, Octave. *Ingeniería de las reacciones químicas*. 2.ª ed. Barcelona: Editorial Reverté, 2010. ISBN 978-84-291-7530-0.
13. UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE. *Análisis comparativo de la difusividad efectiva, artificial y real en materiales porosos*. Trad. GASKELL, David R. [S. l.]: Universidad de Santiago de Chile, 1971.
14. BURGESS Jr., Donald R. *Self-diffusion and binary-diffusion coefficients in gases*. En línea. Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology, 2024. Disponible en: <https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/TechnicalNotes/NIST.TN.2279.pdf> [Consulta: 16 mayo 2025].
15. FU, Jinlong, THOMAS, Hywel R. y LI, Chenfeng. Tortuosity of porous media: Image analysis and physical simulation. *Journal of Hydrology*. En línea. Vol. 594 (2021), 125955. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.125955>.
16. MOHAMMED, Abdul Halim A. K. y RIDHA, Ali M. Alkylation of benzene with long chain olefins over solid-acid catalyst. *Journal of Engineering*, vol. 15 (2009), n.º 2, pp. 3620–3632. <https://doi.org/10.31026/j.eng.2009.02.08>.
17. WADE, Leroy G. *Química orgánica*. 5.ª ed. Madrid: Pearson-Prentice Hall, 2004. ISBN 84-205-4104-6.
18. SMITH, Robin. *Chemical process design and integration*. Chichester: John Wiley & Sons, 2005. ISBN 0-471-48680-9.
19. TURTON, Richard. *Analysis, synthesis, and design of chemical processes*. 4.ª ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2013. ISBN 978-0-13-261812-0.
20. ASENSIO, Anabel D. *Modelado de reactores de lecho fijo de baja relación de aspecto asistido por Fluidodinámica Computacional (CFD)*. En línea. La Plata: Universidad Nacional de La Plata, 2017. Disponible en: [https://sedici.unlp.edu.ar/bitstream/handle/10915/65182/Documento\\_completo.pdf-PDFA.pdf?sequence=1&isAllowed=y](https://sedici.unlp.edu.ar/bitstream/handle/10915/65182/Documento_completo.pdf-PDFA.pdf?sequence=1&isAllowed=y) [Consulta: 16 mayo 2025].
21. *Ellipsoidal heads DIN 28013 - torispherical head, spherical dished bottom, tank bottom, cone, custom pressed units - dished ends manufacturer*. En línea. [S. l.]: Slawinski, [s. f.]. Disponible en: <https://www.slawinski.co.uk/products/ellipsoidal-heads/> [Consulta: 1-05-2025].
22. INCROPERA, Frank P. *Introduction to heat transfer*. 5.ª ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2007. ISBN 978-0-471-45728-2.
23. ÇENGEL, Yunus A. *Transferencia de calor y masa: un enfoque práctico*. 3.ª ed. Madrid: McGraw-Hill, 2007. ISBN 978-607-15-0273-5.

24. *Guía técnica: condiciones climáticas exteriores de proyecto*. En línea. Madrid: Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía (IDAE), [s. f.]. Disponible en: [https://www.idae.es/uploads/documentos/documentos\\_12\\_Guia\\_tecnica\\_condiciones\\_climaticas\\_exterior\\_es\\_de\\_proyecto\\_e4e5b769.pdf](https://www.idae.es/uploads/documentos/documentos_12_Guia_tecnica_condiciones_climaticas_exterior_es_de_proyecto_e4e5b769.pdf) [Consulta: 16-05-2025].
25. *Datos históricos meteorológicos de Tarragona en el invierno de 1983 (España)*. En línea. Weather Spark, [s. f.]. Disponible en: <https://es.weatherspark.com/h/s/45958/1983/3/Datos-hist%C3%B3ricos-meteorol%C3%B3gicos-del-invierno-1983-en-Tarragona-Espa%C3%B1a#Figures-WindSpeed> [Consulta: 16-05-2025].
26. TAWFEEQ, M. *Insulating materials: fundamentals and applications*. 1.<sup>a</sup> ed. Baghdad, Iraq: University of Technology Publishing, 2021. ISBN 978-9922-20-178-5.
27. *FIBERGLAS™ thermal insulating wool | Owens Corning Insulation*. En línea. [S. l.]: Owens Corning, [s. f.]. Disponible en: <https://www.owenscorning.com/en-us/insulation/products/fiberglas-tiw-hp-types-i-and-ii-insulation> [Consulta: 5-05-2025].
28. THE AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS. *ASME Boiler and Pressure Vessel Code. Section VIII, Division 1*. New York: ASME, 1968.
29. *Reactor internals overview | Haldor Topsoe*. En línea. [S. l.]: Haldor Topsoe, [s. f.]. Disponible en: <https://www.topsoe.com/reactor-internals-overview> [Consulta: 11-05-2025].
30. *Componentes internos del reactor de lecho fijo - YT Process Engineering Ltd*. En línea. [S. l.]: YT Process Engineering Ltd, [s. f.]. Disponible en: [https://www.ytpe.com.cn/product\\_1/21.html](https://www.ytpe.com.cn/product_1/21.html) [Consulta: 11-05-2025].

PARTE C:  
COLUMNA DE  
DESTILACIÓN  
T-102

## Índice

1	Introducción.....	4
2	Justificación del método de separación .....	5
3	Fundamentos y conceptos previos.....	5
3.1	Concepto de equilibrio.....	5
3.2	Volatilidad relativa y constantes de equilibrio.....	6
3.3	Leyes de Dalton, Raoult y Henry.....	7
3.4	Propiedades de la mezcla.....	7
3.4.1	Presión de vapor .....	7
3.4.2	Capacidad calorífica .....	8
3.4.3	Densidad.....	9
3.4.4	Entalpías específicas.....	10
3.5	Ecuaciones básicas.....	10
3.5.1	Balance de materia .....	11
3.5.2	Balance de energía.....	12
3.6	Cálculo de temperatura de burbuja y de rocío .....	13
4	Metodología de diseño .....	13
5	Diseño riguroso .....	13
5.1	Especificación del grado de separación requerido.....	13
5.2	Condiciones de operación.....	14
5.3	Selección del tipo de equipo .....	15
5.4	Determinación del número de etapas teóricas .....	16
6	Balances de materia y energía. Ecuaciones MESH.....	17
6.1	Cálculos etapa a etapa.....	17
6.1.1	Etapa n+1. Cálculo de la caldera.....	18
6.1.2	Etapa n.....	20
6.2	Resultados del diseño riguroso .....	23
6.3	Eficiencia de la columna.....	24
7	Diseño hidráulico.....	25
7.1	Propiedades fisicoquímicas.....	25
7.2	Dimensión aproximada de la columna.....	26
7.2.1	Espaciado.....	26
7.2.2	Diámetro.....	26
7.3	Características del plato y patrón de flujo.....	29
7.4	Comprobación de la velocidad de goteo.....	33
7.5	Comprobación caída de presión.....	35

7.5.1	Caída de presión en el plato seco .....	35
7.5.2	Caída de presión en la cabeza residual .....	35
7.5.3	Caída de presión total del plato .....	36
7.5.4	Caída de presión total en la columna.....	36
7.6	Comprobación del retorno de la bajante y tiempo de residencia .....	36
7.7	Comprobar porcentaje de inundación y arrastre .....	38
7.8	Diseño final de los platos .....	40
8	Diseño mecánico .....	42
8.1	Presión de operación.....	43
8.2	Temperatura de diseño.....	43
8.3	Propiedades físicas del material.....	43
8.4	Cálculo de espesores .....	44
8.4.1	Espesor de la carcasa .....	44
8.4.2	Selección y dimensionamiento de los cabezales .....	46
8.4.3	Cabezal elíptico (2:1) .....	47
8.4.4	Cabezal torisférico.....	50
8.4.5	Cabezal hemisférico .....	51
8.4.6	Selección del cabezal.....	51
8.5	Altura de la columna.....	52
8.6	Anillos rigidizadores.....	53
8.7	Diseño del aislante .....	53
8.7.1	Selección del aislante .....	53
8.7.2	Propiedades del aire ambiente .....	54
8.7.3	Geometría de la columna.....	55
8.7.4	Calor disipado sin aislante térmico.....	55
8.7.5	Cálculo del espesor del aislante.....	57
9	Análisis de cargas .....	58
9.1	Carga por peso .....	58
9.2	Carga por viento.....	59
10	Análisis de esfuerzos .....	60
10.1	Esfuerzos primarios .....	60
10.2	Esfuerzos principales .....	60
10.3	Intensidad de esfuerzo permisible.....	61
10.4	Estabilidad elástica .....	61
11	Soporte del recipiente .....	62
12	Elementos adicionales .....	63
13	Generación de vacío .....	64
14	Hoja de especificaciones .....	65

15 Bibliografía..... 66

## 1 Introducción

Las operaciones de separación ocupan un papel central en el diseño y operación de procesos químicos industriales, ya que permiten el tratamiento de corrientes tanto de alimentación como de salida de unidades de reacción. Entre las diferentes técnicas disponibles, la destilación se consolida como una de las operaciones unitarias fundamentales, siendo el método de separación más empleado en la industria química debido a su eficacia, versatilidad y robustez. (1)

La destilación fraccionada es un tipo de destilación que sostiene como fundamento el intercambio de componentes entre dos corrientes, una en fase vapor y otra en fase líquida, que circulan a lo largo de la columna. La fuerza impulsora para que este intercambio ocurra es la diferencia de volatilidad de los compuestos que forman la corriente, de manera que los componentes más volátiles conseguirán llegar a su punto de ebullición con una menor temperatura, apareciendo principalmente en la corriente de destilado. Por otra parte, los componentes con mayor punto de ebullición tendrán temperaturas de burbuja más elevadas y aparecerán principalmente en la corriente de colas. (2)

En la práctica, una separación completa y perfecta entre el componente más volátil y el menos volátil es inalcanzable, por lo que siempre se obtendrá cierta cantidad del componente no deseado en cada una de las corrientes de salida. No obstante, si esta fracción es suficientemente pequeña, puede considerarse despreciable en términos de pureza y rendimiento del proceso.

Desde el punto de vista del diseño, una columna de destilación puede modelarse como una sucesión de etapas teóricas en equilibrio, en las cuales las fases líquida y vapor se encuentran en equilibrio termodinámico. Esta idealización permite simplificar los cálculos, ya que evita la necesidad de conocer los coeficientes de transferencia de masa y calor en cada etapa. El número de etapas requeridas para alcanzar una determinada pureza dependerá de la volatilidad relativa, de la composición de la alimentación y de la relación de reflujo seleccionada. (1)

En la parte superior de la columna se instala un condensador, que convierte el vapor en líquido para su posterior recolección o reciclado (reflujo). En la parte inferior, un reboiler (o caldera) suministra el calor necesario para generar el vapor ascendente. El esquema típico de una columna de destilación se puede observar en la Figura 1. (2)

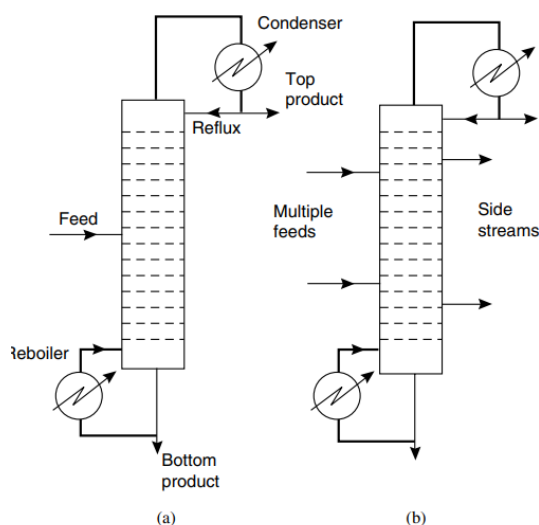


Figura 1. Esquema de una columna de destilación, Fuente:(2)

La configuración estándar de una columna de destilación incluye dos secciones diferenciadas; la sección de enriquecimiento (*rectifying*) y la de agotamiento (*stripping*). Sin embargo, los requisitos de la separación determinarán si es necesaria una columna de destilación completa o si, por el contrario, se optará por una columna más simple que incluya únicamente una de estas secciones.

## 2 Justificación del método de separación

La destilación se selecciona como técnica de separación por ser el método más económico y eficaz para mezclas líquidas. En el caso de mezclas multicomponente, la secuencia de separación se diseña siguiendo las siguientes heurísticas (2, 3):

- Realizar primero la separación más sencilla
- Eliminar al principio de la secuencia de destilación los componentes de mayor porcentaje molar en la alimentación.
- Secuencia de separación por orden decreciente de volatilidad relativa.

Por otra parte, según la bibliografía, cuando el objetivo de un proceso es eliminar un componente volátil de una corriente rica en un componente no volátil, se puede omitir la sección de enriquecimiento. (1)

Aplicando estas normas se justifica retirar primero el benceno en una columna de destilación fraccionada, debido a que es el componente más volátil y abundante y, posteriormente, separar el dodecibenceno del 1-dodeceno en una columna de agotamiento.

Esta secuencia de separación en dos etapas es una práctica común en procesos industriales donde uno de los componentes presenta una volatilidad significativamente mayor, y su retirada temprana optimiza la eficiencia del proceso global. Además, concuerda con las recomendaciones de diseño para sistemas multicomponente con grandes diferencias de volatilidad disponibles en la bibliografía. (1)

Además, esta secuencia de separación se reafirma mediante la literatura disponible, en la que se lleva a cabo la separación inicial del exceso de benceno, seguido del 1-dodeceno no reaccionado y finalmente recuperando los alquilbencenos lineales mediante destilación al vacío. (4)

Por lo tanto, en el presente proyecto se realizarán todos los cálculos rigurosos sobre el diseño de la columna de destilación para separar el 1-dodeceno del dodecibenceno, que se obtendrá en la corriente de colas de la columna de agotamiento T-102 para posteriormente entrar como corriente de alimentación al reactor R-201.

## 3 Fundamentos y conceptos previos

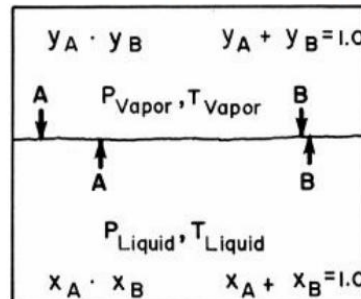
### 3.1 Concepto de equilibrio

En los procesos de separación basados en etapas de equilibrio se asume que, en cada etapa, las fases líquida y vapor que salen están en equilibrio termodinámico. Este equilibrio se define como el estado en el que las tasas de evaporación y condensación de cada componente son iguales, lo que implica que no hay transferencia neta de masa entre fases. (1, 5)

En estas condiciones, se alcanza un equilibrio térmico y mecánico, es decir, la temperatura y presión son iguales en ambas fases. No obstante, las composiciones del líquido y del vapor son

distintas, lo cual es esencial para que se produzca la separación: los componentes más volátiles se concentran en el vapor, mientras que los menos volátiles permanecen en el líquido. Se puede observar en la Figura 2 la representación gráfica de dicho equilibrio. (5)

**Figure 1-2. Vapor-liquid contacting system**



*Figura 2. Representación del equilibrio líquido-vapor.*

*Fuente: (5)*

Una vez definido el concepto de equilibrio líquido-vapor, se hace necesaria la introducción de las constantes de equilibrio,  $K$ , que relacionan las composiciones del líquido y vapor que se encuentran en equilibrio termodinámico, según la Ecuación [2], que asume la idealidad de las fases líquida y vapor.

$$y_i = K_i x_i \quad [1]$$

$$K_i = \frac{P_{i,sat}}{P} \quad [2]$$

Donde:

- $x_i$ : Composición de la fase líquida del componente  $i$
- $y_i$ : Composición de la fase gas del componente  $i$
- $K_i$ : Constante de equilibrio del componente  $i$
- $P_{i,sat}$ : Presión de saturación del componente  $i$
- $P$ : Presión del sistema

### 3.2 Volatilidad relativa y constantes de equilibrio

Un concepto fundamental en el diseño de columnas de destilación es la volatilidad relativa, que muestra la relación entre la composición del vapor y el líquido en equilibrio. Para columnas de destilación en particular, la volatilidad relativa muestra la relación entre el líquido y vapor que salen de una etapa. (5)

La volatilidad de un componente específico  $\alpha_{ij}$ , puede definirse como:

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j} = \frac{P_i^o}{P_j^o} \quad [3]$$

La volatilidad relativa se calcula como la relación entre la volatilidad de dos componentes presentes en la mezcla respecto a uno de los componentes, que usualmente suele ser el componente menos volátil.

Para que la separación por destilación sea viable, este valor debe ser mayor que uno. La volatilidad relativa depende directamente de las presiones de vapor de los componentes presentes en la alimentación. En general, disminuye con el aumento de la temperatura, por lo que operar a vacío, reduciendo el punto de ebullición, puede mejorar la eficacia de separación. (1)

La volatilidad media de la columna se obtiene según la media geométrica de la volatilidad en la corriente de cabezas y en la de colas según la Ecuación [4].

$$\alpha_m = \sqrt{\alpha_{cabezas} \alpha_{colas}} \quad [4]$$

### 3.3 Leyes de Dalton, Raoult y Henry

El método de cálculo iterativo empleado en este diseño requiere el uso de las ecuaciones de equilibrio líquido-vapor descritas en este apartado. Al estudiar las características del sistema se asume que se trata de una mezcla ideal, de modo que se facilitan los cálculos. Se emplean así las leyes de Dalton y Raoult para mezclas multicomponente. (1)

La ley de Dalton, [5], establece que la presión total de una mezcla gaseosa es igual a la suma de las presiones parciales de cada componente, que se pueden definir según la ecuación [7].

La ley de Raoult, [6], establece que la presión parcial de un componente en una mezcla líquida ideal es directamente proporcional a su fracción molar en fase líquida y su presión de vapor pura a la misma temperatura.

$$P = \sum P_i \quad [5]$$

$$P_i = y_i P \quad [6]$$

$$P_i = P_i^o x_i \quad [7]$$

### 3.4 Propiedades de la mezcla

La obtención de las propiedades físicas y químicas del sistema es fundamental para el diseño de la columna de destilación. En este apartado se muestra cómo se obtienen las propiedades necesarias para el procedimiento posterior en función de la temperatura, lo que permite automatizar los cálculos en diferentes etapas del diseño.

#### 3.4.1 Presión de vapor

Se conocen numerosas ecuaciones que expresan la presión de vapor en función de la temperatura, pero el uso de la ecuación de Antoine es el método más generalizado. Esta correlación permite estimar la presión de vapor de un componente puro en función de la temperatura mediante tres coeficientes característicos, obtenidos de la bibliografía disponible. Para el caso del 1-dodeceno,

su presión de vapor se calcula según la Ecuación [8] empleando los coeficientes que se muestran en la Tabla 1.

$$\log_{10}P_i^0(\text{mmHg}) = A - \frac{B}{T(^{\circ}\text{C}) + C} \quad [8]$$

Donde:

- $P_i^0$ : Presión de vapor del componente i
- $A, B, C$ : Constantes de Antoine, propias de cada compuesto
- $T$ : Temperatura de la mezcla

Tabla 1. Parámetros para emplear la ecuación de Antoine del dodeceno. Fuente: (6)

	A	B	C
Dodeceno	6,97	1619,86	182,27

Los coeficientes para la obtención de las presiones de vapor del dodecibenceno se obtuvieron de una revista y se muestran en la Tabla 2. Se emplea la Ecuación [9] para el cálculo de la presión de vapor en kPa. (7)

$$\log_{10}P_i^0(\text{kPa}) = A - \frac{B}{T(^{\circ}\text{C}) + C} \quad [9]$$

Tabla 2. Parámetros para emplear la ecuación de Antoine del dodecibenceno. Fuente: (7)

	A	B	C
Dodecibenceno	6,66	2371,90	182,31

### 3.4.2 Capacidad calorífica

Se define la capacidad calorífica como la cantidad de calor que es necesario suministrar a la unidad de masa de una sustancia o sistema termodinámico para elevar su temperatura en una unidad.

Con el fin de facilitar la obtención de una correlación que relacione  $c_p$  con la temperatura, se asume que la columna opera a una presión constante de 0,1 bar durante todas las etapas. Bajo esta condición, se han obtenido las ecuaciones necesarias para el cálculo de los valores de calor específico y de los calores de vaporización de cada componente, tanto en fase líquida como en fase vapor, utilizando la ecuación empírica de serie potencial, ecuación [10], con coeficientes obtenidos del simulador de datos Aspen HYSYS y que se muestran en la Tabla 3.

$$c_p \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol } ^{\circ}\text{C}} \right) = a + bT + cT^2 \quad [10]$$

Tabla 3. Coeficientes para el cálculo de las capacidades caloríficas. Fuente: Aspen HYSYS

<b>Coeficientes capacidad calorífica fase líquida</b>			
	$a \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol} \cdot ^\circ\text{C}} \right)$	$b \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol} \cdot ^\circ\text{C}^2} \right)$	$c \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol} \cdot ^\circ\text{C}^3} \right)$
Dodeceno	348,68	0,45	0,0008
Dodecilbenceno	434,18	0,98	-0,0002

El cálculo del calor de vaporización de cada compuesto se realiza de igual forma que la capacidad calorífica y se emplea la ecuación [11] para su cálculo, utilizando los coeficientes obtenidos del simulador de datos Aspen HYSYS, que se muestran en la Tabla 4.

$$\lambda_i \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right) = a + bT + cT^2 \quad [11]$$

Tabla 4. Coeficientes para el cálculo de los calores de vaporización de las mezclas. Fuente: Aspen HYSYS.

<b>Calor de vaporización</b>			
	$a \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right)$	$b \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol} \cdot ^\circ\text{C}} \right)$	$c \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol} \cdot ^\circ\text{C}^2} \right)$
Dodeceno	56751	-15,474	-0,191
Dodecilbenceno	87945	-77,145	-0,0398

### 3.4.3 Densidad

De igual forma que para la obtención de la capacidad calorífica específica, se obtienen los datos necesarios para determinar la densidad de ambos compuestos en función de la temperatura, empleando la ecuación [12].

$$\rho \left( \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) = a + bT + cT^2 \quad [12]$$

Tabla 5. Coeficientes para el cálculo de la densidad en fase líquida. Fuente: Aspen HYSYS.

<b>Coeficientes densidad en fase líquida</b>			
	<b>a</b>	<b>b</b>	<b>c</b>
1-Dodeceno	758,45	-0,5257	-0,001
Dodecilbenceno	863,93	-0,6328	-0,0004

### 3.4.4 Entalpías específicas

El cálculo de las entalpías de las mezclas será de gran importancia en los posteriores balances de energía en el diseño de la columna. La entalpía específica de cada componente se evalúa en función de la temperatura de la mezcla, tomando como estado de referencia una temperatura arbitraria de 0°C. Para ello, se emplea la ecuación [13], donde el valor de capacidad calorífica de cada componente se obtiene con la ecuación [10]. (1)

$$h_i = h_{ref} + \int_{T_{ref}}^T C_{p,i} \cdot dT \quad [13]$$

Donde:

- $h_i$ : entalpía específica de una corriente líquida de componente puro a la temperatura T
- $C_{p,i}$ : Calor específico a presión constante de un componente puro
- $h_{ref}$ : entalpía específica de una corriente líquida de componente puro a temperatura  $T_{ref}$
- T: Temperatura de la mezcla
- $T_{ref}$ : Temperatura de referencia, que en este diseño será de 0°C

De esta forma, teniendo en cuenta la contribución de cada componente a la mezcla, se puede realizar el cálculo para la entalpía de una mezcla, según la Ecuación [14].

$$h = \sum x_i \cdot C_{p,i} \cdot (T - T_{ref}) \quad [14]$$

Por otra parte, en el cálculo de las entalpías de mezclas de vapor, se debe considerar el calor de vaporización,  $\lambda$ , asociado al cambio de estado desde el líquido saturado, que se obtiene con la ecuación [11]. Se emplea por tanto la ecuación [15] para el cálculo de la entalpía de las corrientes en fase vapor.

$$H = \sum y_i \cdot c_{p,i} \cdot (T - T_{ref}) + \sum y_i \cdot \lambda_i \quad [15]$$

Se debe resaltar el hecho de que el cálculo de las entalpías, tanto de las mezclas en fase líquido como de las mezclas en fase gas, se refiere siempre al cambio de entalpía, tomando como estado de referencia una temperatura de 0°C.

### 3.5 Ecuaciones básicas

A continuación, se presentan las ecuaciones para sistemas binarios aplicadas a una columna de destilación completa. (1)

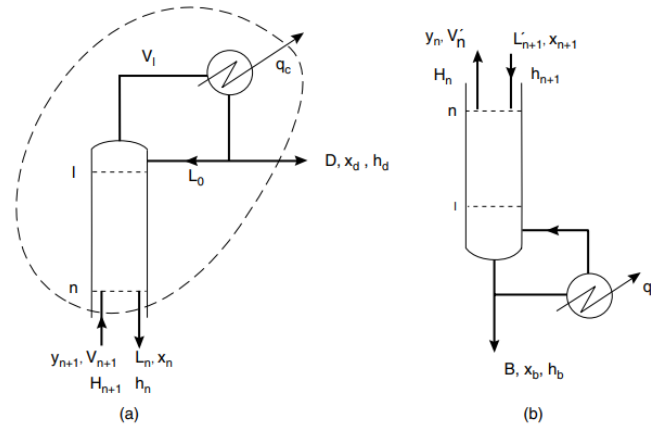


Figura 3. Representación de flujos y composiciones en una columna de destilación completa. Fuente: (2)

Siendo la columna de diseño una columna de agotamiento solo contará con dicha sección. En este tipo de columnas la corriente de destilado sale en fase vapor y, por lo tanto, se realizan los balances de materia y energía según el apartado b) de la Figura 3.

### 3.5.1 Balance de materia

El balance global y por componentes a la columna se realiza empleando las siguientes ecuaciones:

$$F = B + V_1 \quad [16]$$

$$Fz_{f,i} = Bx_{B,i} + V_1y_{1,i} \quad [17]$$

Donde:

- F: Corriente de alimentación como líquido saturado por cabezas, kmol/h
- B: Corriente de salida por colas como líquido saturado, kmol/h
- \$V\_1\$: Corriente de salida superior como vapor saturado, kmol/h
- \$z\_{f,i}\$: Composición molar del componente i en la alimentación
- \$x\_{B,i}\$: Composición molar del componente i en colas
- \$y\_{1,i}\$: Composición molar del componente i en el destilado

La caldera se considera como una etapa más de equilibrio en la columna, y se designa como la etapa N+1, siendo N igual al número de platos en la columna. Por lo tanto, el balance de materia global y por componente a la caldera resulta en las ecuaciones [18] y [19].

$$L_n = B + V_{n+1} \quad [18]$$

$$L_nx_{n,i} = Bx_{B,i} + V_{n+1}y_{n+1,i} \quad [19]$$

Donde:

- \$L\_n\$: Flujo molar de líquido que sale de la etapa n, kmol/h
- B: Corriente molar de líquido de colas procedente de la caldera, kmol/h
- \$V\_{n+1}\$: Corriente molar de vapor saliente de la caldera y de entrada a la etapa n, kmol/h
- \$x\_{n,i}\$: Composición molar del líquido que sale de la caldera

- $y_{n+1,i}$ : Composición molar del vapor que sale de la caldera.

Aplicando las ecuaciones anteriores se presentan en la Tabla 6 los resultados del balance de materia.

Tabla 6. Datos y resultados del balance de materia a la columna. Fuente: Elaboración propia.

Compuestos	Corrientes (kmol/h)				
	F	$V_1$	B	$L_n$	$V_{n+1}$
Dodeceno	0,361	0,360	0,002	0,008	0,006
Dodecilbenceno	7,207	0,340	6,867	8,11	1,244
<b>Total</b>	<b>7,57</b>	<b>0,70</b>	<b>6,87</b>	<b>8,12</b>	<b>1,25</b>
Compuestos	Composiciones				
	$z_f$	$y_1$	$x_B$	$x_n$	$y_{n+1}$
Dodeceno	0,0478	0,514	0,0003	0,00094	0,0046
Dodecilbenceno	0,952	0,486	0,9997	0,999	0,9954

### 3.5.2 Balance de energía

Para el balance de energía se emplean las ecuaciones mostradas en el apartado Propiedades de la mezcla. Por lo tanto, el balance global de energía a la columna se resuelve con la Ecuación [20].

$$Fh_f + Q_b = Bh_B + V_1H_1 \quad [20]$$

El calor aportado a la caldera,  $Q_b$ , se puede calcular empleando la ecuación [20], que deriva en la ecuación [22]. Las entalpías de las corrientes de entrada, de colas y del vapor que sale de la etapa 1 se obtienen utilizando las Ecuaciones [14] y [15].

$$Q_b = Bh_B + V_1H_1 - Fh_f \quad [21]$$

Por tanto, se realiza el balance de energía a la caldera según la Ecuación [22].

$$L_n h_n + Q_b = Bh_B + V_{n+1} H_{n+1} \quad [22]$$

Se muestran los resultados de aplicar el balance en la Tabla 7.

Tabla 7. Resultados de aplicar el balance de energía. Fuente: Elaboración propia.

$T_f$	$T_1$	$T_b$	$h_f$ (kJ/kmo)	$H_1$ (kJ/kmol)	$h_B$ (kJ/kmol)	$h_n$ (kJ/kmol)	$H_{n+1}$	$Q_b$ (kW)
216,04	230,91	236,55	7,207	0,340	6,867	8,11	1,24	45,993

### 3.6 Cálculo de temperatura de burbuja y de rocío

Para estimar tanto la temperatura de las etapas de la columna, como la temperatura de la caldera y del condensador es necesario el uso de las ecuaciones de equilibrio líquido-vapor. De esta manera, se determina la temperatura de saturación y de burbuja según la composición disponible. (1)

Para un líquido saturado, en el que un aumento de la temperatura produciría el cambio de fase, se dice que está a su temperatura de ebullición. Por lo tanto, empleando las Ecuaciones [1], [2], [8], [9] y con la suma de las fracciones molares, ecuación [23], se itera hasta obtener la temperatura que cumpla dicha ecuación.

$$\sum y_i = \sum K_i x_i = 1,0 \quad [23]$$

Así mismo, un vapor saturado necesitaría una mínima disminución en la temperatura para convertirse en líquido, y por tanto se encuentra a la temperatura de saturación. De igual forma que para calcular la temperatura de ebullición, la temperatura de saturación de un vapor corresponde a la que provoque que se cumpla la ecuación [24].

$$\sum x_i = \sum \frac{y_i}{K_i} = 1,0 \quad [24]$$

## 4 Metodología de diseño

El diseño riguroso de una columna de destilación sigue una metodología sistemática que permite asegurar tanto la viabilidad técnica como la eficiencia operativa del equipo. Este procedimiento se basa en los principios de equilibrio de fases y transferencia de materia, y puede resumirse en las siguientes etapas, de acuerdo con la bibliografía empleada. (1)

1. Especificación del grado de separación requerido en el producto.
2. Selección de las condiciones de operación.
3. Selección del tipo de equipo.
4. Determinación del número de etapas teóricas y relación de reflujo.
5. Cálculo del tamaño de la columna.
6. Diseño del interior de la columna.
7. Diseño mecánico del equipo.

## 5 Diseño riguroso

Para el diseño de la columna de destilación se seguirá la metodología de diseño especificada en Metodología de diseño. Aunque para destilación binaria existen métodos específicos diferentes a los utilizados en sistemas multicomponente, en este diseño se utilizarán los métodos de cálculo rigurosos empleados para columnas multicomponente.

### 5.1 Especificación del grado de separación requerido

La alimentación se introduce a la columna como líquido saturado, lo que implica que se encuentra a su temperatura de ebullición a la presión de operación. Esta elección se realiza debido a las ventajas de operación que ofrece esta condición.

Al tratarse de un líquido saturado, cualquier aporte adicional de calor requiere muy poca energía para provocar la vaporización parcial del fluido, facilitando así la separación durante la columna.

Además, esta opción reduce el aporte energético por parte de la caldera, mejorando la separación y eficacia del proceso.

La corriente de alimentación de entrada a la secuencia de separación, que proviene del efluente del reactor de alquilación, está compuesta mayoritariamente por benceno no reaccionado, seguido de una fracción de dodecilbenceno, que constituye el producto deseado, y trazas de 1-dodeceno.

En el presente proyecto el objetivo de la separación es recuperar el dodecilbenceno con una pureza mínima del 99% molar como producto de fondo, minimizando las pérdidas del compuesto valioso e incrementando así la eficacia del proceso consiguiendo mayor cantidad y pureza en el posterior reactor de sulfonación.

Como ya se explicó en apartados anteriores, en el presente anexo se diseñará la segunda columna de purificación de la secuencia de separación. En la Tabla 8 se muestran resumidos los flujos de entrada a la columna de destilación T-102.

Tabla 8. Flujos y composiciones molares de la corriente de alimentación a T-102. Fuente: elaboración propia.

	Flujo molar (kmol/h)	Fracción molar ( $x_i$ )
Dodeceno	0,361	0,0478
Dodecilbenceno	7,207	0,952

## 5.2 Condiciones de operación

En primer lugar, es necesario especificar las condiciones de operación, siendo el modo producción elegido en continuo debido a la gran capacidad de la planta.

La presión de operación es una de las variables clave en el diseño de una columna de destilación, ya que condiciona directamente el diseño de la columna. Las consideraciones más importantes a la hora de decidir la presión de operación son que la temperatura de rocío del destilado se encuentre por encima de los 30°C, asegurando así que se pueda emplear agua de refrigeración en el condensador que se encuentra en la corriente de destilado. Por otra parte, las columnas a vacío se emplean cuando los compuestos presentan elevados puntos de ebullición. (1)

Al estar formada la alimentación por una mezcla líquida de hidrocarburos aromáticos (dodecilbenceno), que presentan mayores puntos de ebullición, la presión es un factor decisivo en el diseño. El punto de ebullición del dodecilbenceno es muy elevado, alcanzando altas temperaturas de operación a presión atmosférica. Se muestran en la Figura 4 y Figura 5 el equilibrio líquido vapor de este sistema a 1 bar y 0,1 bar respectivamente. Se observa que el equilibrio se aleja mucho de la línea de 45° en los dos casos. Sin embargo, el trabajo a 0,1 bar permitirá disminuir las temperaturas de operación a lo largo de la columna.

Las columnas de destilación a vacío presentan una caída de presión significativa, pero al no disponer de datos suficientes se trabajará con presión constante a lo largo de la columna, ya que en el apartado 8. Diseño mecánico se verificará la caída de presión del equipo.

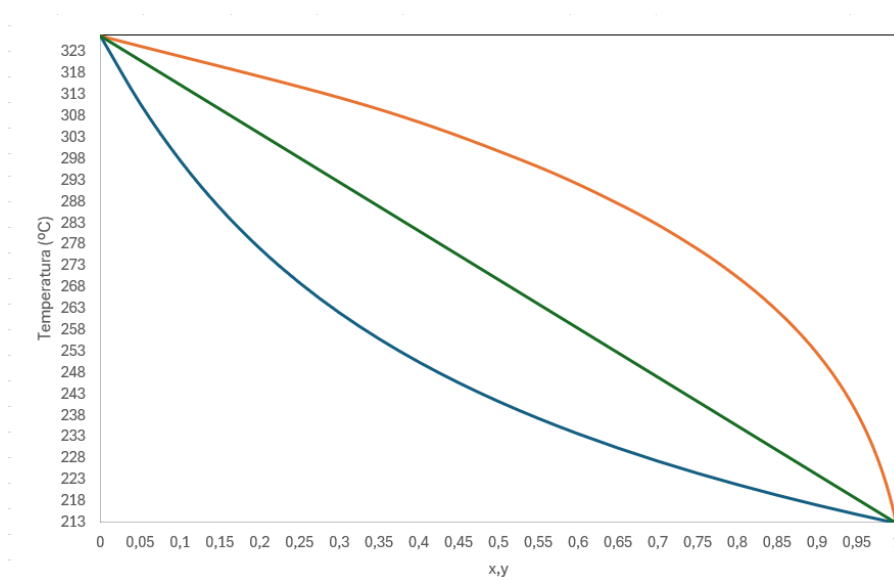


Figura 4. Equilibrio líquido-vapor del sistema dodeceno-dodecibenceno a 1 bar. Fuente: Elaboración propia a partir de (6, 7)

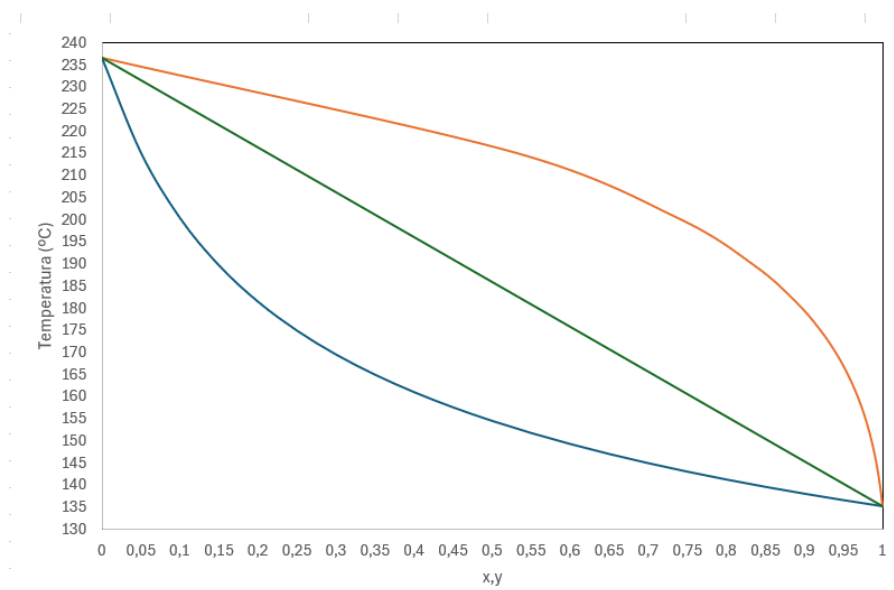


Figura 5. Equilibrio líquido-vapor del sistema dodeceno-dodecibenceno a 0,1bar. Fuente: Elaboración propia a partir de (6, 7)

### 5.3 Selección del tipo de equipo

La elección rigurosa entre una columna de platos o una columna de relleno solo puede llevarse a cabo mediante la evaluación económica de las mismas, lo que muchas veces es inefectivo e innecesario. El equipo de procesamiento para sistemas de contacto gas-líquido se diseña para llevar a cabo las operaciones de transferencia con un mínimo gasto de energía e inversión de capital. Por lo tanto, se simplifica la elección mediante la verificación de las ventajas y desventajas que presentan estas dos configuraciones. (1, 2)

## Columna de platos

- Admiten un amplio rango de caudales de líquido y vapor.
- Presentan eficiencias de etapa más fiables.
- Su uso es más adecuado cuando existe riesgo de ensuciamiento, ya que los platos se pueden inspeccionar y limpiar con mayor facilidad.
- Aportan mayor fiabilidad respecto a las columnas de relleno, ya que presentan mayor control sobre la distribución de líquido dentro de la columna.

## Columna de relleno

- Si el diámetro es menor de 0,6m, el relleno es más barato que los platos, a menos que el material sea alguna aleación metálica.
- Pueden manejar ácidos y otros materiales corrosivos.
- Presentan menor caída de presión, factor importante en destilaciones a vacío.
- Algunos materiales de relleno se rompen fácilmente durante su inserción.
- En caso necesario, la incorporación de serpentines de refrigeración es más simple en columnas de platos.
- Un caudal de líquido bajo conducirá a la humectación incompleta del relleno, disminuyendo la eficacia del contacto.

Las columnas de relleno se emplean normalmente en aplicaciones donde no es factible utilizar las de platos debido a las características del proceso. Pese a que varios factores favorecen la elección de las columnas de relleno, la elección final de diseñar una columna de platos se justifica debido a diversos parámetros. En primer lugar, las elevadas temperaturas que se alcanzan durante la separación podrían producir problemas como la degradación del empaque o una distribución ineficiente del líquido. Además, las ventajas operativas que ofrecen las columnas de platos, así como su fiabilidad respecto a los cálculos del diseño, hacen de esta opción la más viable.

#### 5.4 Determinación del número de etapas teóricas

En primer lugar, se determina el número de etapas teóricas mínimas que se necesitan para alcanzar la separación deseada mediante la ecuación de Fenske según [25].

$$N_{min} = \frac{\log \left[ \frac{x_{LK}}{x_{HK}} \right] d \left[ \frac{x_{HK}}{x_{LK}} \right]_b}{\log \alpha_{LK}} \quad [25]$$

Donde:

- $N_{min}$ : Número mínimo de etapas en la columna.
- $x_{LK}$ : Composición molar del componente menos pesado, en este caso el dodeceno.
- $x_{HK}$ : Composición molar del componente más pesado, en este caso el dodecibenceno.
- $\alpha_{LK}$ : Volatilidad relativa media obtenida con la ecuación [3], del componente ligero respecto al pesado.

El cálculo aproximado del número de etapas real, N, se realizará asumiendo como eficiencia de la columna un valor de un 60%, adecuado para diseños preliminares según heurísticas. Se muestran en la Tabla 9 y

Tabla 10 los datos necesarios y obtenidos en este apartado. (1)

Tabla 9. Datos necesarios para el cálculo de  $N_{min}$ . Fuente: Elaboración propia.

	Destilado	Colas
Dodeceno, $x_{LK}$	0,51	0,00027
Dodecibenceno, $x_{HK}$	$4,86 \cdot 10^{-1}$	1,00
$\alpha_{LK}$	18,15	17,15

Tabla 10. Cálculo de etapas y reflujo. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$N_{min}$	2,88
N	5
E (%)	0,60

## 6 Balances de materia y energía. Ecuaciones MESH.

En el diseño de una columna de destilación, la especificación adecuada de las variables independientes es fundamental, ya que determinará una solución única al sistema. La destilación es particularmente compleja desde el punto de vista matemático, ya que requiere resolver un elevado número de ecuaciones que describen el comportamiento de cada etapa, incluyendo los platos, la caldera y el condensador.

El conjunto de ecuaciones empleado en la resolución de las columnas de destilación recibe el nombre de ecuaciones MESH (*Material, Equilibrium, Summing and Heat balances*) y que estarán formadas por los balances de materia, de energía, el sumatorio de las fracciones molares y las relaciones de equilibrio líquido-vapor definidas previamente en el apartado Fundamentos y conceptos previos.

Se seguirá por tanto el procedimiento de cálculo expuesto en la bibliografía para el diseño riguroso de columnas de destilación multicomponente, que también es aplicado a mezclas binarias. El diseño etapa por etapa de la columna sigue un enfoque iterativo, aplicando balances de materia y energía a cada plato. Aunque en la práctica suele asumirse que los flujos internos de vapor y líquido son constantes, debido a que el calor molar de vaporización de los componentes varía poco, el diseño riguroso consiste en el cálculo de los flujos reales en cada etapa. (1)

### 6.1 Cálculos etapa a etapa

Para la resolución de los balances etapa a etapa mediante las ecuaciones MESH, es necesario partir de ciertas estimaciones iniciales que permitan iniciar el proceso iterativo. El procedimiento general de cálculo para cada etapa se muestra a continuación.

En la Figura 6 se observa la representación gráfica de los flujos en las etapas de la columna, siendo  $N+1$  la etapa perteneciente a la caldera y  $N$  el número total de platos.

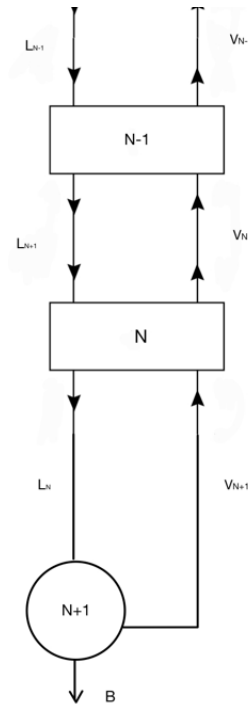


Figura 6. Representación de los flujos en las etapas de la columna. Fuente: Elaboración propia a partir de (2)

### 6.1.1 Etapa n+1. Cálculo de la caldera.

En primer lugar, se asume un valor inicial para la relación entre el vapor que asciende de la caldera,  $V_{N+1}$ , y el líquido descendente proveniente de la etapa n,  $L_n$ . La caldera actúa como una etapa adicional, y se denomina etapa n+1. De esta manera, y realizando el balance de materia a la caldera aplicando la ecuación [22], se determinan los flujos  $L_n$  y  $V_{N+1}$ . Los datos necesarios y obtenidos de realizar el balance de materia a la caldera se muestran en la Tabla 11.

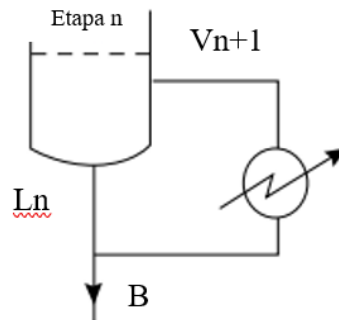


Figura 7. Representación de los flujos en la caldera. Fuente: Adaptado de (1)

Tabla 11. Resultados del balance a la caldera. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$\frac{V_{n+1}}{L_n}$	0,15
$V_{n+1} \left( \frac{kmol}{h} \right)$	1,25
$L_n \left( \frac{kmol}{h} \right)$	8,12
$B \left( \frac{kmol}{h} \right)$	6,87

Además, se establece como objetivo la composición para el producto de colas, en particular para el componente pesado (dodecibenceno), de acuerdo con los datos mostrados en la Tabla 9. Una vez determinadas las condiciones iniciales, se puede dar inicio al procedimiento iterativo de cálculo etapa por etapa.

En primer lugar, se debe realizar el cálculo de la temperatura de las corrientes que entran y salen de la columna. La temperatura en la caldera se obtiene mediante la ecuación [23], que determina la temperatura de burbuja de la corriente de fondo, la cual también se considera como la temperatura de equilibrio de la caldera.

Se debe asumir una temperatura y se calculan las presiones de vapor de los compuestos utilizando la ecuación [8] y ecuación [9], para posteriormente obtener las constantes de equilibrio con la ecuación [2]. A continuación, se emplea la ecuación [23] y se comprueba que el sumatorio iguale la unidad y que, por tanto, la temperatura asumida es la temperatura de burbuja de la mezcla. Se muestran en la Tabla 12 el procedimiento de cálculo de la temperatura de burbuja de la corriente de colas.

Tabla 12. Cálculo de la temperatura de colas. Fuente: Elaboración propia.

$T^a=236,55^{\circ}\text{C}$			
	$x_{n+1}$	$K_i = \frac{P_i}{P_T}$	$y_{n+1} = K_i x_{n+1}$
Dodeceno	0,00027	17,078	0,0046
Dodecibenceno	0,999	0,996	0,995
			$\sum y_i = 1$

Además, se estiman la temperatura de la alimentación y del vapor que sale como destilado por cabezas con la ecuación [23] y la ecuación [24] respectivamente. A continuación, empleando las ecuaciones [14] y [15] y la composición molar de las corrientes, se calcula la entalpía. Por tanto, dichos valores se muestran en la Tabla 13.

Tabla 13. Temperaturas de las corrientes. Fuente: Elaboración propia.

Corriente	T <sup>a</sup> (°C)	Entalpía (kJ/kmol)
Alimentación, F	216,04	135.802
Destilado, D	153,84	186.904
Colas, B	236,55	154.700

A continuación, se emplean las ecuaciones del balance a la caldera, ecuación [18] y ecuación [19], que derivan en la ecuación [26], con la que se obtiene la composición del líquido procedente de la etapa n.

$$x_n = \frac{V_{n+1}}{L_n} \cdot y_{n+1} + \frac{B}{L_n} \cdot x_B \quad [26]$$

Se muestra en la Tabla 14 un resumen de los datos obtenidos de aplicar las ecuaciones MESH a la caldera.

Tabla 14. Resultados de aplicar las ecuaciones MESH a la caldera. Fuente: Elaboración propia.

T <sup>a</sup> (°C)	L <sub>n</sub> ( $\frac{kmol}{h}$ )	x <sub>n,ddb</sub>	V <sub>n+1</sub> ( $\frac{kmol}{h}$ )	y <sub>n+1,ddb</sub>
236,55	8,12	0,999	1,25	0,995

### 6.1.2 Etapa n

Una vez determinada la composición del líquido procedente de la etapa n, se determina mediante el uso de las ecuaciones de equilibrio, la composición del vapor que sale de dicha etapa. Se repite el procedimiento ya descrito anteriormente y se obtiene la temperatura de la etapa n. Por tanto, se muestran los resultados del procedimiento en la Tabla 15.

Tabla 15. Resultados de aplicar las ecuaciones de equilibrio a la etapa n. Fuente: Elaboración propia.

T <sub>n</sub> =236,21°C			
	x <sub>n</sub>	K <sub>n</sub> = $\frac{P_{n,i}}{P_T}$	y <sub>n</sub> = K <sub>i</sub> x <sub>n,i</sub>
Dodeceno	0,00094	16,954	0,0159
Dodecibenceno	0,999	0,985	0,984
			Σy <sub>i</sub> = 1

Una vez se dispone de la temperatura de la etapa, T<sub>n</sub>, se obtienen las entalpías de las corrientes de vapor y líquido que salen en equilibrio de dicha etapa, empleando las Ecuaciones [14] y [15]. En la Tabla 16 se muestran los valores obtenidos del balance de energía a la etapa, siendo los valores de capacidad calorífica y calor de vaporización obtenidos empleando las ecuaciones [10] y [11].

Tabla 16. Datos obtenidos del balance de energía a la etapa n. Fuente: Elaboración propia.

<b>Cálculos etapa n</b>				
	$c_{p,i}$ (kJ/kmol °C)	$\lambda_i$	$h_{n,i} = c_p(T - T_{ref})x_i$	$H_{n,i} = c_p(T - T_{ref})y_i + \lambda_i y_i$
Dodeceno	500,62	42439,54	110,69	2550,23
Dodecilbenceno	653,72	67502,41	154.268,03	218.393,12
			$\Sigma h_{n,i} = 154.378,73$	$\Sigma H_{n,i} =$ 220.943,35

A continuación, se debe determinar la composición del líquido saliente de la etapa n-1,  $x_{n-1}$ , mediante el balance de materia total a la etapa, suponiendo una relación constante V/L, según se muestra en la ecuación [27] y ecuación [28]. Esta relación se debe verificar posteriormente con el balance de energía.

$$x_{n-1} = \frac{V_n}{L_{n-1}} (y_n - y_{n+1}) + x_n \quad [27]$$

$$\frac{V_n}{L_{n-1}} = \frac{V_{n+1}}{L_n} \quad [28]$$

Una vez conocida la composición del líquido, se asume una temperatura  $T_{n-1}$  y se calcula la composición del vapor en equilibrio con el líquido usando las relaciones de equilibrio líquido-vapor. Además del balance de materia global y por componentes, las MESH establecen que se debe cumplir el balance de energía, obteniendo así los valores reales de flujos de vapor y líquido.

Por tanto, se realiza el balance riguroso a la etapa n para obtener los corrientes de entrada y salida, según las siguientes ecuaciones:

$$L_{n-1} + V_{n+1} = L_n + V_n \quad [29]$$

$$L_{n-1}x_{n-1} + V_{n+1}y_{n+1} = L_nx_n + V_ny_n \quad [30]$$

$$h_{n-1}L_{n-1} + H_{n+1}V_{n+1} = h_nL_n + H_nV_n \quad [31]$$

Se emplean la ecuación [29] y [30], despejando  $L_{n-1}$  y  $V_n$ , derivando así en las ecuaciones [32] y [33], con las que se calculan los flujos reales de vapor y líquido de la etapa n.

$$V_n = \frac{L_n h_n - L_n h_{n-1} + V_{n+1} h_{n-1} - V_{n+1} H_{n+1}}{h_{n-1} - H_n} \quad [32]$$

$$L_{n-1} = L_{n-1} + V_{n+1} - V_n \quad [33]$$

Por último, se comprueba que la relación V/L con los nuevos valores es igual a la inicial. Si no se cumple la igualdad se debe iterar hasta obtener la temperatura real  $T_{n-1}$  de la etapa y los flujos  $L_{n-1}$  y  $V_n$ . Se muestran en la Tabla 17 y Tabla 18 los resultados y datos de aplicar el procedimiento.

Tabla 17. Resultados de aplicar el balance de materia y las ecuaciones de equilibrio a la etapa n-1. Fuente: Elaboración propia.

$T_{n-1}=235,36^\circ\text{C}$		
	$x_{n-1}$	$y_{n-1}$
Dodeceno	0,0026	0,043
Dodecibenceno	0,997	0,957
		$\sum y_i = 1$

Tabla 18. Datos del balance de energía a la corriente líquida de la etapa n-1. Fuente: Elaboración propia.

Balance de energía etapa n-1				
	$c_{p,i}$ (kJ/kmol °C)	$\lambda_i$ (kJ/kmol)	$h_{n-1,i}$ $= c_p(T - T_{ref})x_i$	$H_{n-1,i}$ $= c_p(T - T_{ref})y_i$ $+ \lambda_i y_i$
Dodeceno	499,92	42.528,31	303,65	6.883,90
Dodecibenceno	652,98	67.583,085	153.291,46	211.762,52
			$\sum h_{3,i} = 153.595,1$	$\sum H_{3,i} =$ 218.646,4

Por tanto, se muestra en la Tabla 19 el resumen de aplicar las ecuaciones MESH a la etapa n.

Tabla 19. Resultados de aplicar las ecuaciones MESH a la etapa n. Fuente: Elaboración propia.

$T^a$ (°C)	$L_{n-1}$ ( $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ )	$x_{n-1,ddb}$	$V_n$ ( $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ )	$y_{n,ddb}$	$\frac{V_n}{L_{n-1}}$
235,36	8,042	0,997	1,173	0,984	0,15

El procedimiento de cálculo consiste en aplicar las ecuaciones MESH de forma sucesiva en cada etapa de la columna. En cada una de ellas, se determina la temperatura de equilibrio, así como los

flujos reales de líquido y vapor que circulan entre etapas. El proceso se repite de forma iterativa hasta que la corriente de vapor ascendente alcanza la composición de la alimentación.

En el presente diseño, la composición se alcanza en la etapa cinco y, comprobando que se cierra el balance, se verifica que la suposición inicial de  $\frac{V_{n+1}}{L_n} = 0,15$  es correcta.

## 6.2 Resultados del diseño riguroso

A continuación, se muestra en la Tabla 20 los datos obtenidos del diseño riguroso y en la Figura 8 y en la Figura 9, la representación de las composiciones molares y temperatura frente al número de etapas.

Tabla 20. Valores obtenidos del diseño riguroso. Fuente: Elaboración propia.

N	T (°C)	x (ddb)	y (ddb)	V (kmol/h)	L (kmol/h)
0	216,04	0,952	0,484		7,569
1	230,91	0,988	0,486	0,700	7,652
2	233,61	0,994	0,902	0,784	7,886
3	235,36	0,997	0,957	1,017	8,042
4	236,20	0,999	0,984	1,173	8,119
Etapa n+1	236,55	0,9997	0,995	1,250	6,869

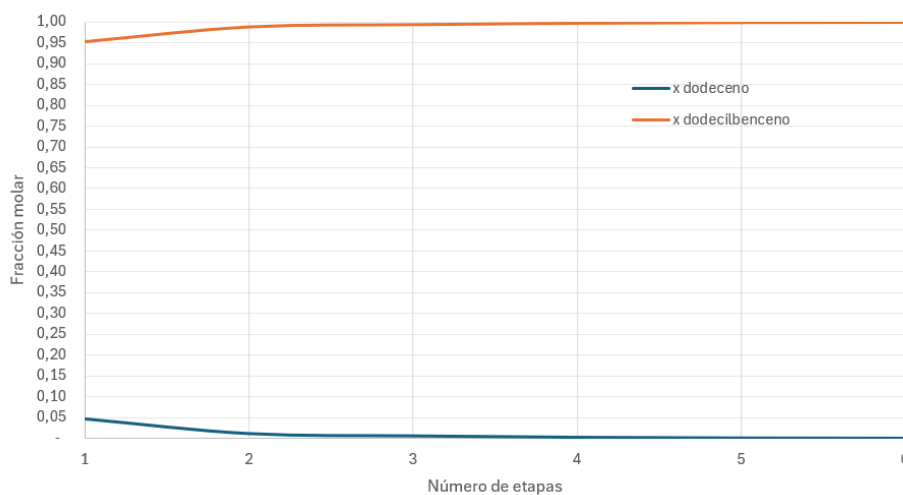


Figura 8. Variación de composiciones molares de dodeceno y dodecilbenceno en las etapas.

Fuente: Elaboración propia.

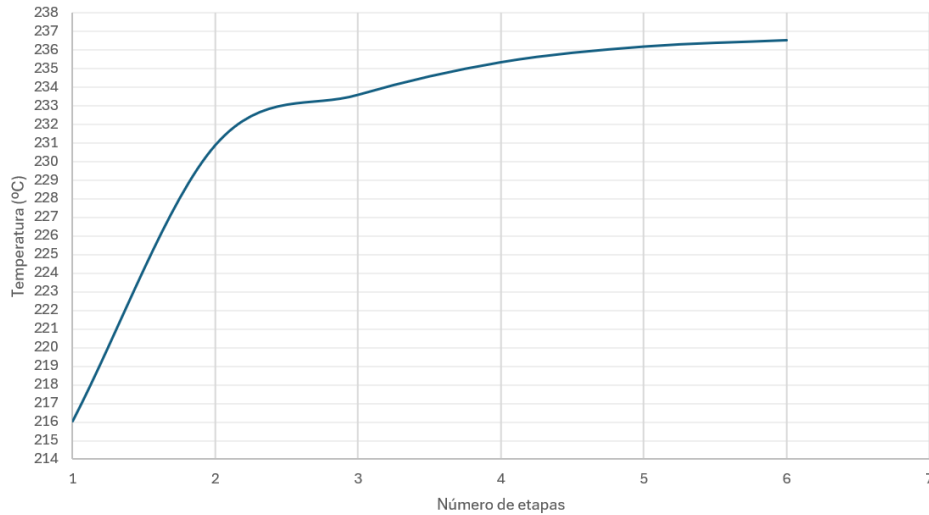


Figura 9. Variación de la temperatura (°C) en las etapas. Fuente: Elaboración propia.

### 6.3 Eficiencia de la columna

Una vez obtenidos los datos del cálculo riguroso con las ecuaciones MESH, se debe realizar el cálculo real de la eficiencia de la columna, con el objetivo de obtener las etapas reales del sistema. Para ello, se emplea la correlación de O’Connell, que solo depende de dos propiedades físicas del sistema. (1)

$$E_o = 51 - 32,5 \log(\mu_m \alpha_m) \tag{34}$$

Donde:

- $\mu_m$ : Viscosidad media molar líquida, cP (cP=mNs/m<sup>2</sup>)
- $\alpha_m$ : Volatilidad relativa media del compuesto ligero

Los datos de volatilidad relativa de la corriente de cabezas y de colas se calculan según la ecuación [3] y se realiza la media geométrica según la ecuación [35]. El valor de la viscosidad media de la corriente de alimentación se obtiene del simulador de datos Aspen HYSYS a la temperatura de dicha corriente.

$$\alpha_m = \sqrt{\alpha_{cabezas} \alpha_{colas}} \tag{35}$$

De tal modo que, definiendo la eficiencia total de la columna como la relación entre el número de etapas reales y el número de etapas ideales, según se muestra en la ecuación [36], se obtiene que la columna dispone de 21 etapas reales, caldera incluida.

$$E_o = \frac{\text{Número de etapas ideales}}{\text{Número de etapas reales}} \tag{36}$$

En la Tabla 21 se muestran los resultados obtenidos del cálculo de la eficiencia real de la columna.

Tabla 21. Resultados obtenidos del cálculo de la eficiencia de la columna. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$\alpha_{cabezas}$	18,15
$\alpha_{colas}$	17,15

$\alpha_m$	17,64
$\mu_m$	0,37
$E_o$	24%
$N_{reales}$	21

## 7 Diseño hidráulico

Una vez completado el cálculo del número de etapas de la columna de destilación, se procede al diseño hidráulico de los platos. Este diseño resulta fundamental, ya que de él depende el rendimiento y la operación eficiente de la columna. Los parámetros hidráulicos descritos en este apartado deben ser cuidadosamente dimensionados para garantizar una adecuada separación de fases, así como evitar problemas operativos como arrastre de líquido o inundación. (1)

### 7.1 Propiedades fisicoquímicas

Aunque la bibliografía disponible recomienda valores de caída de presión por plato de 7,6 cm de H<sub>2</sub>O para columnas de platos, en este diseño se ha optado por un valor de 3 cm de H<sub>2</sub>O por plato con el objetivo de minimizar la caída de presión en la columna. Esta decisión se justifica por el hecho de que la columna opera a presión reducida, donde es deseable minimizar la caída de presión total para facilitar la operación del sistema de vacío y mantener temperaturas de fondo más bajas. (1, 3)

$$\Delta P = \Delta P(mmH_2O) \cdot 10^{-3} \cdot \rho_{H_2O} \cdot g \cdot N \quad [37]$$

Siendo:

- $\Delta P$  : Caída total en la columna, Pa
- $\rho_{H_2O}$ : Densidad del agua, asumida como 1000 kg/m<sup>3</sup>
- $g$ : Aceleración de la gravedad, asumida como 9,81m/s<sup>2</sup>
- $N$ : Número de etapas reales en la columna

Asumiendo un valor de 10 kPa en la corriente de cabezas, se puede calcular la presión de la corriente de colas mediante la suma de la presión de cabezas y la caída de presión total de la columna. A partir de este valor, se puede estimar la temperatura real de dicha corriente empleando la ecuación [23], utilizada para el cálculo de la temperatura de burbuja correspondiente. En la Tabla 22 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 22. Datos obtenidos de presión y temperatura. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$\Delta P$ (Pa)	588,40
$P_{cabezas}$ (kPa)	10
$P_{colas}$ (kPa)	10,59
T <sup>a</sup> cabezas (°C)	230,91
T <sup>a</sup> colas (°C)	238,40

## 7.2 Dimensión aproximada de la columna

### 7.2.1 Espaciado

El tamaño de una columna de destilación depende principalmente del espaciado entre platos y el número de etapas. Según heurísticas, el espaciado recomendable se encuentra en el rango de 0,1-1m, siendo los espaciados menores para columnas de diámetros pequeños. Como primera estimación se supone un espaciado de 0,4 m, al tener en cuenta los requisitos de accesibilidad para limpieza de los platos. (1)

### 7.2.2 Diámetro

El diámetro de la columna está directamente relacionado con el flujo de vapor que circula a lo largo de la misma. Para asegurar un funcionamiento eficiente, es necesario dimensionar la columna de manera que la velocidad del vapor se mantenga por debajo del umbral que provocaría el arrastre del líquido o una caída de presión excesiva. Por ello, el diámetro se determina utilizando la Figura 10, la cual relaciona la velocidad de inundación en platos perforados con el espaciado entre platos seleccionado.

Los flujos molares máximos se obtienen del diseño riguroso y se muestran en la Tabla 23. A continuación, se utilizan la ecuación [38] y [39] para obtener el flujo másico y el caudal volumétrico.

$$\dot{m} = \sum x_i \cdot n \cdot pm_i \quad [38]$$

$$\dot{Q} = \frac{\dot{m}}{\rho} \quad [39]$$

Tabla 23. Caracterización de flujos máximos de líquido y vapor en la columna. Fuente: Elaboración propia.

	Flujo molar (kmol/h)	Flujo másico (kg/s)	Caudal volumétrico, Q (m <sup>3</sup> /s)	Densidad (kg/m <sup>3</sup> )
Líquido máximo	8,12	0,56	0,00080	692,07
Vapor máximo	1,25	0,085	0,064	1,11

La velocidad de inundación del vapor se calculará con un factor de seguridad del 30%, al ser diseñada con un porcentaje de inundación del 70%. Por tanto, la velocidad de inundación,  $u_f$ , se obtiene mediante la ecuación [40].

$$u_f = K_1 \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_v}{\rho_v}} \quad [40]$$

Por tanto, la velocidad nominal de vapor se obtiene según la ecuación [41].

$$\% \text{ inundación} = \frac{u_n}{u_f} \quad [41]$$

La utilización de la Figura 10 requiere la obtención del parámetro  $F_{LV}$ , que se calcula según la siguiente ecuación:

$$F_{LV} = \frac{L_w}{V_w} \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}} \quad [42]$$

Donde:

- $L_w$ : Flujo másico líquido máximo, kg/s.
- $V_w$ : Flujo másico vapor máximo, kg/s.
- $\rho_v$ : Densidad del caudal másico máximo de vapor, kg/m<sup>3</sup>.
- $\rho_L$ : Densidad del caudal másico máximo de líquido, kg/m<sup>3</sup>.

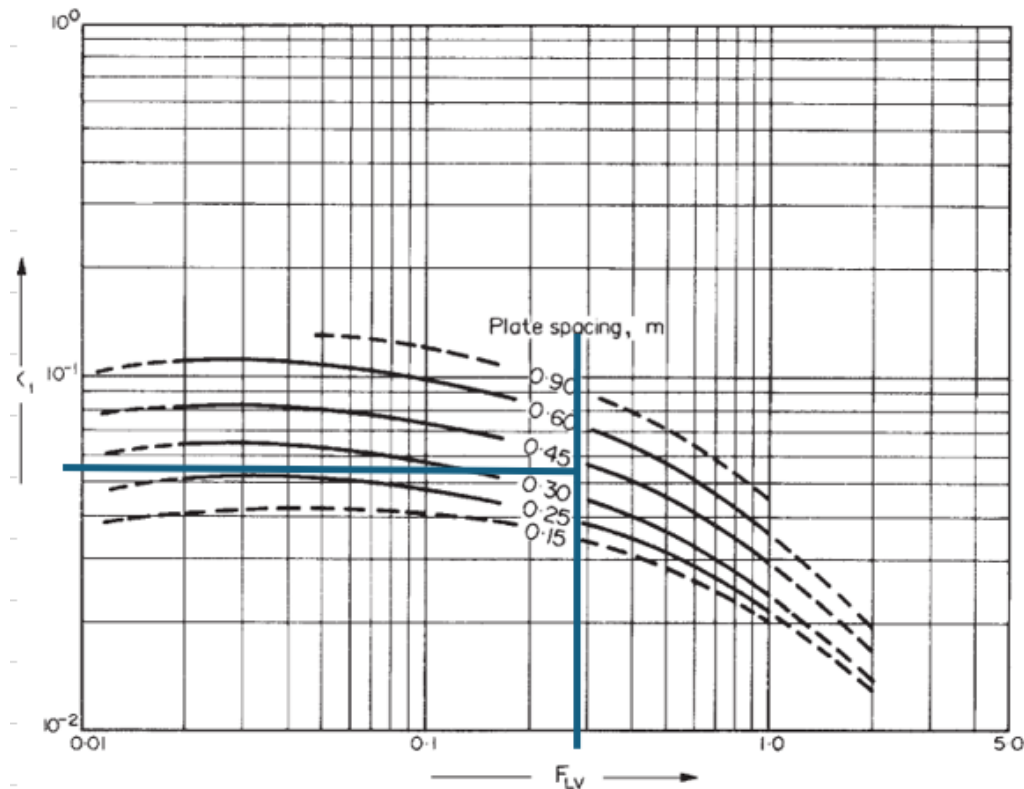


Figura 10. Gráfica para obtención de velocidad de inundación en platos perforados. Fuente:(1)

Las restricciones para emplear este gráfico son las siguientes:

1. El tamaño de los agujeros debe ser menor a 6,5 mm.
2. La altura del rebosadero debe ser menor que el 15% del espaciado de platos.
3. Sistemas no espumantes.
4. El valor del área activa de los agujeros debe ser mayor a 0,10. Para otros valores se aplica un factor de corrección a la constante  $K_1$ . En el presente diseño se decide iniciar con un valor de 0,06 y, por lo tanto, se aplicará una corrección a la constante  $K_1$ , que se multiplica por 0,80. Respecto a la tensión superficial del líquido, si esta es distinta a 0,02N/m se

aplica un factor de corrección a la constante  $K_1$ , y se multiplica por  $\left[\frac{\sigma}{0,02}\right]^{0,2}$ . El valor de la tensión superficial del líquido,  $\sigma$ , se obtiene del simulador Aspen HYSYS.

Por último, para el cálculo del diámetro se debe estimar un valor de área neta, que permitirá calcular el área total transversal de la columna. Se toma como primera suposición que el área de la bajante supone un 13% del área neta. Se emplean las ecuaciones [43],[44] y [45] para el cálculo del diámetro de la columna,  $D_c$ .

$$A_n = \frac{Q_{v,max}}{u_n} \quad [43]$$

$$A_c = \frac{A_n}{1 - \%bajante} \quad [44]$$

$$D_c = \sqrt{\frac{4A_c}{\pi}} \quad [45]$$

Donde:

- $A_n$ : Área neta disponible para la separación,  $m^2$
- $Q_{v,max}$ : Caudal volumétrico máximo de vapor en la columna  $m^3/s$
- $u_n$ : velocidad nominal máxima admisible del vapor,  $m/s$
- $A_c$ : Área total transversal de la columna,  $m^2$

Por tanto, aplicando el método descrito, se obtienen los resultados mostrados en la Tabla 24.

Tabla 24. Valores obtenidos del tamaño aproximado de la columna. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$u_f$ (m/s)	0,99
$u_n$ (m/s)	0,79
$F_{lv}$	0,28
$K_1$ corregido	0,043
$\sigma_{líquido}$ (N/m)	0,015
$A_c$ ( $m^2$ )	0,094
$A_n$ ( $m^2$ )	0,082
$D_c$ (m)	0,347

A continuación, se procede a la estandarización del diámetro de la columna según las normas ANSI B36.10 y BS1600. La Figura 11 muestra diámetros externos y espesores de pared de tuberías comerciales estandarizadas. Como el diámetro calculado resultó en un valor de 0,3469 m, se escoge la tubería de 14 pulgadas (0,3556 m) de diámetro exterior.

El espesor de la tubería es una de las variables independientes del diseño y se escogerá como suposición inicial el espesor con el que el coste sea el mínimo, es decir, el menor espesor disponible, que sería el Schedule 5s. Esta suposición se verificará posteriormente en el cálculo de espesores del diseño mecánico.

Nom size	OD	Schedule vs (Wall thickness in mm)												
		Sched 5s	Sched 10 s=10s	Sched 20	Sched 30	Sched 40	Sched 60	Sched 80	Sched 100	Sched 120	Sched 140	Sched 160	Std.Wal	Extra Strong.
1/8	10,3		s=1,24			1,73		2,41					1,73	2,41
1/4	13,7		s=1,65			2,24		3,02					2,24	3,02
3/8	17,1		s=1,65			2,31		3,2					2,31	3,2
1/2	21,3	1,65	s=2,11			2,77		3,73				4,78	2,77	3,73
3/4	26,7	1,65	s=2,11			2,87		3,91				5,56	2,87	3,91
1	33,4	1,65	s=2,77			3,38		4,55				6,35	3,38	4,55
1 1/4	42,2	1,65	s=2,77			3,56		4,85				6,35	3,56	4,85
1 1/2	48,3	1,65	s=2,77			3,68		5,08				7,14	3,68	5,08
2	60,3	1,65	s=2,77			3,91		5,54				8,74	3,91	5,54
2 1/2	73,0	2,11	s=3,05			5,16		7,01				9,53	5,16	7,01
3	88,9	2,11	s=3,05			5,49		7,62				11,13	5,49	7,62
3 1/2	101,6	2,11	s=3,05			5,74		8,08				5,74	8,08	
4	114,3	2,11	s=3,05			6,02		8,56	11,13			13,49	6,02	8,56
5	141,3	2,77	s=3,4			6,55		9,53	12,70			15,88	6,55	9,53
6	168,3	2,77	s=3,4			7,11		10,97	14,27			18,26	7,11	10,97
8	219,1	2,77	s=3,76	6,35	7,04	8,18	10,31	12,7	15,09	18,26	20,62	23,01	8,18	12,7
10	273,0	3,40	s=4,19	6,35	7,8	9,27	12,70	15,09	18,26	21,44	25,40	28,58	9,27	12,7
12	323,8	3,96	s=4,57	6,35	8,38	10,31	14,27	17,48	21,44	25,4	28,58	33,32	9,53	12,7
14	355,6	3,96	s=4,78 6,35	7,92	9,53	11,13	15,09	19,05	23,83	27,79	31,75	35,71	9,53	12,7
16	406,4	4,19	s=4,78 6,35	7,92	9,53	12,7	16,66	21,44	26,19	30,96	36,53	40,49	9,53	12,7
18	457	4,19	s=4,78 6,35	7,92	11,13	14,27	19,05	23,83	29,36	34,93	39,67	45,24	9,53	12,7
20	508	4,78	s=5,54 6,35	9,53	12,70	15,09	20,62	26,19	32,54	38,10	44,45	50,01	9,53	12,7
22	559	4,78	s=5,54 6,35	9,53	12,70	-	22,23	28,58	34,93	41,28	47,63	53,98	9,53	12,7
24	610	5,54	s=6,35 6,35	9,53	14,27	17,48	24,61	30,96	38,89	46,02	52,37	59,54	9,53	12,7
26	660		7,92	12,7									9,53	12,7
28	711		7,92	12,7	15,88								9,53	12,7
30	762	6,35	s=7,92 7,92	12,70	15,88								9,53	12,7
32	813		7,92	12,70	15,88	17,48							9,53	12,7

Figura 11. Tabla de diámetros estandarizados. Fuente:(8)

### 7.3 Características del plato y patrón de flujo.

En las columnas de destilación se pueden utilizar distintos tipos de platos para lograr el contacto entre vapor y líquido, siendo los tres tipos más comunes los platos perforados, de campana de burbujeo y los platos de válvulas. Cada configuración muestra ventajas y desventajas, pero, debido a la simplicidad de diseño, bajo coste y baja caída de presión esperada, parámetro esencial en el diseño de las columnas a vacío, se escoge el plato perforado. Además, se define el *turndown ratio* como la relación entre el caudal máximo y mínimo que puede manejar eficientemente un plato sin pérdida significativa de rendimiento. (1)

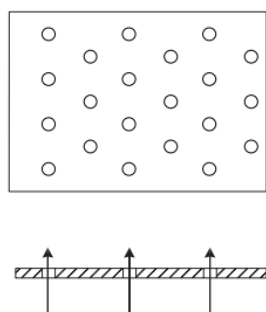


Figura 12. Representación de flujo y disposición de los orificios en un plato perforado. Fuente: (2)

**Patrón de flujo**

En una columna de destilación, el flujo a través de los platos puede tener diferentes configuraciones, siendo la más común el flujo cruzado, en el que el líquido fluye a través del plato mientras que el vapor sube a través de los platos hacia la sección superior de la columna.

Se puede realizar una elección inicial del patrón de flujo en los platos utilizando la Figura 14, que muestra la relación entre el diámetro de la columna y el caudal volumétrico del líquido a través de la columna.

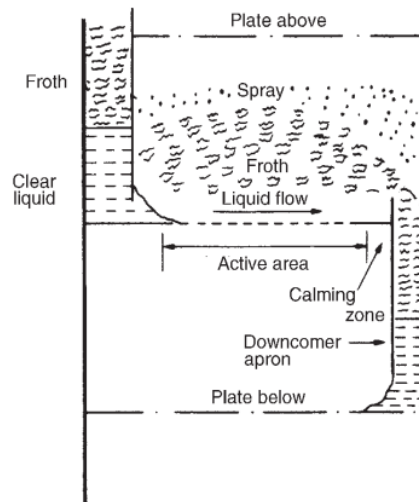


Figura 13. Representación gráfica del flujo en una columna. Fuente: (2)

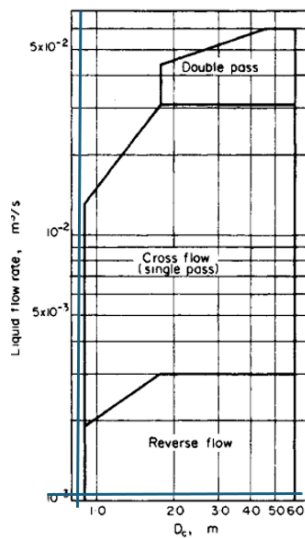


Figura 14. Gráfica para la elección del patrón de flujo. Fuente: (1)

Dado que la columna de destilación cuenta únicamente con una sección (agotamiento), el procedimiento del diseño hidráulico se simplifica, ya que los cálculos se centran en las condiciones extremas de operación de dicha sección. De este modo, se consideran los caudales máximos de vapor y líquido, obtenidos previamente y mostrados en la Tabla 23.

Al ser tanto el valor del caudal de líquido como del diámetro de la columna muy pequeños, el patrón de flujo correspondiente es flujo reverso. No obstante, debido a la escasez de bibliografía

detallada y criterios de diseño específicos para este tipo de configuración en columnas de pequeña escala, se opta por continuar los cálculos bajo la suposición de que podría ser flujo cruzado. Esta elección se justifica por ser el tipo de patrón más ampliamente estudiado en el diseño de columnas de destilación industriales.

El diseño hidráulico de platos en una columna de destilación es un proceso iterativo, en el que se requiere definir una serie de parámetros geométricos y operativos para alcanzar un diseño satisfactorio. Las estimaciones iniciales se realizan en base a heurísticas industriales y referencias bibliográficas, lo que permite una primera aproximación al diseño. (1, 2, 5)

Para ello, es fundamental comprender la estructura interna de una columna de platos, así como la función de cada uno de sus elementos.

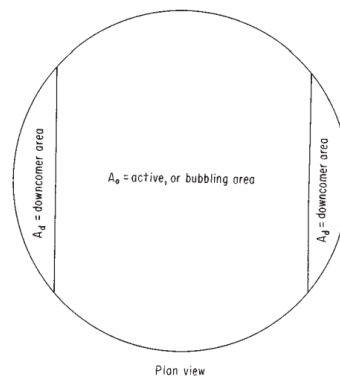


Figura 15. Representación áreas de un plato perforado. Fuente:(9)

El rebosadero en las columnas de destilación es un parámetro clave de diseño, que viene caracterizado por la definición de su altura y longitud. Se define como una pequeña pared en el borde de cada plato, y su función consiste en retener una altura mínima de líquido sobre el plato para asegurar un buen contacto entre el líquido y el vapor. Sus parámetros característicos son los siguientes:

**Altura del rebosadero ( $h_w$ ):** Cuanto mayor es la altura mayor será la eficiencia, pero también será más grande la caída de presión. Para operación a vacío se recomiendan alturas menores, con valores de entre 6 a 12mm. Se asumirá un valor inicial de 11mm.

**Longitud del rebosadero ( $L_w$ ):** Este parámetro afecta directamente al área disponible de la bajante, siendo normalmente entre el 60% y 85% del diámetro de la columna. Se tomará como valor inicial un valor del 75% del diámetro, que equivale a un área de bajante de 0,13. Se emplea por tanto la Figura 16 para determinar la longitud total del rebosadero.

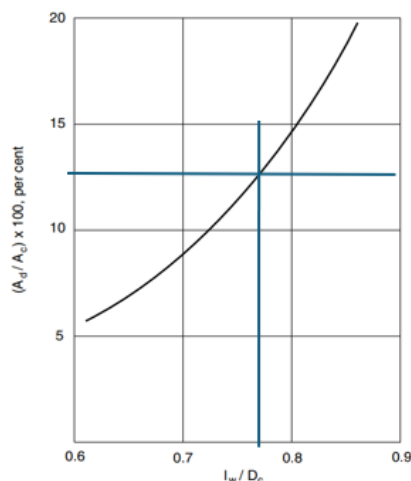


Figura 16. Gráfico para determinar la longitud del rebosadero. Fuente:(1)

El tamaño de los orificios ( $D_h$ ) suele estar entre 2,5 y 12 mm, y pueden fabricarse por punzonado o taladrado, siendo el primero el método más económico. En platos de acero inoxidable, la bibliografía recomienda que el diámetro sea aproximadamente el doble que el espesor del plato ( $l_t$ ). Por tanto, se adopta un diámetro de 6 mm y un espesor de 3 mm, cumpliendo con esta proporción. (1)

**Pitch de los agujeros:** El pitch es la distancia entre los centros de los orificios del plato. Normalmente, su valor se encuentra entre 2,5 y 4 veces que el diámetro del orificio. En el presente diseño se asume inicialmente se un valor equivalente a tres veces el diámetro. Los valores asumidos inicialmente para el diseño de los platos se muestran en la Tabla 25.

Tabla 25. Valores obtenidos del diseño inicial de los platos. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
Altura del rebosadero, $h_w$ (m)	0,011
Longitud del rebosadero, $l_w$ (m)	0,268
Diámetro de los agujeros ( $D_h$ ) (m)	0,006
Espesor del plato, $l_t$ (m)	0,003
Pitch (m)	0,018
$A_h/A_p$	0,1

En el diseño de platos de una columna de destilación, calcular las distintas áreas es fundamental para garantizar una buena eficiencia de contacto entre fases y el correcto dimensionamiento del equipo. Se definen a continuación las áreas características de la columna:

$A_c$ : Área total transversal de la columna.

$A_n$ : Área neta disponible para la separación entre la fase vapor y líquida, calculada con la siguiente ecuación,

$$A_n = A_c - A_d \quad [46]$$

$A_d$ : Área de la bajante.

$A_a$ : Área activa total. Se calcula con la siguiente ecuación,

$$A_a = A_c - 2A_d \quad [47]$$

$A_h$ : Área activa de todos los agujeros.

$A_p$ : Área perforada total.

El área disponible para ser perforada en un plato no corresponde a toda la superficie activa, ya que existen otros elementos internos que ocupan parte de ese espacio, como el uso de anillos de soporte, vigas estructurales y las zonas calmadas. El cálculo riguroso de este parámetro se realizará una vez definido por completo el plato, por lo que se obtendrá la relación  $A_h/A_p$  mediante la ecuación [48]. (2)

$$\frac{A_h}{A_p} = 0,9 \left[ \frac{d_h}{l_p} \right]^2 \quad [48]$$

Se muestran en la Tabla 26 los valores obtenidos del cálculo preliminar de las diferentes áreas de la columna.

Tabla 26. Valores característicos de las áreas de la columna. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$A_c$	0,095
$A_n$	0,082
$A_d$	0,012
$A_a$	0,070
$A_h$	0,004
$A_h/A_p$	0,100

#### 7.4 Comprobación de la velocidad de goteo

La velocidad de goteo es la velocidad mínima de vapor que evita el paso excesivo de líquido a través de los orificios del plato (*weeping*). Este valor define el límite inferior de operación de la columna, obteniendo el valor mínimo que debe tener el flujo de vapor. Para garantizar un funcionamiento eficiente, el área de los agujeros se dimensiona de forma que, incluso a condiciones de operación mínimas, la velocidad del vapor supere este umbral. Se utiliza para ello la correlación de Eduljee, mostrada en la ecuación [49]. (1)

$$\check{u}_h = \frac{[K_2 - 0,90(25,4 - d_h)]}{(\rho)^{1/2}} \quad [49]$$

Donde:

- $\check{u}_h$ : Velocidad mínima del vapor a través de los agujeros, m/s
- $d_h$ : diámetro de los agujeros, mm
- $K_2$ : Constante obtenida con Figura 17

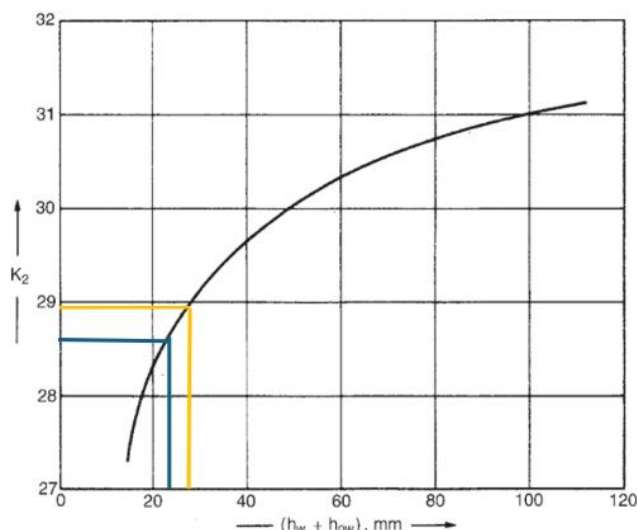


Figura 17. Gráfica para obtención de velocidad de goteo. Fuente:(1)

La utilización del gráfico requiere obtener el valor de  $h_w$  y  $h_{ow}$ , correspondientes a la altura del rebosadero y a la altura del líquido sobre el rebosadero en condiciones de operación. Este último valor se obtiene empleando la ecuación [50]. Los resultados correspondientes se muestran en la Tabla 27.

$$h_{ow} = 750 \left[ \frac{L_w}{\rho_L l_w} \right]^{\frac{2}{3}} \quad [50]$$

Donde:

- $L_w$ : Flujo mínimo de líquido en la columna, kg/s
- $\rho_L$ : Densidad de la corriente líquida, kg/m<sup>3</sup>
- $l_w$ : Longitud del rebosadero, m

Tabla 27. Valores obtenidos de la comprobación de la velocidad de goteo. Fuente: Elaboración propia.

	$\check{u}_h$ (m/s)	how (mm)	hw+how (mm)	K2	Lw (kg/s)
Mínimo	8,74	12,30	23,30	28,6	0,39
Máximo	9,35	15,60	26,70	29,00	0,56

Para el cálculo del caudal másico de líquido para condiciones mínimas se considera un factor de *turndown* del 70% del máximo alcanzable en la columna de destilación según la ecuación [51].

$$L_{w,min} = Q_{l,max} \cdot turndown \quad [51]$$

Una vez obtenidas las velocidades en la columna en condiciones extremas, se comprueba que la velocidad mínima del vapor real sea superior a estos valores. Por tanto, la velocidad mínima real del vapor se calcula empleando la ecuación [52], y se comprueba que el resultado es superior a las velocidades de goteo calculadas en el presente apartado.

$$\check{u}_v(real) = \frac{V_{w,min}}{A_h} = 10,79 \text{ m/s} \quad [52]$$

## 7.5 Comprobación caída de presión

La caída de presión que experimenta una columna de destilación es un parámetro especialmente importante en columnas de destilación a vacío, ya que al trabajar a presiones reducidas se pretende conseguir la reducción de las temperaturas de ebullición de los compuestos presentes en la mezcla. Se comprueba por tanto que la estimación inicial de la caída de presión se verifica en el cálculo riguroso.

### 7.5.1 Caída de presión en el plato seco

Corresponde a la pérdida de carga por el paso del vapor a través de los agujeros del plato, y se calcula con la ecuación [53].

$$h_d = 51 \left[ \frac{u_h}{C_0} \right] \frac{\rho_v}{\rho_L} \quad [53]$$

Donde:

- $C_0$ : Coeficiente de descarga del orificio, obtenido con la Figura 18, en función del porcentaje de área perforada y la relación  $l_t/D_h$
- $u_h$ : Velocidad de vapor a través de los agujeros, m/s
- $\rho_v$ : Densidad del vapor,  $\text{kg/m}^3$
- $\rho_L$ : Densidad del líquido,  $\text{kg/m}^3$

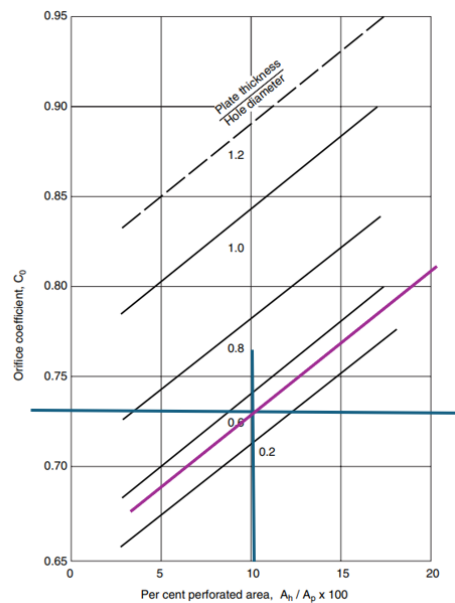


Figura 18. Obtención del coeficiente  $C_0$  para el cálculo de la caída de presión. Fuente: (1)

### 7.5.2 Caída de presión en la cabeza residual

Consiste en un factor de corrección por efectos como la formación de espuma y la densidad de líquido aireado (*froth*). Se emplea la siguiente ecuación:

$$h_r = \frac{12,5 \cdot 10^3}{\rho_L} \quad [54]$$

### 7.5.3 Caída de presión total del plato

Se calcula la caída de presión total en un plato,  $h_t$ , como la suma de los términos anteriores según la siguiente ecuación:

$$h_t = h_d + (h_w + h_{ow}) + h_r \quad [55]$$

### 7.5.4 Caída de presión total en la columna

Por último, se emplea la caída de presión en un plato para calcular la caída de presión total en la columna, según la Ecuación [56]. Se muestran los datos obtenidos en la Tabla 28.

$$\Delta P_t = 9,81 \times 10^{-3} h_t \rho_L \quad [56]$$

Tabla 28. Valores obtenidos del cálculo de la caída de presión real. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$h_d$ (mm líquido)	42,04
$h_r$ (mm líquido)	18,06
$h_t$ (mm líquido)	86,70
$h_w + h_{ow}$ (mm líquido)	26,60
$\Delta P_t$ (Pa)	588,37
% error	0

## 7.6 Comprobación del retorno de la bajante y tiempo de residencia

El cálculo del retorno de la bajante y del tiempo de residencia del líquido en la bajante es fundamental para asegurar que la columna funcione correctamente y evitar problemas como la inundación de los platos.

El retorno de la bajante se refiere a la altura total del líquido y espuma acumuladas en la bajante, medida desde la superficie del plato inferior hasta el nivel de líquido en el plato superior. Esta altura debe ser inferior a la parte superior del rebosadero del plato superior, ya que de lo contrario provocaría inundación. Este retorno se debe a la caída de presión de los platos y la propia resistencia al flujo en la bajante. Se obtiene mediante la ecuación [57] la altura total del retorno en la bajante.

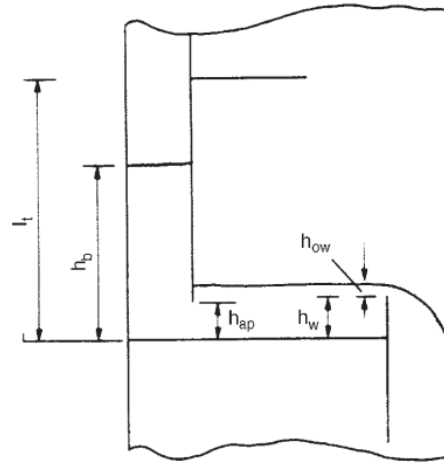


Figura 19. Retorno de la bajante. Fuente: (1)

$$h_b = (h_w + h_{ow}) + h_t + h_{dc} \quad [57]$$

Donde:

- $h_b$ : Altura total del retorno en la bajante, mm
- $h_w$ : Altura del rebosadero
- $h_{ow}$ : Altura de la cresta del líquido sobre el rebosadero
- $h_t$ : Caída de presión total del plato
- $h_{dc}$ : Pérdida de carga en la bajante, obtenida mediante la ecuación [58]

El término  $h_{dc}$  de la ecuación [57] corresponde a la pérdida de carga en la bajante, y se calcula en función del caudal másico en la bajante, que se considera como el flujo másico máximo en la columna y el área  $A_m$ , que corresponderá al área más pequeña entre el área de la bajante o el área libre por debajo de la bajante  $A_{ap}$ .

$$h_{dc} = 166 \left[ \frac{L_w d}{\rho_L A_m} \right]^2 \quad [58]$$

El área libre por debajo de la bajante se calcula de acuerdo con la ecuación [59], donde  $h_{ap}$  es el área libre bajo la bajante y  $l_w$  la longitud del rebosadero. Se emplea la ecuación [60] restando 6,8 mm a la altura del rebosadero, valor escogido según bibliografía. (1)

$$A_{ap} = h_{ap} l_w \quad [59]$$

$$h_{ap} = h_w - (5 - 10 \text{ mm}) \quad [60]$$

Por último, se comprueba que el cálculo de la altura correspondiente al retorno de la bajante sea menor que el término obtenido con la ecuación [61], con el objetivo de evitar la inundación en los platos. Los datos obtenidos se muestran en la Tabla 29.

$$h_b \leq \frac{1}{2} l_t + h_w \quad [61]$$

Tabla 29. Valores obtenidos de la comprobación del retorno de la bajante. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$h_b$ (m)	0,198
$\frac{1}{2}l_t + h_w$ (m)	0,205
$h_{dc}$ (m)	84,63
$A_{ap}=A_m$ (m <sup>2</sup> )	0,0011
$h_{ap}$ (m)	0,0042
$\rho_L$ (kg/m <sup>3</sup> )	692,07

El siguiente paso en el procedimiento es la comprobación de que el tiempo de residencia del líquido en el plato sea superior a 3 segundos. Superar este valor es importante para permitir que el vapor arrastrado se separe del líquido antes de pasar al siguiente plato. El tiempo de residencia se obtiene mediante la ecuación [62].

$$t_r = \frac{A_d h_{bc} \rho_L}{L_{wd}} \quad [62]$$

Se muestran en la Tabla 30 los resultados obtenidos, así como los parámetros necesarios para el uso de la ecuación [62].

Tabla 30. Valores obtenidos del tiempo de residencia. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$A_d$ (m <sup>2</sup> )	0,01
$L_{wd}$ (kg/s)	0,56
$t_r$ (s)	3,04

## 7.7 Comprobar porcentaje de inundación y arrastre

Por último, se comprueba que el porcentaje asumido al inicio del diseño, establecido como un 80% y empleado en el cálculo de la velocidad de inundación del vapor, se cumple satisfactoriamente.

En primer lugar, se calcula la velocidad real del vapor basada en el área neta en m/s,  $u_{n,real}$  según la ecuación [64], y se emplea la ecuación [63] para el cálculo del porcentaje de inundación real. Se muestran los datos obtenidos en la Tabla 31.

$$\% \text{ inundación, real} = \frac{u_n}{u_f} \quad [63]$$

$$u_{n,real} = \frac{Qv, max}{A_n} \quad [64]$$

Tabla 31. Comprobación del porcentaje de inundación. Fuente: Elaboración propia.

	Inicial	Real
$u_n$	0,786	0,79
%	80	79,64

Como se observa, el porcentaje de inundación asumido inicialmente es mayor que el comprobado posteriormente, por lo que se da por válido el diseño hidráulico de la columna de destilación.

El arrastre del líquido es el fenómeno por el cual parte del líquido del plato es arrastrado hacia arriba por el vapor, lo que reduce la eficiencia de la separación y puede provocar acumulación no deseada de líquido en platos superiores. La correlación propuesta por Fair (1961) permite obtener el arrastre fraccional como fracción másica,  $\psi$  (kg de líquido arrastrado / kg de líquido total en el plato), mediante el uso de la Figura 20. El arrastre de líquido debe ser inferior a 0,1 según la bibliografía, y se muestra en la Tabla 32 el cumplimiento de este requisito. (1)

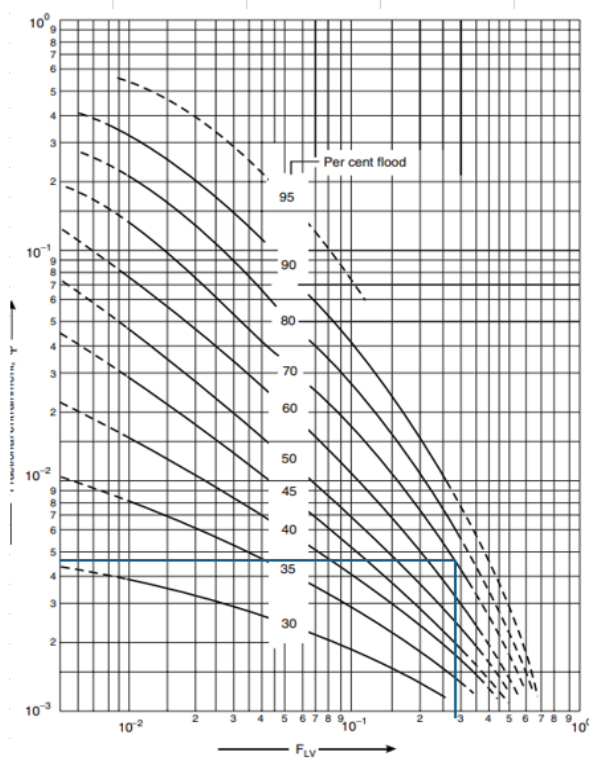


Figura 20. Correlación para obtener el arrastre de líquido en platos perforados. Fuente:(1)

Tabla 32. Arrastre de líquido en la columna. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$\Psi$	0,0046

## 7.8 Diseño final de los platos

Para finalizar el diseño hidráulico de los platos de la columna de destilación, en este apartado se especifican los parámetros geométricos restantes necesarios para definir por completo la configuración interna. Debido a que el diámetro es inferior a 1,2 m, se opta por una construcción de tipo cartucho. Esta disposición consiste en montar paquetes de platos completamente ensamblados, que se insertan en el interior del equipo como una unidad. Este método permite una instalación y desinstalación más sencilla en columnas estrechas y de gran altura, al no ser viable el montaje por los operarios. (1)

Se debe tener en cuenta en el diseño de los platos, que se dejan 50 mm alrededor del plato sin perforar y otros 50 mm de ancho para las zonas calmadas, tal como recomienda la bibliografía. (2)

Por último, se introducen una serie de parámetros geométricos del plato para poder definirlo por completo;

- $\theta_c$ : Ángulo subtendido por el borde del plato, °
- $l_h$ : Altura del arco del plato desde el centro hasta el borde, m
- $\theta_s$ : Ángulo subtendido por el borde de la placa, °
- $l_a$ : Ancho del borde del plato sin perforar, m

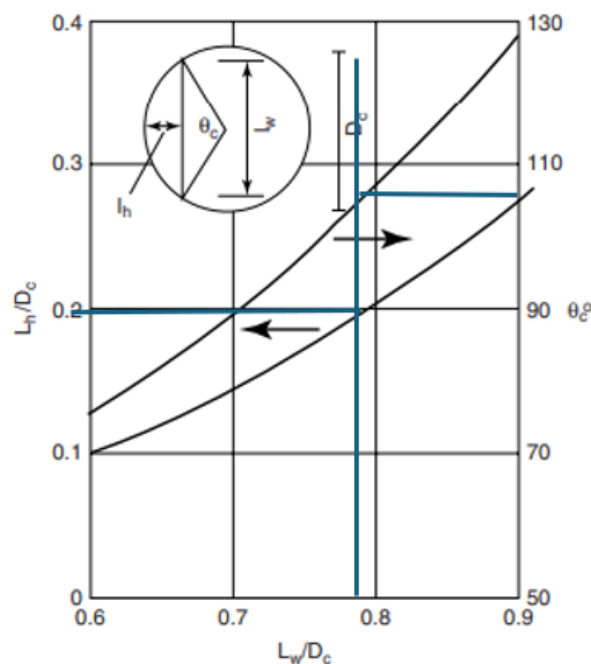


Figura 21. Relación entre el ángulo subtendido por la cuerda, la altura y la longitud. Fuente: (1)

Mediante el uso de la Figura 21, y conocido el cociente  $L_w/D_c$ , se obtienen los valores de las relaciones  $L_h/D_c$  y  $\theta_c$ . Una vez obtenido el ángulo subtendido por la cuerda,  $\theta_c$ , se puede hallar el ángulo subtendido por el borde no perforado,  $\theta_s$ , a partir de la ecuación [65].

$$\theta_s = 180 - \theta_c \quad [65]$$

Los datos geométricos de la configuración del plato se muestran en la Tabla 33.

Tabla 33. Parámetros geométricos del plato. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$L_w/D_c$	0,77
$\theta_c$ (°)	108
$\theta_s$ (°)	72
$L_h/D_c$	0,2
$L_h$ (m)	0,07
$l_a$ (m)	0,05

Una vez definido por completo, se procede al cálculo de los agujeros activos en cada plato, para lo cual es necesario calcular el área de un orificio. Se emplea la ecuación [66], en la que  $d_o$  es el diámetro de orificio escogido en el diseño.

$$A_{orificio} = \pi \cdot \frac{d_o^2}{4} \quad [66]$$

El número de agujeros totales dependen del área disponible para ser perforada en el plato, por lo que se necesita obtener dicho valor previamente.

En primer lugar, se obtiene el área de los bordes sin perforar, mediante la ecuación [67].

$$A_{np} = l_{np} l_a \quad [67]$$

Donde:

- $A_{np}$ : Área de los bordes sin perforar, m<sup>2</sup>
- $l_{np}$ : Longitud media de los bordes sin perforar (circunferencia ocupada por tiras no perforadas), m
- $l_a$ : Ancho del borde del plato sin perforar, m

La longitud media de los bordes sin perforar,  $l_{np}$ , necesaria para el cálculo de  $A_{np}$ , se obtiene mediante la ecuación [68].

$$l_{np} = (D_c - l_a) \pi \cdot \frac{\theta_s}{180} \quad [68]$$

A continuación, se calcula la longitud media de la zona calmada,  $L_{zc}$ , y el área de la zona calmada,  $A_{zc}$ , empleando la ecuación [69] y [70].

$$L_{zc} = l_w + l_a \quad [69]$$

$$A_{zc} = 2 \cdot L_{zc} \cdot l_a \quad [70]$$

Se obtiene, por tanto, el área disponible para ser perforada restando al área total activa del plato el área correspondiente al borde no perforado y la destinada a la zona de calma, tal y como se expresa en la ecuación [71].

$$A_p = A_a - A_{np} - A_{zc} \quad [71]$$

Una vez determinada el área del plato disponible para ser perforada, así como el área de cada orificio, se procede al cálculo del número total de agujeros activos por plato. Este valor se obtiene mediante el uso de la ecuación [72].

$$N^{\circ}_{orificios} = \frac{A_p}{A_{orificio}} \quad [72]$$

Tabla 34. Parámetros geométricos del plato perforado. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$l_{np} (m)$	0,37
$A_{np} (m^2)$	0,019
$L_{zc} (m)$	0,32
$A_{zc} (m^2)$	0,017
$A_p (m^2)$	0,035
$A_{orificio} (m^2)$	$2,83 \cdot 10^{-5}$
$N^{\circ}_{orificios}$	1230

## 8 Diseño mecánico

Una vez realizados los cálculos correspondientes a los fenómenos físicos y químicos que ocurren en la columna, se debe realizar el diseño mecánico correspondiente al recipiente. El procedimiento general y las fórmulas utilizadas se encuentran explicados en la *Parte A: Consideraciones generales* del presente anexo, pero para el diseño de la presente columna de destilación se deben aplicar algunas modificaciones, al ser un recipiente sometido a vacío.

En el diseño de recipientes sometidos a presión, el enfoque varía significativamente si se trata de presión interna positiva o de presión externa, como en el caso de columnas que operan a vacío o de equipos con camisa (*jacketed vessels*). Se realizará el diseño considerando la columna como un recipiente cilíndrico vertical sometido a presión externa, siguiendo el código de diseño *ASME boiler and Pressure Vessel Code, Sección VIII, División 1*. (1, 10)

A diferencia del diseño mecánico de recipientes sometidos a presión interna, donde el modo principal de fallo es la falla por tracción, en el diseño de recipientes sometidos a presión externa, el modo de fallo predominante es el colapso por pandeo (*buckling*) debido a esfuerzos de compresión en las paredes del recipiente. Por tanto, el procedimiento de diseño variará, y se seguirán los procedimientos de cálculo para diseño mecánico por presión externa según el código ASME.

## 8.1 Presión de operación

Cuando un equipo está sometido a presión externa, como es el caso de las columnas que operan a vacío, el diseño mecánico debe garantizar su integridad estructural frente a colapso por pandeo. Según las recomendaciones del *ASME Boiler and Pressure Vessel Code*, la presión de diseño se debe fijar de tal manera que simule la máxima presión diferencial que pueda presentarse en servicio. Los recipientes sometidos a vacío, de no contar con un sistema confiable para romper el vacío, deben diseñarse para una presión negativa de 1 bar.

$$P_{diseño} = -1bar \quad [73]$$

$$\Delta P_{diseño} = P_{atm} - P_{interna,mínima} = 1 bar \quad [74]$$

En ausencia de un sistema rompedor de vacío (*vacuum breaker*), y siguiendo las recomendaciones del ASME BPVC, se adopta una presión de diseño negativa de 1 bar, equivalente a un vacío absoluto de 0 bar, garantizando así la resistencia del recipiente frente a cualquier eventual colapso por presión externa.

Por tanto, para los cálculos posteriores se tomará la presión de diseño como la diferencia entre la presión atmosférica y la mayor presión de vacío que se pueda alcanzar en el interior de la columna, tal y como se muestra en la ecuación [74].

## 8.2 Temperatura de diseño

Tal y como se especifica en *Parte A: Consideraciones generales*, la temperatura de diseño se obtiene mediante la *ecuación [6]* de dicho anexo.

Tabla 35. Datos de temperatura de diseño. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
T <sub>máx</sub> (°C)	239
T <sub>diseño</sub> (°C)	267

## 8.3 Propiedades físicas del material

El material seleccionado para la construcción de la columna de destilación es acero inoxidable tipo 304, según se encuentra explicado en el apartado 2. *Selección del material* de la *Anexo II. Parte A: Consideraciones generales*, en el cual se emplea la metodología Ashby. Para determinar la tensión máxima admisible (SS) se recurre a los valores proporcionados por la bibliografía. (2)

Dado que la temperatura de diseño de la columna de destilación es de 512,20°F, y que en la tabla no se dispone de un valor exacto para dicha temperatura, se adopta el siguiente valor correspondiente obtenido con la *Figura 3* de la *Parte A: Consideraciones generales*, siendo de 700 °F. Para esta temperatura, el valor del esfuerzo máximo admisible es 11,7 psi. Esta decisión supone un factor de seguridad adicional, al emplear una tensión admisible más restrictiva, lo que atribuye un diseño que asegure condiciones de operación más seguras.

Por otra parte, se obtienen los datos de conductividad térmica y densidad del acero inoxidable AISI 304 a la temperatura de diseño, que se corresponde con un valor de 539,9 K y, por lo tanto, se obtienen los datos según la bibliografía a 600 K. (10)

Tabla 36. Datos fisicoquímicos del material de diseño. Fuente:(10)

Parámetro	Valor
$\rho_{\text{acero inoxidable 304}}$ , kg/m <sup>3</sup>	7900
$k_{\text{acero inoxidable 304}}$ W/(m·K)	19,8
$c_p$ (J/kg·K)	557

## 8.4 Cálculo de espesores

Dado que la columna de destilación opera bajo vacío, el diseño del espesor de la carcasa y de los cabezales deben seguir los criterios aplicables a presión externa. En estos casos, las fórmulas habituales para recipientes sometidos a presión interna no resultan válidas. Por ello, se recurre a lo establecido por el código ASME BPVC, concretamente en las secciones UG-28 y UG-30, que regulan el diseño frente al colapso por pandeo en recipientes cilíndricos. (11)

### 8.4.1 Espesor de la carcasa

El procedimiento comienza asumiendo un espesor inicial, en este caso correspondiente al valor estandarizado previamente según el diámetro seleccionado para la carcasa. Para cilindros con una relación  $L/D_o \geq 10$  se sigue el procedimiento explicado a continuación.

En primer lugar, se calcula la relación geométrica  $L/D_o$  y  $D_o/t$ , donde:

- L: Longitud libre entre refuerzos o discontinuidades estructurales. Como primera estimación se calculan los parámetros sin el uso de anillos rigidizadores, por lo que L se asume como la altura total de la columna.
- $D_o$ : diámetro exterior del recipiente, m
- t: Espesor mínimo requerido del recipiente, mm

Posteriormente, y considerando el material de fabricación del recipiente, se obtiene la gráfica correspondiente según el código de diseño ASME y, teniendo en cuenta la temperatura de diseño, se realiza una recta horizontal hasta el valor correspondiente de  $D_o/t$ , interpolando para valores intermedios. Se busca la vertical que interseca estos dos parámetros y se obtiene el factor A de la Figura 22. Los parámetros necesarios se muestran en la Tabla 37. (12)

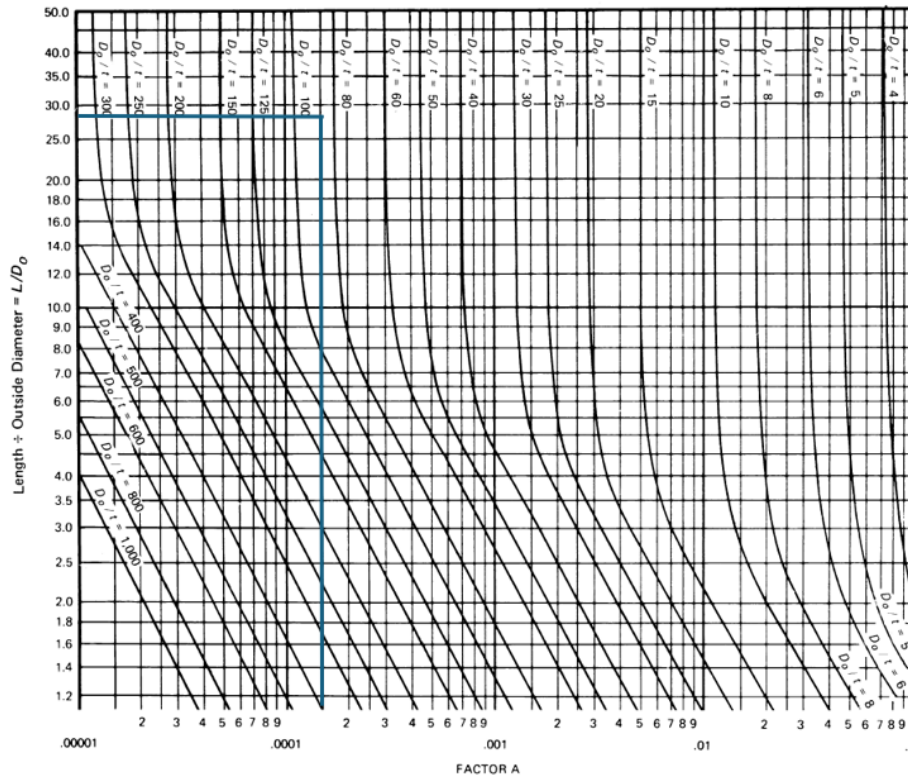


Figura 22. Gráfica para obtención del Factor A. Fuente: (12)

Tabla 37. Valores obtenidos en el cálculo del Factor A. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
L (mm)	9258,67
t (mm)	3,96
L/D <sub>o</sub>	26,04
D <sub>o</sub> /t	89,80
Factor A	0,00015

A continuación, se emplea el factor A previamente calculado con la Figura 22 de acuerdo con obtener el factor B.

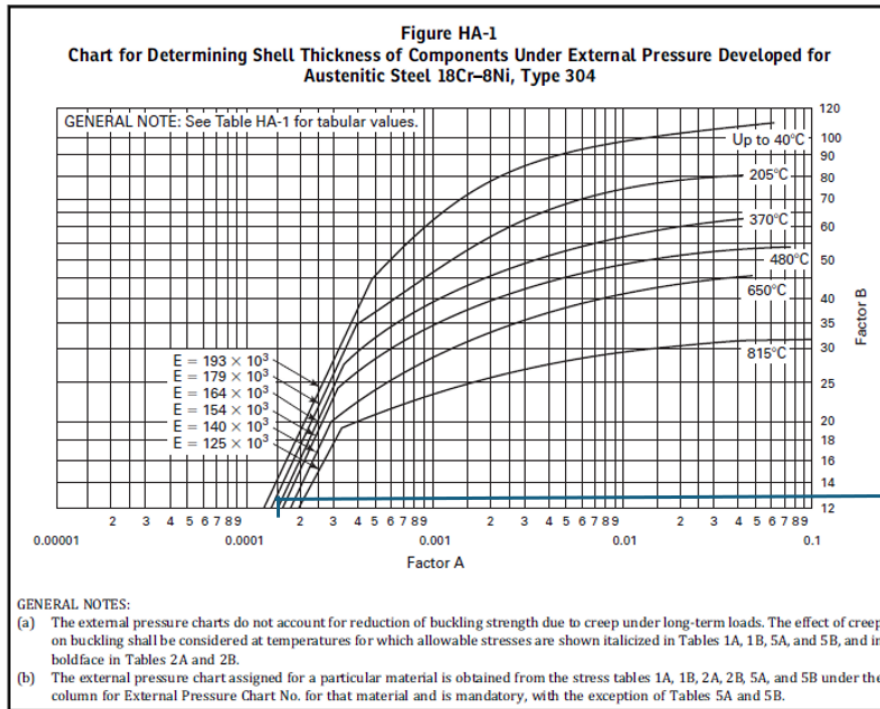


Figura 23. Gráfica para la obtención del Factor B. Fuente:(12)

Por último, se emplea la ecuación [75] para el cálculo de la presión máxima externa admisible,  $P_a$ , que debe ser mayor que la presión de diseño.

$$P_a = \frac{4B}{3\left(\frac{D_o}{t}\right)} \quad [75]$$

Se muestran en la Tabla 38 los resultados de los cálculos anteriores y se comprueba, efectivamente, que el espesor de carcasa asumido inicialmente proporciona una presión externa máxima admisible mayor a la de diseño. Por último, se le añaden 2 mm para prevenir la corrosión.

Tabla 38. Resultados obtenidos del cálculo de la presión máxima admisible. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
Factor B	13
$P_a$ (MPa)	0,193
t (mm)	5,96

### 8.4.2 Selección y dimensionamiento de los cabezales

Siguiendo el procedimiento descrito en la *Parte A: Consideraciones generales*, se procede al cálculo del espesor requerido para tres tipos de cabezales comúnmente utilizados; hemisférico, elíptico (2:1) y torisférico. Esta evaluación permitirá seleccionar el tipo de cabezal más adecuado para la columna de destilación.

Al igual que en el cálculo del espesor de la carcasa, y dado que la columna opera bajo presión externa, el cálculo del espesor debe realizarse conforme a lo indicado en la Sección UG-33 del

*ASME Boiler and Pressure Vessel Code*, el cual regula el diseño de cabezales sometidos a presión sobre su lado convexo. (11)

Con el fin de asegurar consistencia en el diseño, se asumirá como valor inicial para todos los casos un espesor de cabezal igual al utilizado en la carcasa de la columna, de 3,96 mm.

Se definen las siguientes variables que se usarán posteriormente en el diseño:

- $R_o$ : Radio característico del cabezal.  
En cabezales hemisféricos es el radio externo ( $D_o/2$ ).  
En cabezales elípticos es  $K_o D_o$ .  
En cabezales torisféricos es el radio exterior de la parte de la corona del cabezal, que normalmente se toma igual a  $D_o$ .
- $K_o$ : Coeficiente geométrico dependiente de las proporciones del cabezal elíptico según la Figura 25.
- $D_o$ : Diámetro exterior de la falda del cabezal, es decir, la unión entre el cabezal y el cuerpo cilíndrico del recipiente.

#### 8.4.3 Cabezal elíptico (2:1)

Según la sección UG-33 de la normativa ASME BPVC, el procedimiento de cálculo para cabezales elípticos debe realizarse siguiendo el procedimiento explicado a continuación. Las dimensiones y parámetros necesarios para determinar un cabezal elíptico se muestran en la Figura 24 y Ecuaciones [76],[77],[78],[79],[80] y [81].

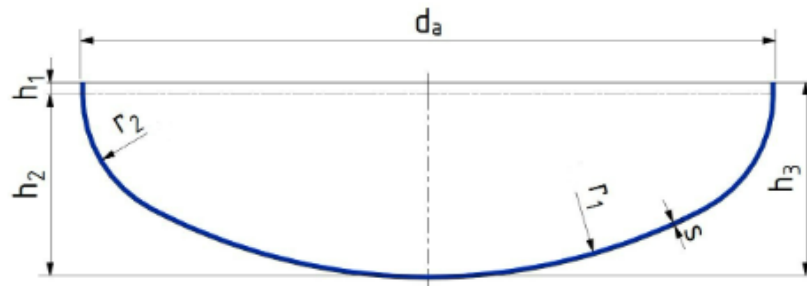


Figura 24. Dimensiones de un cabezal elíptico. (13)

$$d_i = d_a - 2s \quad [76] \quad r_1 = 0,90d_i \quad [77]$$

$$r_2 = 0,17d_i \quad [78] \quad h_1 = a \text{ deseo} \quad [79]$$

$$h_2 = 0,25d_i \quad [80] \quad h_3 = h_1 + h_2 \quad [81]$$

Donde:

- $d_a$ : Diámetro exterior del cabezal
- $d_i$ : Diámetro interior del cabezal
- $r_1$ : Radio de bombeado
- $r_2$ : Radio de reborde
- $h_1$ : Altura del borde cilíndrico
- $h_2$ : Altura de bombeado
- $h_3$ : Altura total del cabezal interior
- $s$ : Espesor de la pared

En primer lugar, se asume un valor de espesor  $t$  y se obtiene, empleando la ecuación [82], el factor  $A$ .

$$A = \frac{0,125}{R_o/t} \quad [82]$$

A continuación, se seguirá el mismo procedimiento que para carcasas esféricas explicado en la sección UG28 del código ASME BPVC.

En primer lugar, se obtiene el valor de  $R_o$  correspondiente a la relación  $K_o D_o$ . Una vez escogida la relación  $D_o/2h_o$ , que relaciona el diámetro externo con la altura y la altura exterior del cabezal elíptico.

En este caso, al ser las dimensiones del cabezal 2:1, se determina la relación  $D_o/2h_o = 2$ . Por tanto, se busca en la Figura 25 el  $K_o$  correspondiente, que se muestra en la Tabla 39, junto al resto de parámetros obtenidos.

**Values of Spherical Radius Factor  $K_o$  for Ellipsoidal Head With Pressure on Convex Side**

$D_o/2h_o$	3.0	2.8	2.6	2.4	2.2	2.0	1.8	1.6	1.4	1.2	1.0
$K_o$	1.36	1.27	1.18	1.08	0.99	0.90	0.81	0.73	0.65	0.57	0.50

GENERAL NOTE: Interpolation permitted for intermediate values.

Figura 25. Tabla para la obtención de factor  $K_o$ . Fuente: (12)

A continuación, a partir del factor  $A$ , se busca la curva que corresponde con la temperatura de diseño de la columna, obteniendo el factor  $B$  de la Figura 26.

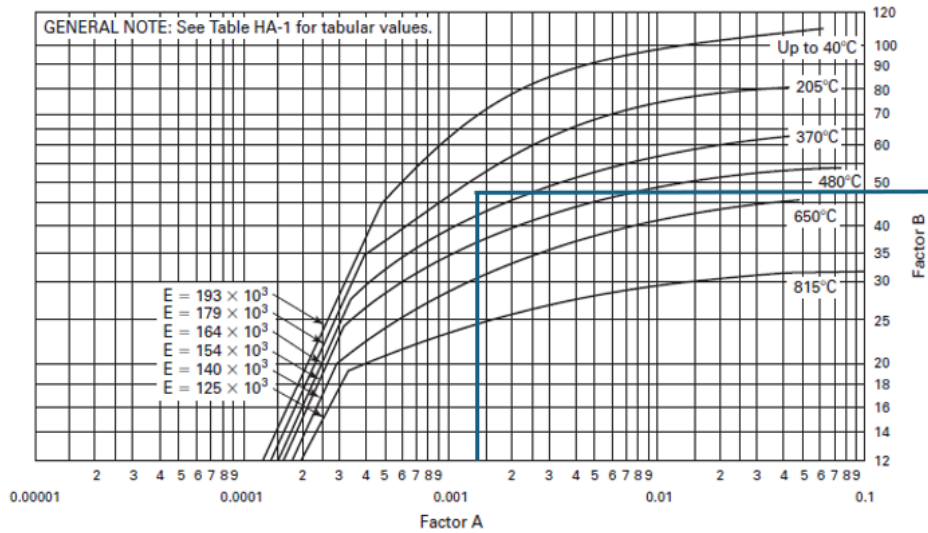


Figura 26. Gráfica correspondiente al material de diseño para espesor de cabezales. Fuente: (12)

Por último, se emplea la ecuación [83] para conocer la presión máxima externa de operación permitida,  $P_a$ , y se comprueba que su valor sea superior a la presión de diseño establecida en el presente diseño.

$$P_a = \frac{B}{\left(\frac{R_o}{t}\right)} \quad [83]$$

A continuación, se muestran en la Tabla 39 los resultados obtenidos durante el procedimiento, y se comprueba que la presión calculada es mayor que la presión de diseño, por lo tanto, se asume como válido el espesor inicial, al que se le suman 2 mm como factor para la corrosión.

Tabla 39. Parámetros obtenidos del cálculo de espesor del cabezal elíptico. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$D_o/2h_o$	2
$K_o$	0,90
$R_o$ (mm)	323,64
A	0,0015
B	48
$P_a$ (MPa)	0,59
$t_{inicial}$	3,96
$t_{final}$	5,96

En la Tabla 40 se muestran resumidos los parámetros característicos del dimensionamiento del cabezal elíptico.

Tabla 40. Resultados del dimensionamiento del cabezal elíptico (2:1). Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$d_a$	359,6
$d_i$	347,68
$r_1$	312,91
$r_2$	59,10
$h_1$	2,98
$h_2$	86,92
$h_3$	88,90

#### 8.4.4 Cabezal torisférico

El procedimiento para el cálculo del espesor del cabezal torisférico será igual que para el elíptico, pero en este caso el valor de  $R_o$  se corresponde con el diámetro externo  $D_o$ , como se muestra en la Figura 27, en la cual  $D_o$  sería  $d_a$ .

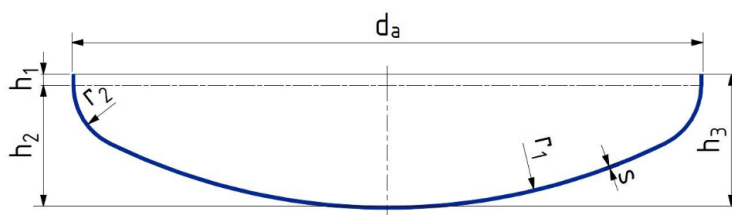


Figura 27. Dimensiones de un cabezal torisférico según normativa DIN 28011. Fuente: (14)

Se sigue el mismo procedimiento que en 8.4.2.1.Cabezal elíptico (2:1) y se muestran los resultados en la Tabla 41.

Tabla 41. Resultados obtenidos del cálculo de espesor del cabezal torisférico. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$R_o$ (mm)	359,6
A	0,0014
B	48
$P_a$ (MPa)	0,53
$t_{inicial}$	3,96
$t_{final}$	5,96

### 8.4.5 Cabezal hemisférico

El procedimiento para el cálculo de espesor de un cabezal hemisférico consiste en el mismo que para carcasas esféricas explicado en la sección UG28 de *ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sección V III, División I*, y demostrado en el apartado 8.4.2.1. Cabezal elíptico (2:1) empleando el radio adecuado, que para cabezales hemisféricos corresponde a la mitad del diámetro exterior.

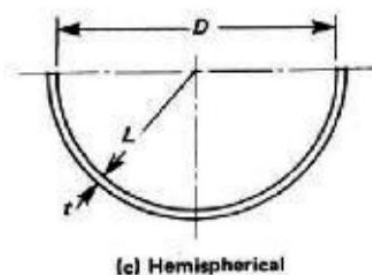


Figura 28. Dimensiones de un cabezal hemisférico. Fuente:(15)

En la Figura 28 se observan los parámetros característicos de un cabezal hemisférico, y los resultados obtenidos en el diseño se presentan en la Tabla 42.

Tabla 42. Resultados del cálculo del espesor del cabezal hemisférico

Parámetro	Valor
$R_o$ (mm)	179,8
A	0,0027
B	57
$P_a$ (MPa)	1,25
$t_{inicial}$	3,96
$t_{final}$	5,96

Se vuelve a comprobar que el espesor estimado proporciona una presión máxima admisible mucho mayor que la de diseño. Por tanto, se verifica que cualquiera de los tres cabezales es válido para la elección.

### 8.4.6 Selección del cabezal

Tras comparar los resultados, se concluye que los tres tipos de cabezales analizados cumplen con los requisitos de diseño frente a presión externa con el espesor propuesto. Sin embargo, para la selección definitiva se pueden considerar otros criterios como la facilidad de fabricación, la altura total ocupada por el cabezal, el coste del cabezal y la compatibilidad con los soportes y bridas. (2)

En este diseño se opta por un cabezal elíptico 2:1, debido a su amplio uso industrial, buen comportamiento estructural y la relación entre resistencia, altura y coste.

### 8.5 Altura de la columna

Una vez seleccionados los cabezales de la columna de destilación, se procede al cálculo riguroso de la altura total. La altura de una columna depende principalmente del número de platos y del espaciado escogido, que se calcula según la ecuación [84].

$$h_{platos} = N_{real}(l_t + t_{plato}) \quad [84]$$

Además, se debe añadir la altura de los cabezales escogidos con la altura correspondiente, que se obtiene con la ecuación [86]. Se emplea por tanto la ecuación [85] para obtener la altura total correspondiente a los dos cabezales.

$$h_{cabezales} = 2h_{elíptico} \quad [85]$$

$$h_{elíptico} = \frac{D_o}{4} \quad [86]$$

Por último, se debe añadir a la altura total un factor que tenga en cuenta la separación del vapor y el nivel del líquido y del retorno de la bajante que, según heurísticas, se determina como 0,48 m para el vapor y 0,71 para el líquido. (16)

$$h_{adicional} = h_{vapor} + h_{líquido} \quad [87]$$

La altura total de la columna teniendo en cuenta todas las contribuciones se obtiene según la ecuación [88], y los datos obtenidos se muestran en la Tabla 43.

$$H_c = \sum h \quad [88]$$

Una vez determinada la altura total, se debe comprobar que el valor de L/D se encuentra entre 20 y 30 para evitar posibles problemas de pandeo. (16)

Tabla 43. Resultados de la altura de la columna. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$h_{platos} (m)$	8,06
$h_{cabezales} (m)$	0,18
$h_{elíptico} (m)$	0,09
$h_{adicional}$	1,20
$H_c (m)$	9,44
L/D	26,25

## 8.6 Anillos rigidizadores

El cálculo del espesor de la carcasa frente a presión externa se ha realizado siguiendo el procedimiento indicado en el *ASME BPVC Sección VIII, División 1, UG-28*, considerando la geometría del recipiente, el material y la temperatura de diseño.

Para el espesor asumido de 3,96 mm, se ha comprobado que la presión máxima externa admisible supera con margen la presión de diseño de vacío. Por tanto, se asume inicialmente que no se va a disponer de anillos rigidizadores, ya que este tipo de elementos se emplean en los siguientes casos: (11)

- Cuando la longitud libre entre extremos es demasiado grande.
- Cuando el recipiente muestra riesgo de pandeo.
- Cuando se desea reducir el espesor debido a que la presión  $P_a$  calculada es menor a la de diseño.

Además, evitar los anillos permite simplificar el montaje interno de la columna, facilitar la limpieza del equipo y reducir costes de construcción. (2, 11)

## 8.7 Diseño del aislante

El aislamiento térmico en equipos como columnas de destilación es fundamental por razones tanto operativas, como de seguridad y de eficiencia energética. La adición de un aislante permite: (17)

- Reducir pérdidas de calor al ambiente, mejorando el rendimiento energético del sistema.
- Mantener las condiciones del proceso estables, evitando fluctuaciones en la temperatura interna debido al entorno.
- Se considera un elemento de protección industrial del personal, evitando quemaduras.

### 8.7.1 Selección del aislante

En columnas que operan a temperaturas medias o elevadas (hasta 600 °F), la bibliografía recomienda el uso de aislantes como la magnesia 85% debido a su buena resistencia térmica y baja conductividad. No obstante, para este diseño se opta por mantener la coherencia con el resto de los equipos, seleccionando el mismo aislante empleado en el reactor de alquilación. (17)

De esta forma, se facilita la logística de compra, instalación y mantenimiento, además de garantizar la compatibilidad térmica y mecánica entre equipos. El aislante escogido será, por tanto, la fibra de vidrio, material recomendado por la bibliografía disponible y adecuado por su baja conductividad térmica y densidad. En la Tabla 44 se muestran las propiedades del modelo de fibra de vidrio escogido, que será Fiberglas Thermal Insulating Wool (TIW) Type I-HP de la empresa Owens Corning. (18)

Tabla 44. Datos sobre el aislante. Fuente: (18)

Parámetro	Valor
Densidad, $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	16,10
Conductividad térmica, $k_{\text{aislante}}$ (W/m·°C)	0,119
Máxima temperatura de servicio, $T_{\text{máx}}$ (°C)	538

Por otra parte, las propiedades características del material escogido para la columna se muestran en el apartado 8.3. Propiedades físicas del material.

### 8.7.2 Propiedades del aire ambiente

Se obtienen los datos necesarios para el cálculo de la convección en el aire en la Tabla 45.

Tabla 45. Propiedades del aire ambiente. Fuente: (19, 20)

Parámetro	Valor
Presión, P (kPa)	101,33
Temperatura, $T_{\infty}$ (°C)	-6,50
Velocidad viento, u (m/s)	33,33
Densidad, $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1,32
Viscosidad, $\mu$ (Pa·s)	$1,75 \cdot 10^{-5}$
Conductividad térmica, k (W/(m·°C))	0,02
Capacidad calorífica, $C_p$ (J/kg·°C)	987,11

Además, es necesario el cálculo del coeficiente de convección del aire,  $h_{\alpha}$ , que se obtiene empleando la ecuación [89].

$$Nu = \frac{h \cdot D}{k_f} \quad [89]$$

La obtención del número de Nusselt se lleva a cabo utilizando la correlación de Churchill-Bernstein, que se muestra en la ecuación [90]. La utilización de dicha correlación viene limitada por la siguiente restricción;  $Pr \cdot Re_D > 0,2$ , que se calcula empleando la ecuación [91] y ecuación [92]. (19)

$$\overline{Nu} = 0,3 + \frac{0,62 \cdot Re_D^{1/2} \cdot Pr^{1/3}}{\left[1 + \left(\frac{0,4}{Pr}\right)^{2/3}\right]^{1/4}} \cdot \left[1 + \left(\frac{Re_D}{282000}\right)^{5/8}\right]^{4/5} \quad [90]$$

$$Re_D = \frac{\rho \cdot u \cdot D}{\mu} \quad [91]$$

$$Pr = \frac{C_p \cdot \mu}{k} \quad [92]$$

Se muestran en la Tabla 46 los resultados obtenidos de las propiedades necesarias para el cálculo de la resistencia aportada por el aire.

Tabla 46. Resultados del cálculo del coeficiente de convección del aire. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$Re_D$	904 046,73
$Pr$	0,86
$Pr \cdot Re_D$	780 844
$\overline{Nu}$	1 225,44
$h_\infty$ (W/m <sup>2</sup> °C)	68,15

### 8.7.3 Geometría de la columna

En la Tabla 47 se muestran resumidos los datos obtenidos durante el diseño de la columna, y necesarios para el cálculo de la resistencia a la conducción en las paredes de la columna.

Tabla 47. Parámetros geométricos de la columna.

Parámetro	Valor
Radio interno, $r_1$ (m)	0,174
Radio externo, $r_2$ (m)	0,180
Espesor, $\Delta x$ (mm)	5,96
Conductividad térmica, $k_{columna}$ (W/m·°C)	19,80
Temperatura interna, $T_i$ (°C)	238,40
Altura, $H_c$ (m)	9,44

### 8.7.4 Calor disipado sin aislante térmico

Con el objetivo de evaluar la necesidad de incorporar aislamiento térmico en la columna de destilación, se procede a estimar el calor disipado por la superficie externa del equipo en condiciones de operación normales, sin aislamiento.

Este cálculo permite cuantificar la pérdida térmica hacia el ambiente y, con ello, justificar técnicamente la instalación de un sistema aislante que minimice dichas pérdidas. Para ello, se propone un circuito de resistencias que tenga en cuenta las resistencias producidas por la conducción en la pared, la conducción en el espesor del aislante y la convección en el aire, y que se muestra en la Figura 29. (19)

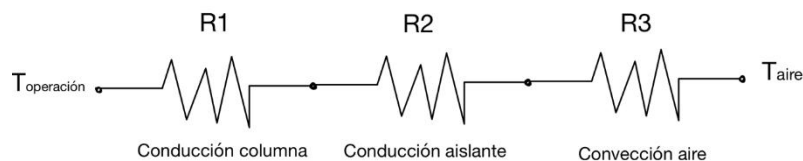


Figura 29. Circuito de resistencias en la columna. Fuente: Elaboración propia a partir de (19).

Para obtener las resistencias correspondientes se emplean las ecuaciones [93],[94]y [95], siendo  $R_1$  la correspondiente a la conducción en la pared de la columna,  $R_2$  la correspondiente a la conducción a través del aislante y  $R_3$  la convección en el aire.

$$R_1 = \frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{k_{columna} 2\pi H_c} \quad [93]$$

$$R_2 = \frac{\ln\left(\frac{r_3}{r_2}\right)}{k_{aislante} 2\pi H_c} \quad [94]$$

$$R_3 = \frac{1}{h_\alpha 2\pi r_3 H_c} \quad [95]$$

Donde:

- $r_1$ : Radio interno de la columna, m
- $r_2$ : Radio externo de la columna, m
- $r_3$ : Radio externo del aislante, m
- $k_{columna}$ : Conductividad térmica del material de la columna, acero inoxidable 304, W/m·K
- $k_{aislante}$ : Conductividad térmica del aislante seleccionado, W/m·K
- $h_\alpha$ : Coeficiente de convección térmica del aire ambiente, W/m<sup>2</sup>·K
- $H_c$ : Altura del reactor, m

Por último, se emplea la ecuación [96] para obtener la resistencia total y, empleando el concepto de resistencia en serie, se obtiene la expresión mostrada en la ecuación [97] para calcular el calor disipado.

$$R_t = R_1 + R_2 + R_3 \quad [96]$$

$$Q = \frac{\Delta T}{\sum R} \quad [97]$$

Donde:

- $Q$ : Flujo de calor, W
- $\Delta T$ : Diferencia de temperatura
- $\sum R$ : Sumatorio de resistencias

Se obtiene, por tanto, el calor disipado al ambiente sin aislante adaptando la ecuación [97] y obteniendo la ecuación derivada ecuación [98], en la que no aparece la resistencia correspondiente al aislante. Se obtiene un resultado de 148,87 kW, con lo que se confirma la necesidad del uso de un aislante.

$$Q(W) = \frac{T_i - T_\alpha}{R_1 + R_3} \quad [98]$$

Donde:

- $T_i$ : Temperatura pared interna del reactor (°C)
- $T_\infty$ : Temperatura del aire ambiente (°C)

### 8.7.5 Cálculo del espesor del aislante

A continuación, se emplea la ecuación [97], que relaciona el circuito de resistencias con el calor disipado en función del radio del espesor. Se emplea para ello la Figura 30, que muestra la variación del calor disipado en función del espesor del aislante, en mm.

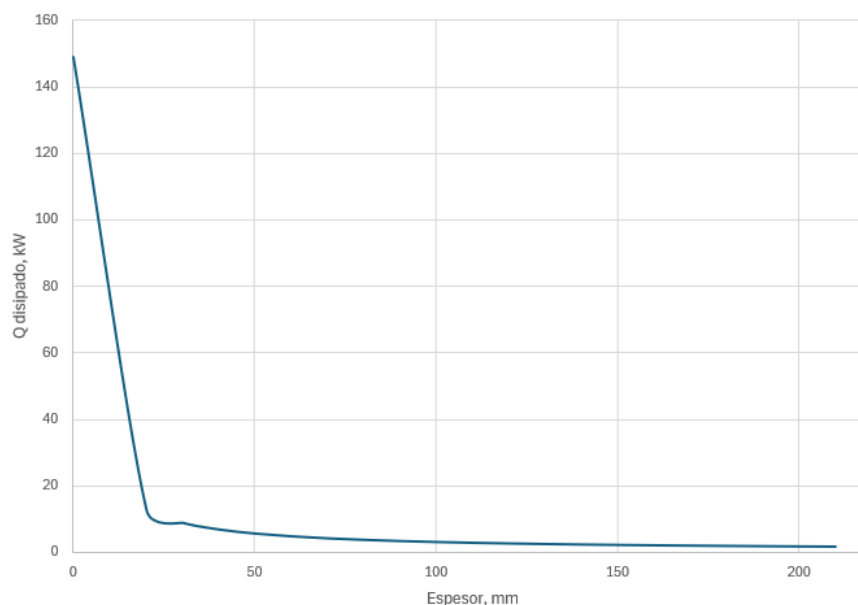


Figura 30. Relación entre el espesor del aislante y el calor disipado. Fuente: Elaboración propia

Se escoge el valor del espesor teniendo en cuenta el porcentaje de reducción de calor disipado y los espesores estándar comercializados, teniendo en cuenta el coste que este supone y las posibles repercusiones respecto a cargas adicionales para el diseño mecánico. Por tanto, se selecciona un espesor de 3" (76,2 mm), que permite reducir las pérdidas de calor en un 97%.

Asimismo, este espesor estandarizado añade un sobredimensionamiento de un 10% ya que según bibliografía en zonas donde la velocidad del viento supere las 7,4 millas/hora (0,447m/s), se debe añadir entre un 10-20% del espesor requerido. (16)

Se muestran en la Tabla 48 los valores obtenidos en el presente apartado.

Tabla 48. Resultados obtenidos del cálculo del espesor. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
Espesor (mm)	76,2
$Q_{con\ aislante}$ (kW)	4,09
Reducción de calor disipado (%)	97

## 9 Análisis de cargas

Como se ha explicado en la *Parte A: Consideraciones generales*, los recipientes a presión deben soportar una serie de cargas. Concretamente, para columnas de destilación, es importante tener en cuenta el peso de los elementos internos que las componen. En este caso se debe también tener en cuenta que es una columna sometida a presión externa, pero, como especifica la bibliografía, las cargas se calculan de la misma forma que para presión interna.(2)

### 9.1 Carga por peso

La carga por peso de la columna de destilación tendrá en cuenta el peso de la carcasa, los accesorios de la carcasa (boquillas y aberturas), el peso de los platos, el peso del aislante y el peso del líquido que llenaría el recipiente.

Por lo tanto, se realiza un cálculo del peso aproximado de la carcasa empleando la *ecuación [12]* de la *Parte A: Consideraciones generales*, y se muestran los resultados en la Tabla 49.

Tabla 49. Resultados del cálculo de la carga por el peso de la columna. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$C_w$	1,15
$\rho_m$ (kg/m <sup>3</sup> )	7900
$D_m$ (m)	0,354
$g$ (m/s <sup>2</sup> )	9,81
$H_v$ (m)	9,26
$t$ (mm)	5,96
$W_v$ (kN)	17,26

Se deben considerar los elementos internos de la columna, por lo que el peso de los platos se calcula empleando la ecuación [99].

$$W_p(N) = 1,2 \cdot \pi \cdot \frac{D_i^2}{4} \cdot N \quad [99]$$

Además, se debe considerar también el peso del aislante, que se calcula empleando la ecuación [100].

$$W_{aislante}(N) = \rho_{aislante} \cdot \pi \cdot H_c \cdot (r_3^2 - r_2^2) \cdot g \quad [100]$$

Por último, se debe tener en cuenta el peso de la columna si estuviese llena de agua, es decir, la carga hidráulica. Este valor se obtiene empleando las ecuaciones [101], [102]y [103].

$$W_{hidráulica}(N) = V_{total} \cdot g \cdot \rho_{agua} \quad [101]$$

$$V_{columna} = \pi \cdot \frac{D_i^2}{4} \cdot L \quad [102]$$

$$V_{cabezales} = 2 \cdot \left(\frac{\pi D_o^3}{24}\right) \quad [103]$$

Se emplea la Ecuación [104] para obtener la carga total, y se muestran los resultados obtenidos en la Tabla 50.

$$W_{total} = W_v + W_{aislante} + W_p + W_{hidráulica} \quad [104]$$

Tabla 50. Resultados obtenidos de la carga por peso total. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$W_p$ (kN)	2,39
$W_{aislante}$ (kN)	0,61
$W_{hidráulica}$ (kN)	8,62
$V_{columna}$ (m3)	0,88
$V_{cabezales}$ (m3)	0,012

## 9.2 Carga por viento

Las columnas de destilación, al ser equipos altos y estrechos, son equipos susceptibles a fallos mecánicos por viento. Por tanto, es de gran importancia tener en cuenta la carga que éste supone. Se observa que se necesitará el uso de un anillo de refuerzo situado en la mitad de la columna, ya que el equipo no aguantaría los esfuerzos provocados por el viento sin el uso de este.

Para el cálculo de la carga provocada por viento se emplea la ecuación [13], ecuación [14] y ecuación [15] mostradas en la Parte A: Consideraciones generales del presente Anexo. Los resultados se muestran en la Tabla 51. El diámetro efectivo se calcula empleando la ecuación [16] de dicho documento, al tratarse de una columna.

Tabla 51. Resultados obtenidos de calcular la carga por viento. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
W (N)	655,36
x (m)	4,63
$M_x$ (kNm)	7,02
$P_w$ (N/m2)	1280
$u_w$ (km/h)	160
$D_{ef}$ (m)	0,51
W (kN)	0,65

## 10 Análisis de esfuerzos

Los recipientes a presión deben diseñarse para resistir la combinación más desfavorable de todas las cargas que actúan sobre ella, por tanto, y siguiendo el procedimiento explicado en *Parte A: Consideraciones generales* se obtiene en este apartado el análisis de los esfuerzos a los que se encuentra sometida la columna T-102.

### 10.1 Esfuerzos primarios

Se obtienen, de igual manera que para presión interna, los esfuerzos primarios a los que está sometida la columna empleando el procedimiento detallado en la *Parte A: Consideraciones generales* del presente anexo.

En primer lugar, se emplea la *ecuación [18]* y *ecuación [19]* para determinar los esfuerzos circunferenciales y longitudinales que, al tratarse de una columna sometida a vacío, resultarán esfuerzos de compresión. A continuación, se obtiene el esfuerzo debido al peso y accesorios internos de la columna empleando la *ecuación [20]*.

Por último, se obtiene el esfuerzo de flexión derivado de las cargas provocadas por el viento y debidas principalmente a la altura de la columna. Este valor se obtiene empleando la *ecuación [21]* y *ecuación [22]*.

Los resultados obtenidos de los esfuerzos primarios se muestran en la Tabla 52.

Tabla 52. Resultados del cálculo de esfuerzos primarios. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor (MPa)
$\sigma_h$	-2,96
$\sigma_L$	-1,48
$\sigma_w$	-2,61
$\sigma_b$	12,19

### 10.2 Esfuerzos principales

Se emplea la *ecuación [23]* de la *Parte A: Consideraciones generales* para obtener el esfuerzo total longitudinal, donde la expresión positiva muestra el esfuerzo con el viento en contra y la negativa con el viento a favor. Se muestran los resultados en la Tabla 53.

Tabla 53. Resultado de los esfuerzos longitudinales a favor y en contra del viento. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$(+\sigma_b) \sigma_z$ (MPa)	8,11
$(-\sigma_b) \sigma_z$ (MPa)	-16,28

A continuación, se emplean la *ecuación [24]*, *ecuación [25]* y *ecuación [26]* de la *Parte A: Consideraciones generales* para obtener los esfuerzos principales, que se muestran en la Tabla 54, con el objetivo de verificar que las tensiones combinadas no superan las tensiones admisibles calculadas anteriormente.

Tabla 54. Resultado de los esfuerzos principales. Fuente: Elaboración propia.

	( $+\sigma_b$ )	( $-\sigma_b$ )
$\sigma_1$ (MPa)	8,11	-2,95
$\sigma_2$ (MPa)	-2,95	-16,28
$\sigma_3$ (MPa)	-0,0507	

Se observa que el esfuerzo  $\sigma_3$  es negativo, ya que es un esfuerzo compresivo dado que la columna se encuentra sometida a presión externa.

### 10.3 Intensidad de esfuerzo permisible

En cualquier recipiente a presión se debe comprobar si el esfuerzo resultante en cualquier punto supera el límite resistente del material. (2)

El cálculo de la intensidad máxima de esfuerzo permisible se realiza con la utilización de las *ecuaciones [27],[28]* y *[29]* de la *Parte A: Consideraciones generales*. Una vez calculadas, se toma la mayor de las diferencias y se comprueba que no exceda la tensión máxima permisible. Se muestran los resultados del diseño en la Tabla 55.

Tabla 55. Resultados de la intensidad máxima de esfuerzo permisible. Fuente: Elaboración propia.

	( $+\sigma_b$ )	( $-\sigma_b$ )
( $\sigma_1-\sigma_2$ ) (MPa)	11,07	13,32
( $\sigma_1-\sigma_3$ ) (MPa)	8,16	-2,90
( $\sigma_2-\sigma_3$ ) (MPa)	-2,91	-16,23
S (MPa)	80,67	

### 10.4 Estabilidad elástica

Al contrario que en los recipientes sometidos a presión interna, en el diseño de la presente columna se debe verificar que no fallará por inestabilidad elástica, ya que al ser un recipiente sometido a presión externa el modo principal de fallo es el pandeo.

El esfuerzo longitudinal debido a las cargas combinadas es compresivo por lo que, aunque se ha empleado el método de cálculo de espesores adecuado, que tiene en cuenta la presión crítica de pandeo, se debe comprobar nuevamente que no va a fallar. (2)

En primer lugar, se emplea la *ecuación [105]* para calcular la tensión crítica de pandeo, que se simplifica en la *ecuación [106]*.

$$\sigma_c = \frac{E}{\sqrt{3(1-\nu^2)}} \left( \frac{t}{R_p} \right) \quad [105]$$

Donde:

- E: Módulo de Young del material, N/mm<sup>2</sup>.
- $\nu$ : coeficiente de Poisson.
- t: Espesor de pared, mm.
- $R_p$  : radio de curvatura exterior, mm.

$$\sigma_c = 1,93 \times 10^4 \left( \frac{t}{D_o} \right) \left( \frac{N}{mm^2} \right) \quad [106]$$

Se comprueba que la tensión crítica obtenida,  $\sigma_c$ , es menor que el esfuerzo total crítico compresivo obtenido mediante la ecuación [107] y que la tensión máxima de diseño del material, por lo que la columna no fallará por estabilidad elástica. Los resultados se observan en la Tabla 56.

$$\sigma_c = \sigma_b + \sigma_w \quad [107]$$

Tabla 56. Resultados obtenidos de los esfuerzos compresivos y estabilidad elástica. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$\sigma_c$ (MPa)	9,59
$\sigma_{crítico}$ (MPa)	319,88
$D_o$ (mm)	359,6
t (mm)	5,96
S (MPa)	80,67

## 11 Soporte del recipiente

Tal y como se ha explicado en la *Parte A: Consideraciones generales* la selección del tipo de soporte para recipientes cilíndricos depende de varios factores, siendo los más importantes el tamaño, forma y peso.

Para la columna de destilación T-102 se ha seleccionado un soporte tipo falda, ya que se trata de un recipiente con orientación vertical y relación L/D de 27, lo que lo convierte en un equipo alto y esbelto. Este tipo de soporte es el recomendado para recipientes verticales con relaciones L/D superiores a 3, como se indica en la bibliografía. (2)

El espesor de la falda se ha dimensionado para resistir tanto el peso muerto del equipo, como los momentos flectores provocados por cargas externas. Para ello, se han aplicado la *ecuación* [30] [31], [32] y [33], obteniendo los esfuerzos resultantes de la falda.

Se debe comprobar que el espesor escogido supere los criterios de diseño, que verifican que la columna soporta las peores combinaciones de cargas posibles, y que se obtienen con las *ecuaciones* [34] y [35] de la *Parte A: Consideraciones generales*. Se concluye que, con un espesor

de 7 mm, se cumplen las restricciones impuestas por dichas ecuaciones. Además, se ha decidido aplicar un margen de sobredimensionamiento, obteniendo así un espesor final de 11 mm. Los resultados se muestran en la Tabla 57.

Tabla 57. Resultados del dimensionamiento de la falda. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$M_s$ (kN·m)	7,65
$D_s$ (m)	0,3596
$t_{sk}$ (m)	0,007
$\sigma_{bs}$ (MPa)	10,55
$W_v$ (kN)	18,01
$\sigma_{ws}$ (MPa)	2,23
$\sigma_s$ (MPa) (Tensión)	8,32
$\sigma_s$ (MPa) (Compresivo)	12,78
$S_s$ (MPa)	80,67
E	0,85
$\Theta_s$ (°)	90,00
$S_s \cdot E \cdot \text{sen}(\Theta_s)$ (kPa)	68,67
$E_Y$ (GPa)	193
$0,125 \cdot E_Y \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) \cdot \text{sen}(\theta_s)$	46,96

## 12 Elementos adicionales

En el diseño mecánico de recipientes a presión, además de la carcasa y los cabezales, se debe tener en cuenta la necesidad del uso de elementos adicionales como aberturas, boquillas y conexiones. Estos elementos deben ser elegidos rigurosamente ya que puede presentar problemas mecánicos, debilitando así la estructura. (2)

Las boquillas son necesarias ya que permiten la conexión de tuberías, instrumentos, válvulas de alivio etc. El código ASME BPVC establece que cualquier abertura debe ser reforzada, ya sea mediante sobre dimensionamiento del espesor en esa zona o mediante el uso de anillos de refuerzo soldados. Estos son los más efectivos, sin embargo, son mucho más costosos y serán utilizados en condiciones de operación severas que los requieran.

Por otra parte, dado que el espesor calculado proporciona una resistencia superior a la presión externa de diseño, se considerará que no es necesario aumentar el espesor ni el uso de refuerzos adicionales en las zonas de boquillas. Esta decisión se justifica por el hecho de que las aberturas previstas son de tamaño reducido

Según lo dispuesto en el ASME BPVC Sección VIII, División 1, UG-36(c), se prescinde del uso de refuerzos adicionales en aberturas cuando el recipiente no está sometido a fluctuaciones rápidas de presión y se cumplen ciertas condiciones geométricas. (11)

En el presente diseño, las boquillas son circulares, soldadas y de diámetro inferior a 89 mm, el espesor del recipiente es menor a 3/8 in, y las distancias entre aberturas cumplen con los criterios de separación mínima establecidos por el código. Por tanto, se justifica normativamente que no se requieren refuerzos adicionales en las boquillas, al estar plenamente cubiertas por las condiciones del apartado UG-36(c)(3).

Por tanto, en la columna de destilación T-102 se requiere del uso de cuatro aberturas. Una boquilla para la alimentación, dos para las salidas de colas y destilado y otra para el vapor que se reintroduce por colas proveniente de la caldera.

Adicionalmente, según la normativa ASME BPVC, que establece en la sección UG-46 de ASME BPVC Sección VIII, División 1, la necesidad de incluir una abertura de acceso adecuada, para facilitar la inspección y limpieza interna del equipo. En recipientes de diámetro interno superior a 12 pulgadas e inferior a 16 pulgadas se requiere el uso de al menos dos bocas de acceso de tamaño mínimo NPS 1 1/2 (DN40), como se puede observar en la Figura 31. (11)

Nominal Size	Minimum Wall Thickness [See UG-16(d)]	
	in.	mm
NPS 1/8 (DN 6)	0.060	1.51
NPS 1/4 (DN 8)	0.077	1.96
NPS 3/8 (DN 10)	0.080	2.02
NPS 1/2 (DN 15)	0.095	2.42
NPS 3/4 (DN 20)	0.099	2.51
NPS 1 (DN 25)	0.116	2.96
NPS 1 1/4 (DN 32)	0.123	3.12
NPS 1 1/2 (DN 40)	0.127	3.22
NPS 2 (DN 50)	0.135	3.42
NPS 2 1/2 (DN 65)	0.178	4.52
NPS 3 (DN 80)	0.189	4.80
NPS 3 1/2 (DN 90)	0.198	5.02
NPS 4 (DN 100)	0.207	5.27
NPS 5 (DN 125)	0.226	5.73
NPS 6 (DN 150)	0.245	6.22
NPS 8 (DN 200)	0.282	7.16
NPS 10 (DN 250)	0.319	8.11
≥ NPS 12 (DN 300)	0.328	8.34

GENERAL NOTE: For nozzles having a specified outside diameter not equal to the outside diameter of an equivalent standard NPS (DN) size, the NPS (DN) size chosen from the table shall be one having an equivalent outside diameter larger than the nozzle outside diameter.

Figura 31. Dimensiones estándar de espesores de boquillas. Fuente:(11)

### 13 Generación de vacío

La generación de vacío se puede llevar a cabo con diferentes equipos y la elección depende del grado de vacío requerido. (1)

Para alcanzar la presión de operación de 0,1 bar en la columna, se ha seleccionado un sistema de vacío basado en bombas de vacío mecánicas, siendo adecuadas para sistemas de vacío moderados. Se sitúa por tanto una bomba en la corriente de cabezas de la columna T-102.

## 14 Hoja de especificaciones

Planta de producción de detergente tipo LABS	HOJA DE ESPECIFICACIONES DE LA COLUMNA T-102		
	TAG EQUIPO	T-102	
	SECCIÓN	100	
DATOS GENERALES			
DENOMINACIÓN EQUIPO	Columna de destilación con platos perforados		
FUNCIÓN	Obtención de dodecibenceno puro en la corriente de colas		
DATOS DE OPERACIÓN			
	ENTRADA	SALIDA CABEZAS	SALIDA COLAS
FLUIDO	Mezcla de dodeceno con dodecibenceno	Dodeceno	Dodecibenceno
CAUDAL [kg/h]	1837,03	144,42	1692,61
FASE LÍQUIDO	0	1	0
TEMPERATURA [°C]	216,04	230,91	238,40
PRESIÓN [bar]	0,1	0,1	0,11
DENSIDAD [kg/m <sup>3</sup> ]	703,28	1,11	690,32
DIÁMETRO INTERIOR (mm)	347,68		
ESPACIADO DE PLATOS (mm)	400		
NÚMERO TOTAL DE PLATOS	21		
DATOS DE DISEÑO MECÁNICO			
MATERIAL DE LA CARCASA	AISI-304	ESPESOR CARCASA (mm)	5,96
PRESIÓN DE DISEÑO [ $\Delta P$ (bar)]	1,013	VOLUMEN INTERIOR (m <sup>3</sup> )	0,88
TEMPERATURA DE DISEÑO [°C]	266,77	PESO COLUMNA VACÍA (kN)	5,63
GEOMETRÍA DEL CUERPO	Cilíndrico	PESO DEL LÍQUIDO (kN)	8,74
GEOMETRÍA DE CABEZALES	Elíptico	PESO COLUMNA EN OPERACIÓN	17,26
ALTURA DEL CUERPO (m)	8,24		
ALTURA DEL CABEZAL (m)	0,09		
ALTURA TOTAL	9,44		
MARGEN DE CORROSIÓN (mm)	2	DIÁMETRO DE LOS ORIFICIOS (mm)	6
ESPESOR DE PLATOS (mm)	3	PITCH DE LOS ORIFICIOS (mm)	18
TIPO DE PLATOS	Perforados	ÁREA PERFORADA/ÁREA ACTIVA	0,50
MATERIAL DE LOS PLATOS	AISI-304	LONGITUD REBOSADERO (mm)	267,71
NÚMERO DE PASOS POR PLATO	1	ALTURA REBOSADERO (mm)	11
NÚMERO DE ORIFICIOS	1230		
AISLANTE			

<b>MATERIAL</b>	Fiberglass Thermal Insulating Wool (TIW) Type I-HP
<b>DISTRIBUIDOR</b>	Owens Corning
<b>ESPESOR (mm)</b>	76,2

## 15 Bibliografía

1. SINNOTT, R. K. *Coulson & Richardson's Chemical Engineering*. 4.<sup>a</sup> ed. 2005.
2. TOWLER, Gavin y SINNOTT, Ray. *Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*. 3.<sup>a</sup> ed. 2022.
3. PETERS, Max S., TIMMERHAUS, Klaus D. y WEST, Ronald E. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. 5.<sup>a</sup> ed. 2003.
4. YADAV, G. D. y DOSHI, N. S. *Synthesis of linear phenyldodecanes by the alkylation of benzene with 1-dodecene over non-zeolitic catalysts*. *Organic Process Research and Development*. En línea. 2002, vol. 6, no. 3, pp. 263–272. DOI 10.1021/OP000044S/ASSET/IMAGES/LARGE/OP000044SF00014.JPEG. [Consulta: 20-05-2025]
5. WANKAT, Phillip C. *Separation Process Engineering: Includes Mass Transfer Analysis*. 3.<sup>a</sup> ed. 2012.
6. POLING, Bruce E., PRAUSNITZ, John M. y O'CONNELL, John P. *The Properties of Gases and Liquids*. 5.<sup>a</sup> ed. [s. f.].
7. KASEHGARI, H., MOKBEL, I., VITON, C. y JOSE, J. *Vapor pressure of 11 alkylbenzenes in the range 10–3 – 280 torr, correlation by equation of state*. *Fluid Phase Equilibria*. En línea. 15 julio 1993, vol. 87, no. 1, pp. 133–152. DOI 10.1016/0378-3812(93)85022-E. [Consulta: 20-05-2025]
8. SCRIBD. *BS 1600 | PDF | Pipe (Fluid Conveyance) | Building Materials*. En línea. Disponible en: <https://es.scribd.com/document/226132435/BS-1600>. [Consulta: 14-06-2025]
9. PERRY, Robert H., GREEN, Don W. y MALONEY, James O. *Perry. Manual del Ingeniero Químico*. 6.<sup>a</sup> ed. 2001.
10. GRUMEBER. *AISI 304: Propiedades del Acero Inoxidable*. En línea. Disponible en: <https://grumeber.com/acero-inoxidable-aisi-304/>. [Consulta: 24-05-2025]
11. ASME. *Section VIII. ASME Boiler and Pressure Vessels Code. Division I*. The American Society of Mechanical Engineers, 2023.
12. ASME. *Section II. ASME Boiler and Pressure Vessel Code: An International Code. Part D*. The American Society of Mechanical Engineers, 2019.
13. SLAWINSKI. *Fondo elíptico*. En línea. Disponible en: <https://www.slawinski.es/productos/fondo-eliptico/>. [Consulta: 14-06-2025]
14. SLAWINSKI. *Fondo toro esférico conforme a DIN 28011*. En línea. Disponible en: <https://www.slawinski.es/productos/fondo-toro-esferico/>. [Consulta: 14-06-2025]
15. INSPECTION FOR INDUSTRY. *Pressure Vessel Heads*. En línea. Disponible en: <https://www.inspection-for-industry.com/pressure-vessel-heads.html>. [Consulta: 14-06-2025]
16. TURTON, Richard, SHAEIWITZ, Joseph A., BHATTACHARYYA, Debansu y WHITING, Wallace B. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 5.<sup>a</sup> ed. 2018.
17. WALAS, Stanley M. *Chemical Process Equipment: Selection and Design*. 1990.

18. OWENS CORNING. *FIBERGLAS™ Thermal Insulating Wool | Owens Corning Insulation*. En línea. Disponible en: <https://www.owenscorning.com/en-us/insulation/products/fiberglas-tiw-hp-types-i-and-ii-insulation>. [Consulta: 26-05-2025]
19. INCROPERA, Frank P., DEWITT, David P., BERGMAN, Theodore L. y LAVINE, Adrienne S. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 6.<sup>a</sup> ed. 2007.

PARTE D:  
REACTOR  
R-201

## Índice

1	Introducción.....	3
2	Agente sulfonante.....	3
2.1	Trióxido de azufre en fase gas .....	5
2.2	Ácido sulfúrico concentrado .....	5
2.3	Óleum .....	5
2.4	Selección.....	5
3	Estudio de la reacción química.....	6
4	Condiciones de operación.....	6
5	Estudio de la cinética de la reacción.....	7
6	Selección del tipo de reactor.....	8
7	Balance de materia .....	8
8	Balance de energía.....	9
8.1	Cálculo entalpía de reacción .....	10
8.2	Modo de operación .....	11
9	Diseño del reactor R-201 .....	12
9.1	Volumen de reacción.....	13
9.1.1	Conversión de diseño .....	13
9.2	Propiedades de la mezcla.....	14
9.2.1	Viscosidad .....	14
9.2.2	Densidad.....	17
9.2.3	Régimen de flujo .....	17
9.3	Sistema de agitación .....	19
9.3.1	Selección del agitador.....	19
9.3.2	Deflectores.....	21
9.3.3	Bombeo y número de bombeo.....	21
9.3.4	Potencia y número de potencia.....	22
9.3.5	Dimensionamiento del sistema de agitación .....	23
10	Sistema de refrigeración .....	24
10.1	Refrigerante .....	26

10.2	Dimensionamiento de la camisa .....	27
10.3	Cálculo del coeficiente global de transmisión de calor.....	29
10.3.1	Convección en el interior del reactor .....	30
10.3.2	Conducción a través de la pared del reactor.....	31
10.3.3	Convección en el interior de la camisa.....	31
10.3.4	Comprobación.....	32
10.4	Caída de presión en la camisa de refrigeración .....	33
11	Diseño mecánico .....	34
11.1	Selección del material.....	34
11.2	Presión de diseño .....	34
11.3	Temperatura de diseño .....	35
11.4	Espesor mínimo requerido .....	36
11.4.1	Reactor R-201 .....	36
11.4.2	Camisa de refrigeración .....	38
11.5	Cabezales .....	38
11.6	Cálculo de cargas .....	41
11.6.1	Cargas por peso .....	41
11.6.2	Carga por viento.....	43
11.7	Análisis de esfuerzos .....	43
11.7.1	Esfuerzos primarios.....	44
11.7.2	Esfuerzos principales .....	44
11.7.3	Intensidad del esfuerzo permisible.....	45
11.7.4	Esfuerzo de compresión y estabilidad estática.....	45
11.8	Soportes .....	45
11.9	Aberturas y conexiones.....	46
11.10	Diseño de válvula de alivio .....	47
12	Hoja de especificaciones .....	49
13	Bibliografía.....	50

## 1 Introducción

El reactor es una de las unidades fundamentales de un proceso químico, y la reacción de sulfonación comprende uno de los puntos clave para la obtención del producto deseado. En este anexo del proyecto se presenta la información y diseño del reactor R-201, en el que tiene lugar la reacción entre la mezcla de isómeros de dodecibenceno y el óleum 22% como agente sulfonante.

Para facilitar el entendimiento se resumen en la Tabla 1 las abreviaturas utilizadas para los compuestos implicados.

*Tabla 1. Nomenclatura de los compuestos. Fuente: Elaboración propia.*

Compuesto	Abreviatura
Dodeceno	D
Dodecibenceno (LAB)	DB
Trióxido de azufre	SO <sub>3</sub>
Ácido sulfúrico	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
Óleum al 22%	Óleum
Ácido dodecibencensulfónico	LABSA

## 2 Agente sulfonante

La sulfonación del dodecibenceno para la producción de ácido dodecibencensulfónico requiere de la selección del agente sulfonante. Un agente sulfonante consiste en una sustancia química que reacciona para introducir el grupo sulfonilo (-SO<sub>3</sub>H) en una molécula orgánica. Este grupo es el que aporta a los productos propiedades ácidas y alta polaridad, fundamentales en la fabricación de los tensioactivos aniónicos como el LABSA. (1)

El trióxido de azufre puro (SO<sub>3</sub>) permite obtener altas conversiones. Sin embargo, su elevada reactividad y toxicidad suponen un riesgo operativo importante. El SO<sub>3</sub> es un reactivo electrófilo altamente reactivo ante compuestos orgánicos que contienen grupos donadores de electrones. A nivel industrial, la dosificación y el manejo de equipos específicos es particularmente compleja por su carácter altamente exotérmico y su elevada velocidad de reacción. Esto implica que el control térmico tenga que ser exhaustivo, ya que pueden provocarse sobrecalentamientos localizados. El enfriamiento también debe de ser efectivo por el efecto en la tendencia de producción de reacciones secundarias. La formación de subproductos también se promueve si el control de la relación molar no es preciso. Además, en presencia de SO<sub>3</sub> puro, los compuestos orgánicos tienden a carbonizarse o formar depósitos de carbón, aumentando la viscosidad del medio entre 15 y 300 veces, dificultando la eliminación eficaz del calor. Trabajar con trióxido de azufre puro es una opción común en plantas a gran escala, pero presenta mayores exigencias de seguridad, automatización y control. (1)

En la búsqueda de soluciones al problema de reactividad del SO<sub>3</sub> se opta por la dilución. Comercialmente, como se puede observar en la Figura 1, los agentes de dilución incluyen el amoníaco, el ácido clorhídrico, el agua o el ácido sulfúrico y el aire seco.

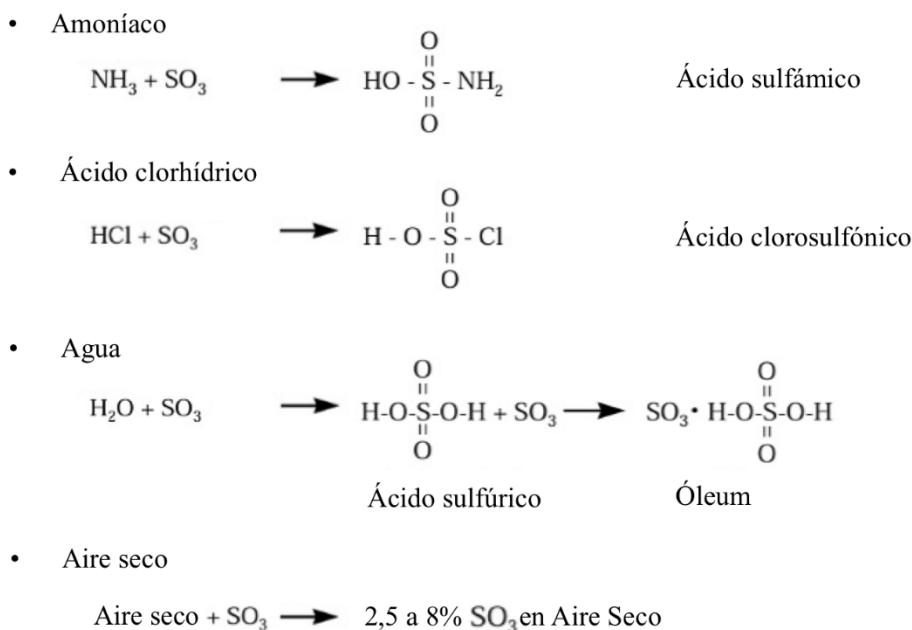


Figura 1. Agentes de dilución para el trióxido de azufre. Fuente:(1)

La primera opción de disolución es con amoníaco (NH<sub>3</sub>). Al reaccionar con SO<sub>3</sub> se forma ácido sulfámico, un sólido blanco y estable. Este compuesto no se emplea como agente sulfonante en la fabricación de detergentes, pero sí encuentra diversas aplicaciones industriales, como en productos de limpieza o en tratamiento de superficies metálicas. (1)

La segunda posibilidad es la disolución con ácido clorhídrico (HCl), donde la reacción con SO<sub>3</sub> da lugar al ácido clorosulfónico. Este compuesto tampoco se emplea en la producción de tensioactivos como el LABSA, se suelen emplear en la industria de colorantes, productos farmacéuticos y agroquímicos. (1)

La tercera opción de disolución consiste en la combinación de SO<sub>3</sub> con agua para producir ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), de forma altamente exotérmica. Si el sistema continúa recibiendo SO<sub>3</sub> en exceso, el ácido resultante se convierte en óleum, una solución de SO<sub>3</sub> en H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> que puede contener entre el 10 % y el 65 % de SO<sub>3</sub> libre. Esta es una opción comúnmente empleada en la producción de ácido dodecibencensulfónico. (2)

Por último, la cuarta alternativa es la disolución en aire seco. El trióxido de azufre puede diluirse en aire seco para formar una mezcla gaseosa que se emplea comúnmente como medio de transporte y dosificación controlada en procesos de sulfonación. Esta mezcla, conocida como aire/SO<sub>3</sub>, se utiliza especialmente en sistemas continuos como los reactores de película descendente, donde se requiere un suministro uniforme y bien distribuido del agente sulfonante. Esta opción también se emplea en gran medida para la producción de detergentes tipo LAS. (2)

Por lo tanto, los agentes sulfonantes más utilizados industrialmente son el trióxido de azufre en fase gaseosa, el ácido sulfúrico concentrado y el óleum. Para la selección se comparan aspectos como la seguridad operativa, la generación de subproductos y la viabilidad, a nivel técnico y económico. A continuación, se presentan y discuten las principales alternativas con sus ventajas e inconvenientes para la posterior selección.

## 2.1 Trióxido de azufre en fase gas

La sulfonación con trióxido de azufre en fase gaseosa es una técnica industrial ampliamente utilizada para la producción del ácido dodecilbencensulfónico. En este proceso, el  $\text{SO}_3$  se diluye en aire seco (2,5–8 % en volumen) y se hace reaccionar en un reactor especializado, un sulfonador de película descendente. La reacción es una sulfonación electrofílica altamente exotérmica, y la forma gaseosa del  $\text{SO}_3$  permite una distribución uniforme y controlada del reactivo, lo cual es crucial para evitar un exceso de sulfonación, formación de subproductos y problemas de transferencia de calor. Este tipo de proceso ofrece una elevada selectividad y calidad del producto, y una buena eficiencia térmica gracias a la delgada película de fluido. Sin embargo, requiere un control muy estricto del cociente molar, así como equipos altamente especializados, lo que puede encarecer la inversión inicial. (1)

## 2.2 Ácido sulfúrico concentrado

El uso directo de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  como agente sulfonante presenta ventajas operativas relacionadas con su disponibilidad, bajo coste y facilidad de manipulación. No obstante, su poder sulfonante es considerablemente inferior al resto de alternativas, por lo que la reacción es más lenta, se obtiene menor conversión y la formación de subproductos es significativa. Además, requiere temperaturas elevadas para compensar su menor reactividad, lo que puede comprometer la estabilidad del producto deseado. (1)

## 2.3 Óleum

El óleum presenta una solución intermedia entre las dos opciones anteriores. Al contener  $\text{SO}_3$  diluido en ácido sulfúrico, un medio ácido, se facilita la miscibilidad con el DB. Como principales efectos la sulfonación tiene mayor control y la velocidad de reacción se encuentra en rango aceptable. Es uno de los agentes sulfonantes más utilizados a nivel industrial, ya que permite trabajar con el  $\text{SO}_3$  en forma líquida, lo que lo hace más controlable y seguro que el gas puro. Además, su viscosidad es moderada y permite una dosificación continua y estable en reactores como los RCTA. Gracias a esta combinación de estabilidad, manejabilidad y alta capacidad sulfonante, el óleum es la buena opción en la producción a gran escala de LABSA. (1, 3)

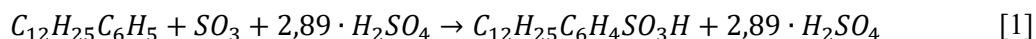
## 2.4 Selección

Para la reacción de sulfonación del dodecilbenceno (DB) en la producción de ácido dodecilbencensulfónico (LABSA), se ha seleccionado el óleum como agente sulfonante. Aunque el  $\text{SO}_3$  puro es extremadamente reactivo y peligroso de manipular, el óleum permite trabajar con  $\text{SO}_3$  de forma líquida y estable, reduciendo el riesgo de reacciones incontroladas y carbonización. A diferencia del  $\text{SO}_3$  en fase gaseosa, el óleum puede bombearse y dosificarse con precisión utilizando equipos convencionales, lo que simplifica el control del proceso. Además, es un reactivo ampliamente disponible y empleado industrialmente, lo que facilita su integración en plantas químicas. Por tanto, se selecciona el óleum como agente sulfonante por su equilibrio entre reactividad, manejabilidad, coste y compatibilidad con el diseño del reactor propuesto.

El porcentaje de  $\text{SO}_3$  varía entre 10 % y el 65 %, pero a niveles industriales para este tipo de reacciones se suele emplear un porcentaje cercano al 20%. La reacción de sulfonación de la mezcla de isómeros de dodecilbenceno se produce con óleum al 22%, un porcentaje que se menciona bibliográficamente y que se encuentra disponible a nivel comercialización. (3)

### 3 Estudio de la reacción química

La reacción entre el dodecilbenceno y el óleum 22% se trata de una reacción exotérmica en la que es necesario un control efectivo de concentraciones y temperatura. Estudios recientes concluyen que el monómero  $SO_3$  es el verdadero ingrediente activo en el óleum, mientras que ácido sulfúrico actúa solo como disolvente. De esta forma como el ácido actúa como medio de disolución para el trióxido de azufre, pero no reacciona directamente con el LAB, se dice que desde el punto de vista de la reacción química principal en el reactor actúa como inerte. La química básica sostiene que el trióxido de azufre reacciona con el dodecilbenceno para formar un enlace azufre-carbono como se observa en [1]. (3)



Una de las características de este proceso es que el ácido sulfónico de dodecilbenceno resultante es una molécula estable. Durante el proceso pueden producirse reacciones secundarias que afectan negativamente la calidad del producto final. Una de las más relevantes es la formación de anhídridos sulfonados, que ocurre en presencia de un exceso elevado de  $SO_3$  o tiempos de residencia inadecuados. Estos anhídridos pueden transformarse en LABSA mediante la adición controlada de agua. Otra reacción secundaria importante es la formación de sulfonas, compuestos más estables que ya no pueden transformarse en LABSA. Estas se originan típicamente a temperaturas elevadas y representan una fracción significativa del llamado *free oil* o aceites libres en el producto final. También pueden producirse compuestos coloreados y subproductos oxidados, que afectan la apariencia y calidad del producto, especialmente si hay exceso de  $SO_3$  o si el proceso opera a temperaturas elevadas. (4)

Para minimizar la formación de subproductos no deseados y asegurar una sulfonación eficiente, se recomienda trabajar con una relación molar  $SO_3/LAB$  entre 1.01 y 1.03, y mantener la temperatura del sistema entre 30 y 50 °C. (2)

### 4 Condiciones de operación

Como se menciona, para minimizar la formación de subproductos no deseados, que no se lleven a cabo reacciones secundarias, la concentración de los reactivos y la temperatura de operación son parámetros críticos. En esta sección se decide la temperatura, la presión y la relación molar de alimentación de los reactivos que optimicen la reacción teniendo en cuenta la seguridad en todo momento.

La presión de operación es de 1 atm. Al trabajar a presión atmosférica simplifica el diseño del reactor, reduce los costes de fabricación y mantenimiento. (3)

Como se explica anteriormente, el control térmico del sistema es uno de los puntos clave del diseño por lo que la selección de la temperatura de operación debe de ser segura y adecuada. Según la cinética de la reacción un aumento de temperatura acelera significativamente la velocidad. Sin embargo, temperaturas elevadas favorecen la formación de subproductos indeseados como sulfonas y compuestos coloreados, especialmente en presencia de un exceso de  $SO_3$ . Por lo tanto, se debe de buscar un equilibrio entre una temperatura que favorezca la obtención de una velocidad adecuada y que a la vez evite la formación de subproductos para garantizar una calidad de ácido dodecilbencensulfónico. Se selecciona entonces una temperatura de 40 °C como valor intermedio que permite mantener una velocidad adecuada sin comprometer la selectividad del proceso, y que es manejable desde el punto de vista de diseño térmico y de refrigeración.

La relación molar entre la mezcla de isómeros de LAB y el SO<sub>3</sub> es uno de los parámetros más críticos en el diseño del proceso. Un valor inferior a 1 puede implicar que la conversión no sea completa, mientras que un exceso elevado de SO<sub>3</sub> incrementa el riesgo de formación de anhídridos y degradación térmica del producto. La recomendación bibliográfica recomienda mantener esta relación en un rango de entre 1,01 y 1,03. Por ello, se ha optado por una relación de 1,01, que proporciona un ligero exceso de SO<sub>3</sub> suficiente para asegurar una conversión completa, sin comprometer la calidad del LABSA obtenido. (2)

## 5 Estudio de la cinética de la reacción

La cinética de la reacción sigue la forma de la ecuación [2]. Este modelo indica que la reacción es de orden 1,59 respecto al trióxido de azufre presente en el óleum y de orden 0,74 respecto al dodecibenceno. La constante cinética obtenida se expresa mediante la ecuación de Arrhenius [3], los valores se muestran en la Tabla 2. (3)

$$-r_{DB} = k \cdot C_{SO_3}^{1,59} \cdot C_{DB}^{0,74} \quad [2]$$

Donde:

- $r_{DB}$ : Velocidad de reacción de la mezcla de isómeros de dodecibenceno (mol/L·h)
- $k$ : Constante de la velocidad de reacción de la mezcla de isómeros de dodecibenceno (L<sup>1,33</sup>/mol<sup>1,33</sup>·h)
- $C_{SO_3}$ : Concentración del trióxido de azufre (mol/L)
- $C_{DB}$ : Concentración de la mezcla de isómeros de dodecibenceno (mol/L)

$$k = k_0 \cdot e^{\left(\frac{-E_a}{R \cdot T}\right)} \quad [3]$$

Donde:

- $k_0$ : Constante de la velocidad de reacción (L<sup>1,33</sup>/mol<sup>1,33</sup>·h)
- $E_a$ : Energía de activación de reacción (J/mol)
- $R$ : Constante de los gases ideales (J/mol·K)
- $T$ : Temperatura (K)

Tabla 2. Parámetros cinéticos de la reacción de sulfonación de dodecibenceno con óleum

Parámetro	Valor	Unidades
ko	2.217,2	L <sup>1,33</sup> /mol <sup>1,33</sup> ·h
Ea	5.207	J/mol
R	8,314	J/mol·K
T	40	°C
k	300,1	L <sup>1,33</sup> /mol <sup>1,33</sup> ·h

## 6 Selección del tipo de reactor

La selección del tipo de reactor para la sulfonación de LAB con óleum 22% se basa en la naturaleza de la reacción y en cumplir con las condiciones operativas. La reacción es exotérmica, rápida y sensible a la temperatura, exige un sistema que permita controlar la generación de calor y evitar la aparición de subproductos indeseados. Los reactores tubulares no permiten un control térmico suficientemente preciso a lo largo de todo el perfil del reactor. Para reacciones en fase líquida los reactores de tanque agitado son los empleados con mayor frecuencia. (5)

La configuración que mejor se adapta a las exigencias del proceso es la de un reactor de tanque agitado continuo. Este tipo de reactor proporciona un entorno bien mezclado que garantiza una distribución homogénea de reactivos y temperatura en todo el volumen de reacción. La posibilidad de operar en estado estacionario y de ajustar fácilmente los parámetros de entrada y salida lo convierte en una opción robusta y versátil para la producción de LABSA bajo condiciones controladas. (2)

Por tanto, y en línea con la bibliografía técnica consultada y las condiciones propuestas en el estudio cinético de referencia, se ha decidido implementar un reactor continuo de tanque agitado (RCTA), alimentado de forma continua con las corrientes de dodecibenceno y óleum. (1, 2)

## 7 Balance de materia

La reacción de sulfonación tiene lugar en fase líquida, el óleum se dosifica de forma controlada para garantizar una relación molar  $\text{SO}_3/\text{DB}$  ligeramente superior a la estequiométrica. Como se menciona, un exceso del 1% en moles de  $\text{SO}_3$ . Se considera que no existen reacciones paralelas significativas a las condiciones de operación seleccionadas. La conversión presenta un valor para el diseño del reactor de 95%, valor compatible con lo reportado en bibliografía industrial para procesos continuos de sulfonación con óleum. (2)

Esta conversión permite maximizar el rendimiento sin comprometer la calidad del LABSA producido, como se justifica más adelante en *8.1.1 Conversión de diseño*. Estas principales consideraciones se pueden observar en la Tabla 3.

Tabla 3. Parámetros clave para la reacción de sulfonación. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
Conversión $X_{\text{DB}}$	95%
Selectividad, S	100%
Relación molar $\text{SO}_3/\text{DB}$	1,01:1

Para la realización del balance de materia se parte del caudal de entrada de dodecibenceno, que se conoce de la etapa anterior. A partir de este valor, se determinan las corrientes de entrada de trióxido de azufre y de ácido sulfúrico, lo que permite establecer el caudal de óleum 22%.

El trióxido de azufre se introduce en un exceso del 1% molar respecto al dodecibenceno. El ácido sulfúrico se incorpora como parte del óleum 22%. Conociendo el caudal másico del trióxido de azufre, se calcula el de ácido sulfúrico a partir de la proporción másica y finalmente, la del óleum como la suma de ambos caudales másicos.

Conocidos los caudales de entrada al reactor y aplicando la conversión, selectividad y relación molar se obtienen los resultados del balance de materia que se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4. Balances de materia al reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Componente	Entrada (Corriente 19 y 20)		Salida (Corriente 23)	
	Flujo másico	Flujo molar	Flujo másico	Flujo molar
	(kg/h)	(kmol/h)	(kg/h)	(kmol/h)
Dodeceno	0,311	0,002	0,311	0,002
Dodecilbenceno	1.692,301	6,867	84,615	0,343
Trióxido de azufre	555,322	6,936	32,989	0,412
Ácido sulfúrico	1.968,869	20,074	1.968,869	20,074
LABSA	0,000	0,000	2.130,019	6,524

El caudal de óleum es por lo tanto de 2524,191 kg/h o 27,010 kmol/h, como se refleja en el *Anexo I. Balances de materia y energía*. La cantidad de doceno representa un 0,0007% másico, por lo que se considera que su efecto sobre la reacción es despreciable.

## 8 Balance de energía

Para el diseño del reactor es de importancia conocer el calor de reacción, sobre todo teniendo en cuenta la necesidad de un buen control de temperatura para que las condiciones de operación sean las óptimas. Se parte de la expresión general del balance de energía para un sistema abierto, que se muestra en la ecuación [4]. El primer término de la igualdad es la acumulación, el cambio de energía interna respecto al tiempo. El segundo término hace referencia a la transferencia de calor que entra o sale del sistema en forma de calor. El tercero es el trabajo, la energía transferida por el sistema. Por último, el cuarto término engloba la variación de energía por flujo másico evaluado entre en la entrada y la salida. (6)

$$\frac{d\hat{E}_{sistema}}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} + \sum_{i=1}^n E_i \cdot F_i|_{entrada} - \sum_{i=1}^n E_i \cdot F_i|_{salida} \quad [4]$$

Donde:

- $\frac{d\hat{E}_{sistema}}{dt}$ : Velocidad de acumulación de energía en el interior del sistema (J/s)
- $\dot{Q}$ : Flujo de calor hacia el sistema procedente de los alrededores (J/s)
- $\dot{W}$ : Flujo de trabajo realizado por el sistema sobre los alrededores (J/s)
- $F_i$ : Flujo molar de i (mol de i/s)
- $E_i$ : Energía de i (J/mol de i)

El primer término de acumulación es cero para un sistema en estado estacionario como el que se diseña. El trabajo se divide en el trabajo que realiza el flujo y el que realiza el sistema externo, como se menciona anteriormente. El trabajo que realiza el flujo se puede expresar en términos de

entalpía, despreciando la energía potencial y cinética. Por lo tanto, la ecuación del balance se simplifica obteniendo la expresión [5].

$$\dot{Q} = \sum_{i=1}^n F_i \cdot H_i - \sum_{i=1}^n F_{i0} \cdot H_{i0} = F_{DB0} \cdot X \cdot \left[ \sum_{i=1}^n \theta_i \cdot (H_{i0} - H_i) - \Delta H_{RX}(T) \right] \quad [5]$$

Donde:

- $F_{DB0}$ : Flujo molar de dodecilbenceno (mol de dodecilbenceno/s)
- $X$ : Conversión de la reacción
- $\theta_i$ : Relación molar de  $i$  respecto al dodecilbenceno
- $H_{i0}$ : Entalpía molar de  $i$  a la entrada (J/mol)
- $H_i$ : Entalpía molar de  $i$  a la salida (J/mol)
- $\Delta H_{RX}(T)$ : Entalpía de reacción a la temperatura de operación (J/mol)

### 8.1 Cálculo entalpía de reacción

Para la obtención del valor de la entalpía de reacción a la temperatura de operación es necesario partir de la entalpía de formación estándar de reacción que se refiere a las condiciones de 25°C y 1 atm. A esta entalpía se le añade una corrección por cambio de temperatura para cada uno de los compuestos involucrados en la reacción. La expresión resultante se muestra en la ecuación [6].

$$\Delta H_R = \Delta H_R^\circ + v_{LABSA} \int_{T_R}^T C_{p_{LABSA}} dT - v_{DB} \int_{T_R}^T C_{p_{DB}} dT - v_{SO3} \int_{T_R}^T C_{p_{SO3}} dT \quad [6]$$

Donde:

- $\Delta H_R^\circ$ : Entalpía estándar de reacción (J/mol)
- $v_i$ : Coeficiente estequiométrico de los compuestos  $i$
- $C_{p_i}$ : Capacidad calorífica molar de la especie  $i$  (J/mol°C)
- $T_R$ : Temperatura de referencia 25°C
- $T$ : Temperatura de operación del reactor (°C)

La entalpía de formación estándar se calcula a partir de las entalpías de reactivos y productos como se muestra en la ecuación [7].

$$\Delta H_R^\circ = \sum_{i=1}^n v_i \cdot H_{f i \text{ producto}}^\circ - \sum_{i=1}^n v_i \cdot H_{f i \text{ reactivo}}^\circ \quad [7]$$

En la Tabla 5 se muestran los coeficientes estequiométricos de los compuestos involucrados en la reacción y sus entalpías de formación obtenidas a partir de Aspen Hysys. Con estos datos se obtiene que la entalpía de formación estándar de la reacción de -21.724 kJ/kmol.

Tabla 5. Datos para el cálculo de la entalpía de formación estándar de la reacción. Fuente: Hysys

Compuesto	Coefficiente estequiométrico	$\Delta H_f^\circ$ (kJ/kmol)
Dodecilbenceno	1	-178.500
Trióxido de azufre	1	-396.000
Ácido dodecilbencensulfónico	1	-596.224

Para el término de las capacidades caloríficas se expresan en función de la temperatura como una expresión cuadrática y se integra. Como no se disponen de valores bibliográficos se extraen para el intervalo de los 25 a los 40°C la capacidad calorífica para cada temperatura de Aspen Hysys, y se ajusta a un polinomio de grado 2. El resultado de la representación se muestra en la Figura 2.

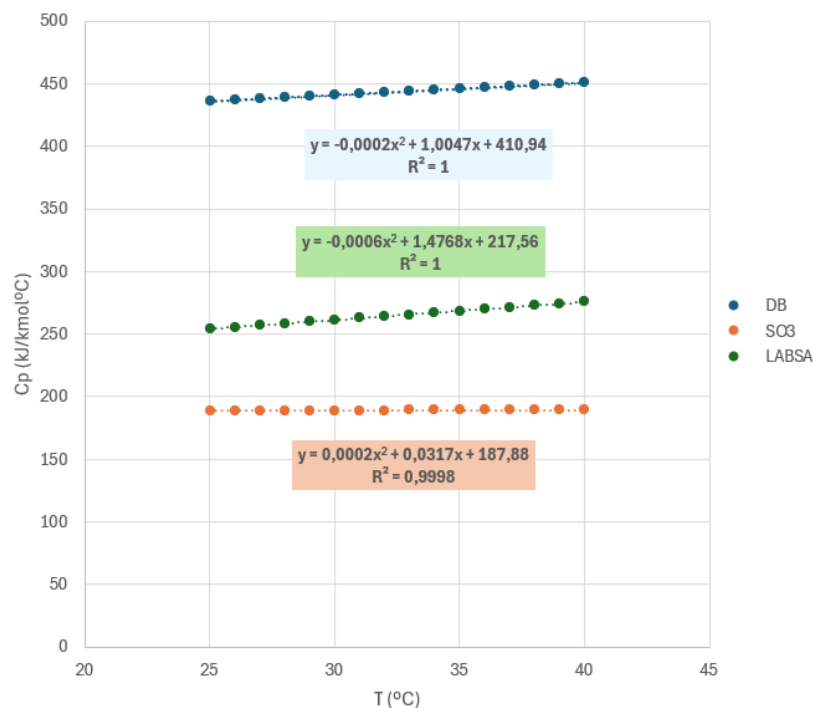


Figura 2. Representación de las capacidades caloríficas frente a la temperatura. Fuente: Elaboración propia

Los valores de las constantes y el resultado de la integral para cada compuesto se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6. Cálculo capacidades caloríficas en función de la temperatura. Fuente: Elaboración propia

Compuesto	A	B	C	$\int_{T_R}^T Cp_i dT$ (kJ/kmol)
Dodecibenceno	4,95E-04	0,29	111,36	6.650,87
Trióxido de azufre	7,99E-05	0,69	328,71	2.817,03
Ácido dodecibencensulfónico	-3,96E-04	1,03	429,69	3973,78

Por lo tanto, teniendo en cuenta los coeficientes estequiométricos, la entalpía de formación de la reacción tiene un valor de -27.219 kJ/kmol.

## 8.2 Modo de operación

Existen dos modos de operación, isotérmico y adiabático. A continuación, se explica y discute la selección para el reactor R-201.

En un reactor isoterma se busca mantener la temperatura constante a lo largo de todo el proceso, lo que implica que se debe retirar calor continuamente si la reacción es exotérmica. Este enfoque requiere un diseño térmico robusto y supone un consumo energético continuo.

En un reactor que opera adiabáticamente no se intercambia calor con el exterior, por lo que la ecuación [5] aplicada a este modo de operación pasa a ser la ecuación [8]. La energía liberada por la reacción implica un cambio de temperatura en la mezcla reaccionante. Este modo de

operación simplifica el diseño y reduce costes operativos, aunque exige comprobar que la temperatura alcanzada se encuentra dentro de los límites de operación adecuados.

$$F_{DB0} \cdot X \cdot \left[ \sum_{i=1}^n \theta_i \cdot (H_{i0} - H_i) - \Delta H_{RX}(T) \right] = 0 \quad [8]$$

En la reacción de sulfonación del dodecilbenceno con óleum, se ha considerado la posibilidad de operar el reactor R-201 bajo condiciones adiabáticas. Sin embargo, esta opción ha sido descartada tras analizar el impacto térmico de la reacción sobre la temperatura del sistema. El cálculo se realiza empleando la ecuación [9]. (6)

$$T = T_0 + \frac{X \cdot [-\Delta H_R^\circ(T_R)]}{\sum_{i=1}^n \theta_i \cdot Cp_i} \quad [9]$$

Donde:

- $T$ : Temperatura de operación del reactor (°C)
- $T_0$ : Temperatura de entrada al reactor 40°C

El funcionamiento adiabático implica un aumento de temperatura proporcional al calor de reacción liberado. En las condiciones propuestas, este incremento supondría un salto térmico de aproximadamente 14 °C, lo que llevaría la mezcla de reacción de 40 °C (temperatura de entrada) hasta 54 °C (temperatura de salida estimada). Aunque esta diferencia podría parecer moderada, en el contexto de la sulfonación incluso un incremento térmico relativamente pequeño puede tener consecuencias significativas en la formación de subproductos no deseados, sulfonas y anhídridos. El diseño isotérmico disipa el calor de reacción a medida que se genera, asegurando condiciones estables y controladas en el volumen del reactor, lo que favorece la seguridad operativa. Por lo tanto, se opta por diseñar el reactor como sistema isoterma, manteniendo constante la temperatura de reacción a 40 °C.

Los resultados obtenidos del balance de energía al reactor R-201 que opera en estado estacionario régimen isoterma se muestran en la Tabla 7.

Tabla 7. Resultados balance de energía reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$F_{DB0}$ (kmol/h)	6,87
$\Delta H_R$ (kJ/kmol)	-27.219,50
$X_D$	0,95
Q (kW)	-49,32

## 9 Diseño del reactor R-201

Este apartado se basa en el diseño del reactor continuo de tanque agitado R-201. Este tipo de reactor se emplea comúnmente en procesos industriales para reacciones en fase líquida, para mantener la homogeneidad y mejorar la uniformidad de temperatura. (6)

## 9.1 Volumen de reacción

En el volumen de reacción de un reactor de tanque agitado todas las variables se toman como idénticas en todos los puntos del interior y en el de salida. No hay dependencia del tiempo o de la posición en la temperatura, concentración o velocidad de agitación.

Para determinar el volumen de la mezcla reaccionante se emplea la ecuación de diseño de un reactor continuo de mezcla perfecta, que se muestra en la ecuación [10], y que se define para el reactivo limitante que es el dodecibenceno. (6)

$$V = \frac{F_{A0}X_A}{(-r_A)_{salida}} \quad [10]$$

Donde:

- V: Volumen de la mezcla (m<sup>3</sup>)
- F<sub>A0</sub>: Flujo molar de alimentación del reactivo limitante (kmol/h)
- X<sub>A</sub>: conversión del reactivo limitante
- (-r<sub>A</sub>)<sub>salida</sub>: Velocidad de reacción del reactivo limitante a la salida (kmol/m<sup>3</sup>·h)

El flujo molar de dodecibenceno de alimentación al reactor se obtiene del balance de materia. Y, como se menciona anteriormente, la composición de salida del reactor es la del interior de este, por lo que la velocidad de reacción se evalúa a las condiciones de salida. Para el valor de conversión se discute su selección.

### 9.1.1 Conversión de diseño

La reacción de sulfonación tiene una alta conversión, de entre el 90-96%. La limitación para el diseño del grado de conversión es el tiempo de residencia de la mezcla en el reactor. Un aumento del tiempo de residencia para elevar el grado de conversión implica un aumento de las dimensiones del tanque y un deterioro de las condiciones de transferencia de calor que conllevan a un deterioro significativo del color. (2)

Un intervalo típico de tiempo de residencia para un reactor de mezcla completa va desde los 10 minutos hasta las 4 horas. Para cumplir con el rango de tiempo de residencia obteniendo a la vez una buena conversión se selecciona un 95%. (6)

Por lo tanto, definidos todos los parámetros necesarios para el cálculo, el volumen obtenido se muestra en la Tabla 8.

Tabla 8. Cálculo volumen de reacción. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
F <sub>A0</sub> (kmol/h)	6,53
X <sub>A</sub>	0,95
(-r <sub>A</sub> ) <sub>salida</sub> (kmol/ m <sup>3</sup> ·h)	1,42
V (m <sup>3</sup> )	4,48

Conocido el volumen de reacción, para los reactores de tanque agitado un rango típico para el correcto funcionamiento es una relación entre la altura del nivel de líquido y el valor del diámetro del reactor de entre 1 y 2. Tras la evaluación de distintas posibilidades, las dimensiones de la profundidad de líquido y el diámetro del tanque se muestran en Tabla 9. (7)

Tabla 9. Dimensiones para el volumen de la mezcla. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
D: Diámetro interno reactor (m)	1,60
H/D	1,41
H: Altura de la mezcla de reacción (m)	2,25

El volumen del reactor R-201 es el volumen de la mezcla reaccionante calculado más el volumen libre necesario del sistema de agitación y cabezales. Por lo que, para obtener el valor total de volumen es necesario seleccionar y dimensionar el sistema de agitación.

## 9.2 Propiedades de la mezcla

Para el diseño y la selección de los componentes del sistema de agitación es necesario conocer las propiedades que caracterizan la mezcla reaccionante: viscosidad, densidad y régimen de flujo.

### 9.2.1 Viscosidad

Determinar el valor de la viscosidad es esencial para el diseño debido a su efecto en el transporte de fluidos. La presión y la temperatura afectan a la viscosidad de un líquido, aunque el efecto de la presión no es significativo comparado con el de la temperatura, que a medida que aumenta su valor disminuye la viscosidad. Un incremento de presión de 300 bar equivale aproximadamente a una disminución de la temperatura de 1 °C. (5)

Los datos de viscosidades de los compuestos a las condiciones de operación, 1 atm y 40°C, se presentan en la Tabla 10.

Tabla 10. Viscosidad de los compuestos a 1 atm y 50°C. Fuente: Hysys.

Viscosidad	(cP)
Dodeceno	0,95
Dodecibenceno	5,19
Trióxido de azufre	3,72
Ácido sulfúrico	15,02

El ácido dodecibencensulfónico no está presente en la mayoría de las bases de datos. Se obtiene el valor de viscosidad dinámica a las condiciones estándar a partir del de viscosidad cinemática como en la ecuación [11], ya que si se dispone de este valor. (8)

$$\mu = \nu \cdot \rho \quad [11]$$

Donde:

- $\mu$ : Viscosidad dinámica (g/cm·s)
- $\nu$ : Viscosidad cinemática (cm<sup>2</sup>/s)
- $\rho$ : Densidad (g/cm<sup>3</sup>)

Los datos y el resultado de viscosidad dinámica a las condiciones estándar se presentan en la Tabla 11.

Tabla 11. Datos para el cálculo de la viscosidad dinámica del ácido dodecibencensulfónico. Fuente: (8)

Parámetro	Valor
$\nu$ (cm <sup>2</sup> /s)	13,148
$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	1,035
$\mu$ (g/cm·s)	13,608

Para estimar la viscosidad del ácido dodecibencensulfónico conociendo el valor para las condiciones estándar se emplea la ecuación de Andrade [12] que describe el comportamiento con la temperatura. (9)

$$\ln(\mu_2/\mu_1) = -\frac{E}{R} \cdot \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad [12]$$

Donde:

- $\mu_1, \mu_2$ : Viscosidades del ácido dodecibencensulfónico a  $T_1$  y  $T_2$  (cP)
- $E$ : energía de activación para el flujo (J/mol)
- $R$ : constante de los gases (J/molK)
- $T_1, T_2$ : temperaturas (K)

La energía de activación se estima en base a la literatura de líquidos orgánicos de cadena larga similares. Estos compuestos presentan valores típicos de energía de activación que están suelen estar entre 20 y 40 kJ/mol. Se selecciona un valor intermedio de 30 kJ/mol para que sea conservador. (10)

En la Tabla 12 se muestra el valor de viscosidad del ácido dodecibencensulfónico obtenido. Se puede observar el considerable efecto de la temperatura.

Tabla 12. Cálculo viscosidad del ácido dodecilbencensulfónico. Fuente: (9)

Parámetro	Valor
$\mu_1$ (cP)	1360,82
E (kJ/mol)	30,00
R (J/molK)	8,314
$T_1$ (K)	298,15
$T_2$ (K)	313,15
$\mu_2$ (cP)	762,14

Una vez que se cuenta con las viscosidades de los compuestos a las condiciones de operación se calcula la viscosidad de la mezcla. Es difícil predecir la viscosidad de las mezclas de líquidos. En el caso de mezclas líquidas orgánicas se utiliza la ecuación de Kern [13]. (11)

$$\frac{1}{\mu_m} = \sum \frac{w_i}{\mu_i} \quad [13]$$

Donde:

- $\mu_m$ : Viscosidad de la mezcla (cP)
- $w_i$ : Fracción másica de cada uno de los componentes
- $\mu_i$ : Viscosidad de cada uno de los componentes (cP)

Las fracciones másicas se calculan a partir de los datos de salida del reactor del balance de materia y se presentan en la Tabla 13.

Tabla 13. Fracciones másicas a la salida del reactor. Fuente: Elaboración propia

Fracción másica	Valor
Dodeceno	0,0001
Dodecilbenceno	0,0126
Trióxido de azufre	0,2385
Ácido sulfúrico	0,0151
Ácido dodecilbencensulfónico	0,7338

Conocidos todos los datos necesarios para el cálculo se obtiene el valor de la viscosidad de la mezcla, que se muestra en la Tabla 14. El valor obtenido indica que es un fluido más viscoso que el agua pero que puede fluir con relativa facilidad por lo que no presenta problemas en los sistemas agitados.

Tabla 14. Valor de la viscosidad de la mezcla de reacción. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$\mu_m$ (cP)	26,45

### 9.2.2 Densidad

Para mezclas líquidas se emplea la relación inversa ponderada que se muestra en la ecuación [14]. (11)

$$\frac{1}{\rho_m} = \sum \frac{w_i}{\rho_i} \quad [14]$$

Donde:

- $\rho_m$ : Densidad de la mezcla ( $\text{kg/m}^3$ )
- $w_i$ : Fracción másica de cada uno de los componentes
- $\rho_i$ : Densidad de cada uno de los componentes ( $\text{kg/m}^3$ )

En la Tabla 15 se recogen los valores de densidades de los compuestos a las condiciones de operación y el valor calculado de la densidad de la mezcla. Los valores de las fracciones másicas se mostraban en la Tabla 13. Fracciones másicas a la salida del reactor.

Tabla 15. Densidades de los compuestos y de la mezcla de reacción. Fuente: Hysys

Densidad	( $\text{kg/m}^3$ )
Dodeceno	744,07
Dodecibenceno	840,43
Trióxido de azufre	1.808,48
Ácido sulfúrico	1.836,07
Ácido dodecibencensulfónico	1.029,91
Mezcla	1.293,57

### 9.2.3 Régimen de flujo

Determinar el régimen de flujo es fundamental porque influye directamente en el comportamiento de la mezcla y en la eficiencia de operación del reactor. El régimen de flujo puede ser laminar, transitorio o turbulento. Para conocerlo se calcula con la ecuación [15] el número de Reynolds, que está relacionado con propiedades clave calculadas, la viscosidad y la densidad, y con la velocidad de agitación.

$$Re = \frac{\rho N d^2}{\mu} \quad [15]$$

Donde:

- Re: Número de Reynolds
- $\rho$ : Densidad de la mezcla ( $\text{kg/m}^3$ )
- N: Velocidad rotacional de agitación ( $\text{s}^{-1}$ )
- d: Diámetro del agitador (m)
- $\mu$ : Viscosidad de la mezcla ( $\text{N}\cdot\text{s/m}^2$ )

Para la selección de la velocidad rotacional de agitación se consultan los valores típicos con los de que se trabaja comercialmente que se muestran en la Figura 3. Se selecciona el valor de 125 rpm tras realizar los cálculos pertinentes y comparar el sistema de agitación final seleccionado con las opciones industriales.(13)

Mixer Speed (rpm)					
4	5	6	$7\frac{1}{2}$	9	11
$13\frac{1}{2}$	$16\frac{1}{2}$	20	25	30	37
45	56	68	84	100	125
155	190	230	280	350	

Figura 3. Velocidades típicas de agitación. Fuente: (12)

El diámetro del agitador depende de la geometría, por lo general el rango típico es de entre 0,3 y 0,5 veces el diámetro del tanque. Tras los cálculos oportunos selecciona el valor de 0,33. Por lo tanto, en la Tabla 16 se muestran los parámetros y el valor obtenido del número de Reynolds. (12)

Tabla 16. Obtención del número de Reynolds para el régimen de flujo. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$\rho$ ( $\text{kg/m}^3$ )	1.293,57
$\mu$ (cP)	26,45
N (rpm)	125
d (m)	0,53
Re	28.400,06

Un valor de Reynolds mayor de  $10^4$  es régimen turbulento, lo que favorece una mezcla más homogénea. Comprender el régimen de flujo permite elegir el tipo de impulsor adecuado, optimizar el diseño del sistema de agitación y prever el comportamiento hidrodinámico del fluido dentro del reactor, asegurando así un diseño más fiable y eficiente.

### 9.3 Sistema de agitación

Un reactor de tanque agitado convencional consiste en un recipiente equipado con un mezclador rotatorio. El mezclador rotatorio tiene varios componentes, un impulsor o agitador, un eje, un sello de eje, una caja de cambios y un motor. Además, se instalan de forma general deflectores en las paredes. En la Figura 4 se puede observar un reactor de tanque agitado convencional con un mezclador de entrada superior. (7)

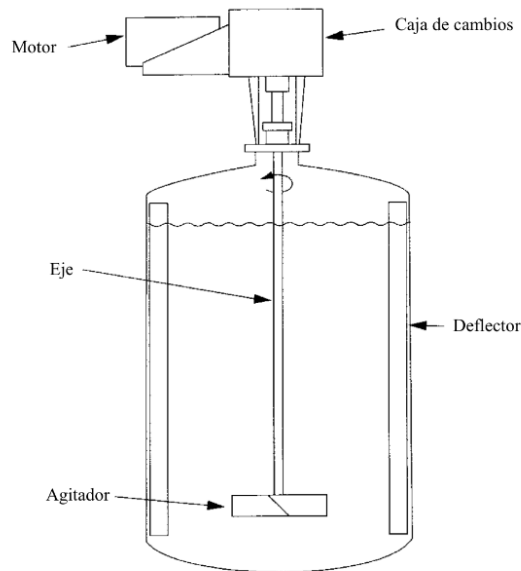


Figura 4. Esquema del diseño básico de un reactor de tanque agitado. Fuente: (7)

El sistema de agitación del reactor depende de las dimensiones del contenido líquido, del impulsor y de los deflectores, entre otros componentes internos. Debido a la influencia de estos elementos en la cantidad de energía necesaria para lograr el nivel de agitación y en la calidad de mezcla requerida se estudia su selección y dimensionamiento.

#### 9.3.1 Selección del agitador

Existen un gran número de tipos de impulsores en el mercado. Para su selección se pueden agrupar según su patrón de flujo en tres tipos: de flujo axial, de flujo radial y mixtos. Para un diseño efectivo del reactor de tanque agitado se debe elegir un impulsor adecuado para el servicio del proceso. El dimensionamiento del impulsor se realiza en conjunto con la velocidad del mezclador para lograr el resultado deseado del proceso. Para realizar una primera selección se emplea la Figura 5, que se basa en la viscosidad del líquido y el volumen del tanque. La región indica que el agitador puede ser de turbina o de hélice.

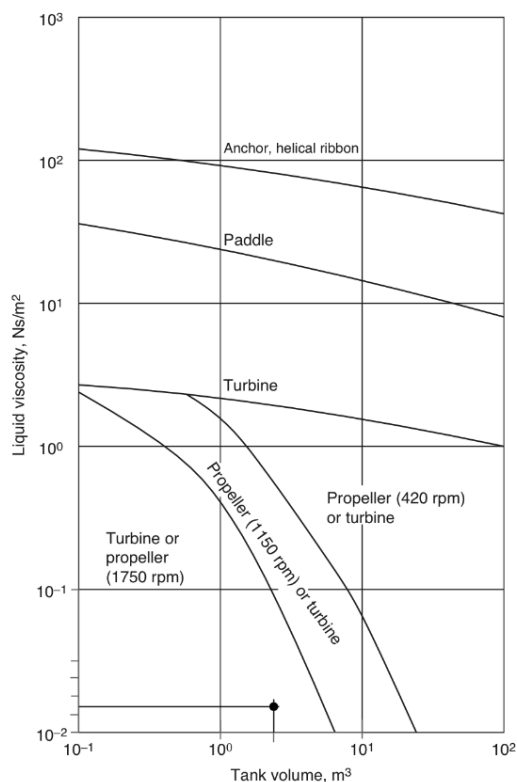


Figura 5. Gráfico para la selección de un agitador en función del volumen y la viscosidad. Fuente: (12)

El diseño de impulsor de flujo axial más antiguo es la hélice marina, que a menudo se utiliza como mezclador de entrada lateral en grandes tanques y como mezclador de entrada superior en tanques pequeños. Debido a su fabricación por fundición, una hélice se vuelve demasiado pesada cuando es grande. No se utiliza generalmente como impulsor de entrada superior para tanques de tamaños mayores a 5 pies (1,524 m). El diámetro del tanque es de 1,60 m por lo que este tipo de agitador se descarta. (7)

Las turbinas pueden ser de palas planas o inclinadas. La turbina de palas planas, conocida como Rushton, es adecuada para procesos controlados por mezcla turbulenta. La turbina de palas inclinadas o curvadas presenta un número de potencia un 20% más bajo que la turbina Rushton. La naturaleza retrocurvada de las palas previene la acumulación de material en las palas, siendo menos susceptible a la erosión. Se seleccionan las turbinas de palas inclinadas por presentar un mayor rendimiento. (7)

Una turbina de palas inclinadas consiste en un cubo con un número par de palas atornilladas y soldadas. Es más ligera que una hélice del mismo diámetro. Las palas pueden estar en cualquier ángulo entre 10 y 90° respecto a la horizontal, pero el ángulo de pala más común es 45°. En la Figura 6 se puede observar una turbina de palas inclinadas. El flujo de descarga de este tipo de impulsor tiene componentes tanto de velocidad de flujo axial como radial en líquidos de viscosidad baja a media, y se considera un impulsor de flujo mixto. (7)

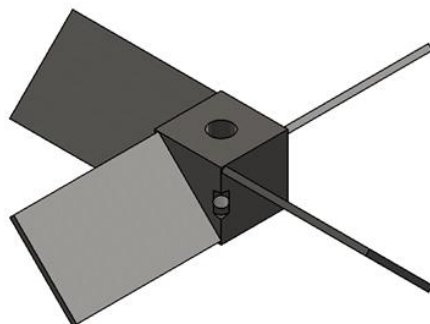


Figura 6. Agitador de turbina de palas inclinadas 45°. Fuente: (13)

### 9.3.2 Deflectores

Para que el patrón de flujo sea efectivo se debe de seleccionar el tamaño y tipo apropiado de deflectores de pared. Los deflectores consisten en superficies sólidas que sirven para prevenir la formación de vórtices y para lograr la rotación de la masa líquida en su conjunto. Su uso es necesario, excepto en caos en los que el régimen sea muy turbulento, y está comúnmente extendido. El principal inconveniente del uso de deflectores es el aumento de resistencia que provocan y por lo tanto el aumento de consumo de energía del impulsor asociado. (7)

Una configuración estándar de deflector consiste en cuatro placas verticales ubicadas a igual distancia. Con seis deflectores la efectividad no se incrementa lo suficiente y con tres son notablemente menos efectivos. (14)

Se selecciona la configuración estándar de cuatro deflectores. Las dimensiones de los deflectores presentan un ancho igual al 8 al 10% del diámetro del reactor y el espacio entre los deflectores y la pared del tanque para minimizar zonas muertas es de tanque 1,5% del diámetro del reactor. (12)

### 9.3.3 Bombeo y número de bombeo

El bombeo es una medida del caudal volumétrico generado por el impulsor, normalizado por la geometría y velocidad de agitación. Sirve para determinar la eficiencia de la mezcla y verificar la selección del agitador. Los valores del número de bombeo (N<sub>Q</sub>) bajo condiciones turbulentas son conocidos para los impulsores comúnmente utilizados y se muestran en la tabla de la Tabla 17.

Tabla 17. Valores estándar del número de bombeo para distintos tipos de impulsor. Fuente: (7)

Impeller Type	N <sub>Q</sub>
Propeller	0.4–0.6
Pitched blade turbine	0.79
Hydrofoil impellers	0.55–0.73
Retreat curve blade	0.3
Flat-blade turbine	0.7
Disk flat-blade turbine (Rushton)	0.72
Hollow-blade turbine (Smith)	0.76

Los valores del número de bombeo para los impulsores más comúnmente utilizados varían en el rango de 0,4 a 0,8. Todos los impulsores estándar bombean a aproximadamente la misma tasa para un diámetro y velocidad del mezclador dados. El valor para los agitadores de turbina de palas inclinadas es de 0,79. La muestra la relación del número de bombeo con el número de Reynolds

y la relación diámetro del impulsor (D) y diámetro del tanque (T) para una turbina de palas inclinadas a 45°.

El número de bombeo aumenta a medida que lo hace el Reynolds hasta un valor de 10.000 y se vuelve constante para valores más altos. Además, los impulsores de menor diámetro tienen números de bombeo más altos. La relación hace que se seleccione el valor de 0,3.

### 9.3.4 Potencia y número de potencia

La potencia del eje requerida para accionar un agitador se puede estimar utilizando la ecuación a partir de los datos disponibles sobre las características del impulsor.

$$P = N_p \rho N^3 D^5 \quad [16]$$

Donde:

- P: Potencia del eje (W)
- $N_p$ : Número de potencia
- $\rho$ : Densidad de la mezcla ( $\text{kg/m}^3$ )
- N: Velocidad rotacional de agitación ( $\text{s}^{-1}$ )
- d: Diámetro del agitador (m)

Primero es necesario determinar el valor del número de potencia. Existen valores bibliográficos para el tipo de sistema de agitación seleccionado, como los mostrados en la Tabla 18 para varios tipos de agitadores bajo condiciones de flujo turbulento con cuatro deflectores estándar. (7, 12)

Tabla 18. Numero de potencia para varios tipos de agitadores bajo condiciones turbulentas con cuatro deflectores estándar. (7)

Impeller Type	$N_p$
Concave- or hollow-blade turbine	4.1
Ekato MIG—3 impellers, D/T = 0.7	0.55
Ekato Intermig—2 impellers, D/T = 0.7	0.61
High-shear disk at Re = 10 000	0.2
	(lower for lower Re)
Lightnin A310	0.3
Chemineer HE3	0.3
The following are all for D = T/3, C = T/3, and blade width W = D/5:	
45°PBT; 4 blades	1.27
45°PBT; 6 blades	1.64
Marine propeller (1.0 pitch)	0.34
Marine propeller (1.5 pitch)	0.62
Smith or concave- or hollow-blade with 6 blades	4.4

El número de potencia para un agitador de palas inclinadas 45° y 4 deflectores es de 1,27. Un valor que es típico también a nivel industrial. (13)

En la Tabla 19 se muestran los valores de cada parámetro para el cálculo de la potencia del agitador. Este valor de potencia se compara con referencias bibliográficas y con proveedores industriales para confirmar que tienen sentido físico y comercial.

Tabla 19. Cálculo potencia del agitador. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$N_p$	1,27
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1.293,56
N (rpm)	125
d (m)	0,58
P (kW)	1,01

### 9.3.5 Dimensionamiento del sistema de agitación

El diseño del mezclador se finaliza con el diseño mecánico del eje, el grosor de la pala del impulsor, el grosor de los deflectores y soportes, las boquillas de entrada/salida, los rodamientos, los sellos, la caja de cambios y las estructuras de soporte. En la Figura 7 se presenta un esquema de las dimensiones básicas estandarizadas para un reactor de tanque agitado con cuatro deflectores equiespaciados.

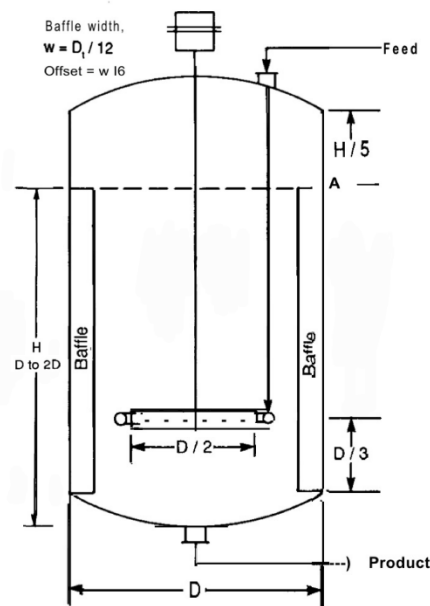


Figura 7. Diseño básico de un reactor de tanque agitado y sus dimensiones típicas, no a escala. Fuente: (14)

Teniendo en cuenta que la altura libre de líquido es un quinto de la altura de líquido, y el dimensionamiento de los cabezales en el apartado 11.5 Cabezales del diseño mecánico, en la Tabla 20 se muestran las dimensiones del reactor R-201.

Tabla 20. Dimensiones básicas del reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

<b>Parámetro</b>	<b>Valor</b>
Altura de líquido (m)	2,25
Altura libre de líquido (m)	0,45
Altura cabezales (m)	0,36
Altura total (m)	3,06
Diámetro interno del tanque (m)	1,60
Diámetro del agitador (m)	0,80
Distancia del agitador del fondo (m)	0,55
Longitud del agitador (m)	0,20
Altura del agitador (m)	0,16
Grosor del agitador (m)	0,08
Ancho de deflector (m)	0,128
Espacio entre el deflector y la pared (m)	0,024

La altura libre del líquido es un 20% de la altura de líquido. Como se mencionaba, el sistema de agitación cuenta con un agitador de turbina de 4 palas inclinadas 45°, el diámetro del agitador es la mitad del diámetro interior del tanque. La longitud de la pala es el 25% del diámetro del agitador, la altura el 20% y el grosor el 10%. Para los deflectores se seleccionan 4 con una altura igual a la del líquido, un ancho de deflector del 8% del diámetro interno del tanque y un espacio entre el deflector y la pared del 1,5%.

## 10 Sistema de refrigeración

Los principales sistemas de refrigeración que se emplean en los reactores son las camisas externa o los serpentines internos. Para minimizar efectos sobre el sistema de agitación se selecciona el uso de una camisa externa de refrigeración.

Las camisas externas se pueden clasificar en función del área cubierta del reactor, pudiendo cubrir solo el área lateral o el área lateral y la superficie del fondo del reactor. En la Figura 8 se pueden observar las dos posibilidades. La selección del área que se recubre depende principalmente de los requisitos de transmisión de calor necesarios.

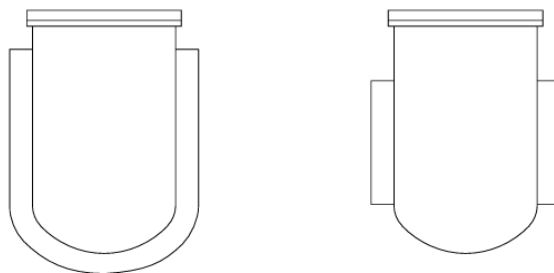


Figura 8. Configuraciones de camisa de refrigeración. Fuente: (12)

Las camisas, independientemente del área que recubren, son de varios tipos como los que se pueden observar en la Figura 9 . Para la selección se tiene en cuenta el coste asociado a su diseño, la tasa de transferencia de calor requerida y la presión.

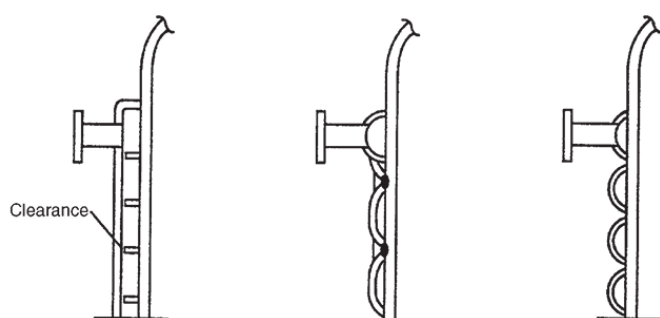


Figura 9. Tipos de camisas de refrigeración, Fuente: (12)

La opción más económica es la chaqueta convencional simple, que presenta la tasa de transferencia de calor más baja. No se recomienda su uso para tamaños mayores a los 1000 galones ( $3,8 \text{ m}^3$ ) debido a limitaciones térmicas y mecánicas. Por este motivo, no se selecciona esta configuración para el diseño, siguiendo las recomendaciones. (15, 16)

La camisa con hendiduras, *dimple jacket*, consiste en una doble pared unida por puntos de soldadura distribuidos en una red regular, generando cavidades a través de las cuales circula el fluido térmico. Este diseño tiene la ventaja de requerir menor volumen de fluido de servicio y un peso estructural reducido, lo que la hace interesante para equipos de tamaño medio o cuando se busca aligerar la carga sobre la estructura. No obstante, su área de contacto efectiva es menor, y la distribución térmica puede ser menos uniforme en comparación con otras configuraciones, especialmente en procesos donde se requiere disipar cargas térmicas elevadas con alta precisión. (12, 15, 16)

La camisa de media tubería, *half pipe*, presenta elevada transferencia de calor y un buen control de la temperatura, siendo una de las camisas más empleadas a nivel industrial. Además, también presenta buena resistencia mecánica, y trabajando con el reactor a presión atmosférica no se requieren refuerzos especiales, facilitando su implementación. Debido a la importancia del control de temperatura en el reactor se decide implementar este tipo de camisa cubriendo de forma efectiva la superficie lateral. Solo se recubre la superficie lateral ya que es suficiente para garantizar la disipación del calor generado durante la reacción, que tiene lugar en esa misma zona. (12, 15, 16)

## 10.1 Refrigerante

Para el diseño térmico del reactor R-201 se selecciona agua como fluido refrigerante, con una temperatura de entrada de 25 °C y de salida de 30 °C, es decir, un salto térmico de 5 °C. Esta selección se fundamenta en criterios heurísticos y operativos ampliamente aceptados en el diseño de reactores con camisa. (17)

El agua es el fluido refrigerante más económico y con mayor disponibilidad. Además, cumple los requisitos para retirar el calor deseado, trabajando en los rangos de temperatura recomendados. En la Tabla 21 se recogen las propiedades del agua de refrigeración a la temperatura media.

Tabla 21. Propiedades del agua como fluido refrigerante.

Parámetro	Valor
C <sub>p</sub> (kJ/kg·K)	4,18
ρ (kg/m <sup>3</sup> )	996,5
μ (cP)	0,85
k (W/m·K)	0,613
T <sub>entrada</sub> (°C)	26
T <sub>salida</sub> (°C)	31

El caudal de agua de refrigeración necesario se calcula a partir del balance de energía a este fluido que absorbe el calor generado en el reactor durante el paso por la camisa, ecuación [17]. El resultado se muestra en la Tabla 22.

$$Q = m \cdot C_p \cdot \Delta T \quad [17]$$

Donde:

- Q: Calor a disipar (W)
- m: Caudal másico del agua de refrigeración (mol/s)
- C<sub>p</sub>: calor específico medio del agua de refrigeración (J/mol·K)
- ΔT: Incremento de temperatura ente la temperatura de salida y la de entra del agua (K).

Tabla 22. Calculo caudal de agua de refrigeración. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
Q (kW)	49
m (kg/s)	2,36

Por lo tanto, el caudal de agua de refrigeración necesario tiene un valor de 2,36 kg/s.

## 10.2 Dimensionamiento de la camisa

Es necesario determinar el área de intercambio que proporciona la camisa. Para ello se debe de dimensionar adecuadamente seleccionando los principales parámetros, como las medidas geométricas del tubo empleado, el diámetro interior de la tubería, el espesor de la pared y el pitch.

La camisa de media tubería no cubre toda la superficie lateral del equipo. La media tubería recorre de forma helicoidal la pared del reactor dejando un espaciado constante entre cada una de las vueltas. Esta distancia entre los ejes de dos vueltas consecutivas se conoce como pitch.

Los valores de diámetros típicos a nivel industrial para las tuberías van desde las 2 hasta las 4 pulgadas (5,08 a 10,16 cm). Para favorecer la turbulencia aumentando la velocidad se selecciona un diámetro interno de tubería de 5,08 cm. (18)

El espesor de la pared se determina en el apartado de 11.4.2 Camisa de refrigeración de diseño mecánico. Se selecciona la mínima distancia entre tuberías que es de 20 mm, dentro del rango recomendado de 20 a 40 mm. (19)

Por lo tanto, el valor del pitch que se calcula según la ecuación [18], obteniendo un valor de 76,34 mm.

$$p = dci + 2tc + s \quad [18]$$

Donde:

- p: Pitch (mm)
- dci: Diámetro interno de la camisa (mm)
- tc: Espesor de tubería del sistema de refrigeración (mm)
- s: Distancia entre tuberías (mm)

La longitud total de la tubería de la camisa de refrigeración se calcula en función del diámetro interno, el espesor, el pitch y el número de vueltas, como en la ecuación [19]. El primer término representa la altura total ocupada, ya que se multiplica por el número de vueltas y tiene en cuenta el diámetro externo de la tubería. El segundo término representa el espacio libre entre tuberías.

$$Lc = (dci + 2tc) \cdot N + (p - dci - 2tc) \cdot (N - 1) \quad [19]$$

Donde:

- Lc: Longitud total de la tubería (mm)
- N: Número de vueltas de la camisa

Para determinar el número de vueltas y la longitud total de la tubería es necesario calcular el área de intercambio de calor. Para ello se tiene en cuenta el área lateral total y el área lateral que no se ocupa. La relación entre las áreas se describe en la ecuación [20], y cada una de ellas individualmente en las ecuaciones [21] y [22].

$$A_{lateral} = \pi \cdot Do \cdot L = A_{vacía} + A_c \quad [20]$$

$$A_{vacía} = Lc \cdot 2 \cdot tc + Lc \cdot (N - 1) \cdot \frac{(p - 2tc - dci)}{N} \quad [21]$$

$$A_c = Lc \cdot dci \quad [22]$$

Donde:

- $A_{lateral}$ : Área total disponible ( $m^2$ )
- Do: Diámetro externo del reactor R-201 (m)
- L: Altura del sistema de refrigeración (m)
- $A_{vacía}$ : Área no ocupada por la camisa ( $m^2$ )
- $A_c$ : Área de intercambio de calor de la camisa ( $m^2$ )

El valor conocido es el del área lateral total, por lo que se obtiene la segunda expresión en función de la longitud total de la media tubería y el número de vueltas. El valor del diámetro externo del reactor R-201 se obtiene en el apartado 11.4.1 del diseño mecánico donde se determina el espesor mínimo necesario para la pared del reactor. La altura del sistema de refrigeración es la altura del recipiente sin tener en cuenta el cabezal, es decir, la suma de la altura de mezcla reaccionante y de la altura libre de líquido. Los valores obtenidos se muestran en la Tabla 23.

Tabla 23. Cálculos del dimensionamiento de la camisa de refrigeración. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
dci (mm)	50,80
tc (mm)	3,50
s (mm)	20,00
p (mm)	70,80
Do (m)	1,62
L (m)	2,70
Lc (m)	117,85
N	35,00
$A_c$ ( $m^2$ )	9,03

Conocido el valor del área de intercambio de calor se calcula el valor del coeficiente global de transmisión de calor según la ecuación [23]. El valor obtenido, que se muestra en la Tabla 24, se compara con el calculado en el siguiente apartado, si la diferencia es menor del 30% se acepta el diseño.

$$Q = U \cdot A_c \cdot \Delta T_{ml} \quad [23]$$

Donde:

- Q: Calor a disipar (W)
- U: Coeficiente global de transmisión de calor ( $W/m^2 \cdot K$ )
- $A_c$ : Área de intercambio de calor de la camisa ( $m^2$ )
- $\Delta T_{ml}$ : Incremento de temperatura medio logarítmico ente la temperatura de salida y la de entra del agua (K)

El incremento medio logarítmico de temperatura se calcula siguiendo la ecuación [24].

$$\Delta T_{ml} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} \quad [24]$$

Donde:

- $\Delta T_1$ : Incremento de temperatura entre las entradas (K)
- $\Delta T_2$ : Incremento de temperatura entre las salidas (K)

Tabla 24. Cálculo coeficiente global de transferencia de calor estimado. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
T entrada y salida de la mezcla (°C)	40
T entrada agua refrigeración (°C)	25
T salida agua refrigeración (°C)	30
$\Delta T_1$ (K)	15
$\Delta T_2$ (K)	10
$\Delta T_{ml}$ (K)	12,3
$A_c$ (m <sup>2</sup> )	9,03
Q (kW)	49,32
U (W/m <sup>2</sup> ·K)	442,71

### 10.3 Cálculo del coeficiente global de transmisión de calor

El cálculo del coeficiente global de transmisión de calor se realiza considerando las resistencias térmicas en serie. Se evalúa la convección del fluido interno del reactor hacia la pared de este, la conducción a través del espesor de la pared del reactor, y la convección desde la pared exterior del reactor hacia el fluido de refrigeración. Por lo tanto, en la ecuación [25] se muestra la expresión resultante para el cálculo del coeficiente global de transmisión de calor.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_v} + \frac{D_o \cdot \ln\left(\frac{D_o}{D}\right)}{2 \cdot kw} + \frac{D}{D_o \cdot hc} \quad [25]$$

Donde:

- U: Coeficiente global de transmisión de calor (W/m<sup>2</sup>·K)
- $h_v$ : Coeficiente de convección en el interior del reactor (W/m<sup>2</sup>·K)
- $D_o$ : Diámetro externo del reactor (m)
- D: Diámetro interno del reactor (m)
- kw: Conductividad térmica del material de construcción (W/m·K)
- hc: Coeficiente de convección en el interior de la camisa (W/m<sup>2</sup>·K)

### 10.3.1 Convección en el interior del reactor

En reactores de tanque agitado las correlaciones para estimar el coeficiente de transferencia de calor a la pared del recipiente siguen la forma de la ecuación [26]. (20)

$$Nu = C \cdot Re^a \cdot Pr^b \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^c \quad [26]$$

Donde:

- Nu: Número de Nusselt
- C: Constante que depende del sistema de agitación
- a, b y c: Índices que dependen del sistema de agitación
- Re: Número de Reynolds
- Pr: Número de Prandtl
- $\mu$ : Viscosidad a la temperatura del fluido (cP)
- $\mu_w$ : Viscosidad a la temperatura de la pared (cP)

Los valores de la constante C y los índices a, b y c dependen del tipo de agitador, del uso de deflectores y de la dirección de la transmisión de calor. Además, la velocidad del fluido se reemplaza por una función del diámetro del agitador y la velocidad de rotación, por lo tanto, la expresión queda como se muestra en la ecuación [27]. (20)

$$\frac{h_v D_i}{k_f} = C \cdot \left(\frac{N \cdot d^2 \cdot \rho}{\mu}\right)^a \cdot \left(\frac{C_p \cdot \mu}{k_f}\right)^b \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^c \quad [27]$$

Donde:

- $h_v$ : Coeficiente de convección en el interior del reactor (W/m<sup>2</sup>·K)
- $D_i$ : Diámetro interno del reactor (m)
- $k_f$ : Conductividad térmica de la mezcla reaccionante (W/m·K)
- N: Velocidad del agitador (1/s)
- d: Diámetro del agitador (m)
- $\rho$ : densidad de la mezcla reaccionante (kg/m<sup>3</sup>)
- $C_p$ : Capacidad calorífica de la mezcla reaccionante (J/kg·K)

Para un sistema de agitación de turbina de palas planas que incluye deflectores internos en el reactor, donde la transferencia de calor es desde el fluido reaccionante hacia la pared del recipiente, y con un valor de número de Reynolds mayor a 400, la correlación empleada es la [28]. (20)

$$Nu = 0,74 \cdot Re^{0,67} \cdot Pr^{0,33} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0,14} \quad [28]$$

Los resultados obtenidos para el cálculo del coeficiente de convección en el interior del reactor se muestran en la Tabla 25.

Tabla 25. Resultados cálculo coeficiente de convección en el interior del reactor.

Parámetro	Valor
Re	35.545,55
Pr	440,2
Nu	6.033,54
h <sub>v</sub> (W/m <sup>2</sup> ·K)	538,7

### 10.3.2 Conducción a través de la pared del reactor

La transferencia de calor desde el fluido en el interior del reactor hacia el fluido refrigerante que circula por la camisa se produce a través de la pared del recipiente, fabricada en acero inoxidable 304, como se explica en 11.1 Selección del material del diseño mecánico. Esta etapa se modela como una conducción radial en una pared cilíndrica, y su resistencia térmica se calcula mediante la ecuación [29]. (21)

Los valores necesarios para el cálculo se muestran en la Tabla 26.

$$\text{Resistencia debido a la conducción} = \frac{D_o \cdot \ln\left(\frac{D_o}{D}\right)}{2 \cdot k_w} \quad [29]$$

Tabla 26. Valores cálculo término de conducción. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
D (m)	1,60
D <sub>o</sub> (m)	1,62
k <sub>w</sub> (W/m·K)	14,90

### 10.3.3 Convección en el interior de la camisa

Para el cálculo de la convección en el interior de la camisa también se parte de la ecuación [26]. Finalmente, la correlación para la convección en la camisa de refrigeración de medio tubo se expresa en la ecuación [30]. (21)

$$Nu = 0,023 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^{0,33} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0,14} \cdot E \quad [30]$$

Donde:

- E: Eficiencia teniendo en cuenta las zonas del reactor no cubiertas por la camisa.

Teniendo en cuenta que el área vacía de la camisa tiene un valor mínimo y que por lo general se suele tomar el valor de la eficiencia entre valores de 0,8 y 1, se selecciona una eficiencia de 1.

Referido a las características y las propiedades del agua como fluido refrigerante se emplea la ecuación [31]. (21)

$$\frac{h_c De}{k_{cw}} = 0,023 \cdot \left( \frac{\rho_{cw} \cdot v_{cw} \cdot De}{\mu_{cw}} \right)^{0,8} \cdot \left( \frac{C_{p_{cw}} \cdot \mu_{cw}}{k_{cw}} \right)^{0,33} \cdot \left( \frac{\mu_{cw}}{\mu_w} \right)^{0,14} \cdot E \quad [31]$$

Donde:

- $h_c$ : Coeficiente de convección en el interior de la camisa ( $W/m^2 \cdot K$ )
- $De$ : Diámetro equivalente de la media tubería (m)
- $v_{cw}$ : Velocidad de la masa de agua de refrigeración (m/s)

El diámetro equivalente de la media tubería se calcula según la ecuación [32], obteniendo un valor de 0,08 m, y la velocidad de la masa de agua de refrigeración según la ecuación [33], obteniendo un valor de 2,34 m/s.

$$De = \frac{\pi \cdot d_{ci}}{2} \quad [32]$$

$$v_{cw} = \frac{m/\rho_{cw}}{S} \quad [33]$$

Por lo tanto, conocidos todos los datos necesarios para el cálculo, se muestra en la Tabla 27 los resultados del cálculo de coeficiente de convección en el interior de la camisa de refrigeración.

Tabla 27. Resultados cálculo coeficiente de convección en el interior del reactor.

Parámetro	Valor
Re	231.558,26
Pr	5,5
Nu	794,21
$h_v$ ( $W/m^2 \cdot K$ )	9555,5

### 10.3.4 Comprobación

Una vez obtenidos los coeficientes se emplea la ecuación [25] para obtener el valor del coeficiente global de transmisión de calor. Una vez obtenido se compara con el estimado con la ecuación [34]. Como se muestra en la Tabla 28, la diferencia entre ambos es menor del 30% por lo que se aceptan los cálculos para el diseño.

$$\epsilon_U = \frac{|U - U_{estimado}|}{U} \cdot 100 \quad [34]$$

Tabla 28. Comprobación coeficiente global de transferencia de calor. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
U estimado (W/m <sup>2</sup> ·K)	442,71
U (W/m <sup>2</sup> ·K)	384,28
ε <sub>U</sub> (%)	15

#### 10.4 Caída de presión en la camisa de refrigeración

La camisa de media tubería que recubre la superficie lateral de forma, tiene una longitud total de recorrido considerable. En este tipo de configuraciones, debido a la longitud, el diámetro y la velocidad necesaria para mantener un régimen turbulento pueden generar pérdidas de carga significativas. Por este motivo, es necesario evaluar la caída de presión. Para ello, se emplean correlaciones específicas para camisas de media tubería, considerando tanto la fricción en el flujo como las propiedades físicas del agua y la geometría de la camisa. Para determinar la caída de presión se emplea la ecuación [35]. (19)

$$\Delta P = 4 \cdot f \cdot \left(\frac{L_c}{D_h}\right) \cdot \left(\frac{\rho_{cw} \cdot v_{cw}^2}{2}\right) \quad [35]$$

Donde:

- ΔP: Caída de presión en la camisa (Pa)
- f: Factor de fricción de Adalah
- D<sub>h</sub>: Diámetro hidráulico de la camisa de media tubería (m)

El factor de fricción se calcula mediante una correlación empírica desarrollada por García Adalah para flujos en camisas de media tubería, ecuación [36]. Esta expresión permite estimar la caída de presión teniendo en cuenta tanto la velocidad del fluido y sus propiedades como la geometría del canal, ajustándose adecuadamente al comportamiento observado en configuraciones industriales reales. (19)

$$f = 0,076 \cdot Re_{cw}^{-0,25} + 0,0073 \cdot \left(\frac{D_h}{D_e}\right)^{0,50} \quad [36]$$

Donde:

- Re<sub>cw</sub>: Número de Reynolds calculado para el agua de la camisa de refrigeración
- D<sub>e</sub>: Diámetro externo del reactor (m)

El diámetro hidráulico de la camisa de media tubería se calcula según la ecuación [37]. Es una expresión empírica obtenida de estudios industriales.

$$D_h = 0,611 \cdot dci \quad [37]$$

Los datos y resultados se reflejan en la Tabla 29.

Tabla 29. Resultado cálculos caída de presión en la camisa. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$d_{ci}$ (mm)	50,8
$D_h$ (mm)	31,04
$D_e$ (m)	79,80
$\rho_{cw}$ (kg/m <sup>3</sup> )	995,95
$v_{cw}$ (m/s)	2,34
$f$	0,0045
$\Delta P$ (bar)	2,79

## 11 Diseño mecánico

El diseño mecánico del reactor R-201 como un recipiente cilíndrico a presión sigue el código de aplicación *ASME Boiler and Pressure Vessel Code (BPV) Sección VIII División 1*, como se explica en *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales*.

### 11.1 Selección del material

La selección del material de construcción sigue la metodología Ashby, como se explica en *2. Selección del material del Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales*. En este documento mencionado se detalla la selección.

Para aplicar esta metodología se definen los requerimientos de diseño para recipientes a presión seguros, con el objetivo de contener la presión con seguridad. Se aplica el criterio de fuga antes de rotura, conocido como *Leak before break*. Maximizando el índice asociado a este criterio y al económico, evaluando la compatibilidad química y teniendo en cuenta las condiciones de operación, el material seleccionado es el acero inoxidable 304.

Para la camisa del reactor, evaluando la compatibilidad química e industrial, se selecciona también el acero inoxidable 304. Es un material que puede trabajar con el agua que circula por la camisa de refrigeración y ampliamente empleado por los fabricantes.

### 11.2 Presión de diseño

Para el reactor R-201, la presión de diseño es el valor mayor de los dos sobredimensionamientos que se aplican mediante las *Ecuaciones [4] y [5]* de la *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales*. Los valores obtenidos se pueden observar en la Tabla 30. La presión de diseño es de 2,74 bar.

Tabla 30. Cálculo de la presión de diseño para el reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$P_{\text{operación}}$ (bar)	1,01
$P_{\text{diseño 1}}$ (bar)	1,11
$P_{\text{diseño 2}}$ (bar)	2,74

Se emplea el mismo método para la camisa de refrigeración, teniendo en cuenta la caída de presión, los resultados se muestran en la Tabla 31, obteniendo un valor de 5,52 bar para la presión de diseño de la camisa.

Tabla 31. Cálculo de la presión de diseño para la camisa del reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$P_{\text{operación}}$ (bar)	3,79
$P_{\text{diseño 1}}$ (bar)	4,17
$P_{\text{diseño 2}}$ (bar)	5,52

### 11.3 Temperatura de diseño

La temperatura de diseño se calcula con un sobredimensionamiento de 50°F, siguiendo la Ecuación [6] del Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales. Para el reactor R-201 la temperatura máxima de operación es de 40°C ya que opera isotérmicamente. El valor obtenido de diseño es de 67,78°C como se presentan en la Tabla 32.

Tabla 32. Cálculo de la temperatura de diseño para el reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$T_{\text{máx}}$ (°C)	40,00
$T_{\text{diseño}}$ (°C)	67,78

Para la camisa de refrigeración la temperatura máxima es a la salida, con un valor de 30°C. Empleando el mismo sobredimensionamiento la temperatura de diseño de la camisa es de 57,78°C como se muestra en la Tabla 33.

Tabla 33. Cálculo de la temperatura de diseño para la camisa del reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$T_{\text{máx}}$ (°C)	30,00
$T_{\text{diseño}}$ (°C)	57,78

## 11.4 Espesor mínimo requerido

### 11.4.1 Reactor R-201

Para el diseño mecánico de la carcasa del reactor R-201 es necesario determinar el espesor mínimo de pared requerido. Este espesor se calcula sujeto a presión interna y presión externa. El reactor se encuentra bajo presión externa debido a la camisa, por lo que se selecciona el espesor de mayor tamaño tras evaluar ambas presiones.

En el caso de la presión interna, en base al Código ASME BPV Sec. VIII Div. 1, se calcula el espesor mínimo debido a la tensión radial y la tensión longitudinal, *Ecuación [7]* y *Ecuación [8]* de la *Parte A: Consideraciones Generales* para un recipiente cilíndrico y se selecciona el mayor espesor obtenido. Para el cálculo es necesario conocer el valor del esfuerzo máximo permisible y de la eficiencia de soldadura. Ambos se obtienen de las *Figuras 3* y *4* de la *Parte A: Diseño Mecánico*.

El esfuerzo máximo permisible se selecciona en la *Figura 3* teniendo en cuenta que el material es acero inoxidable 304 y que la temperatura de diseño es de 154°F. En esta tabla se recomienda no interpolar por lo que se selecciona el valor mayor más próximo para la temperatura.

La eficiencia de soldadura se selecciona teniendo en cuenta la *Figura 4*. Depende del tipo de unión y del examen radiográfico. Para el reactor R-201 se selecciona una junta a tope de doble soldadura con un examen radiográfico completo, obteniendo una eficiencia de soldadura de 1.

Los resultados obtenidos del cálculo de espesores se muestran en la Tabla 34.

Tabla 34. Cálculo espesores por presión interna. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$D_i$ (m)	1,60
$P_i$ (psi)	39,70
$S$ (psi)	15.000
$E$	1,00
$t_{\text{radial}}$ (mm)	2,12
$t_{\text{longitudinal}}$ (mm)	1,06
Corrosión permisible (mm)	4,00
$t_{\text{corregido por corrosión}}$ (mm)	6,12
$t_{\text{presión interna}}$ (mm)	9,00

El espesor por tensión radial es mayor que por tensión longitudinal. Además, el valor de espesor por radial también cumple con la norma ASME BPV y presenta un valor mayor a 1,5 mm. Por lo tanto, al espesor de 2,12 mm se le añade el factor de corrección por corrosión que se selecciona de 4 mm debido a la naturaleza de los compuestos involucrados. Este valor corregido es menor que el espesor mínimo recomendado de 9 mm, que se muestra en la *Tabla 4* de la *Parte A: Consideraciones Generales* para un diámetro de entre 1 y 2 m. Por lo tanto, el espesor mínimo por presión interna es de 9 mm.

Para el diseño por presión externa es necesario que el espesor seleccionado garantice que la presión admisible sea superior a la presión de diseño de la camisa. La presión admisible se calcula como la ecuación [38].

$$P_{adm} = \frac{P_c}{n} \quad [38]$$

Donde:

- $P_c$ : Presión crítica de pandeo ()
- $n$ : Factor de seguridad

El factor de seguridad toma un valor de 4. La presión crítica es la que provoca el pandeo, y se calcula mediante la ecuación [39] para equipos con camisa de refrigeración.

$$P_c = \frac{2,42 \cdot E_y \cdot \left(\frac{t}{D_e + 2 \cdot t}\right)^{5/2}}{\left\{ (1 - \gamma^2)^{3/4} \cdot \left(\frac{L}{D_e + 2 \cdot t} - 0,45 \cdot \left(\frac{t}{D_e + 2 \cdot t}\right)^{1/2}\right) \right\}} \quad [39]$$

Donde:

- $E_y$ : Módulo de elasticidad del material ()
- $t$ : Espesor de la pared del recipiente (m)
- $D_e$ : Diámetro externo del repiente (m)
- $\gamma$ : Coeficiente de Poisson ()
- $L$ : Longitud efectiva del recipiente (m)

El módulo de elasticidad del acero inoxidable 304 se obtiene para las condiciones de diseño. El coeficiente de Poisson se mantiene constante en un amplio rango de temperaturas como 0,3. Para el cálculo de la presión crítica se igual el valor de la presión admisible al de diseño. El valor del diámetro externo se expresa en función del diámetro interno y del espesor. El valor de espesor que se obtiene se muestra en la

Tabla 35.

Tabla 35. Cálculo espesor por presión externa. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
$P_{adm}$ (MPa)	0,55
$n$	4,00
$P_c$ (MPa)	2,21
$E_y$ (GPa)	193,00
$D_i$ (m)	1,60
$\gamma$	0,30
$L$	3,06
$t_{\text{calculado}}$	15,26
Corrosión permisible (mm)	4,00
$t_{\text{presión interna}}$ (mm)	19,26

Al valor obtenido es necesario aplicarle los 4 mm por corrosión, obteniendo finalmente un valor de 19,26 mm. Este valor calculado por presión externa es mayor que el calculado por presión interna, por lo que el espesor para la carcasa del reactor para que no se produzca pandeo es de 19,26 mm.

### 11.4.2 Camisa de refrigeración

El espesor de la camisa de refrigeración se calcula para una camisa de media tubería empleando la ecuación [40].

$$t_{camisa} = \frac{P_i \cdot r_i}{0,85 \cdot S - 0,6 \cdot P_i} \quad [40]$$

Donde:

- $t_{camisa}$ : Espesor de la camisa (m)
- $P_i$ : Presión de diseño de la camisa de refrigeración (psi)
- $r_i$ : Radio interno de la camisa de refrigeración (m)
- $S$ : Esfuerzo máximo permisible (psi)

El esfuerzo máximo permisible se selecciona en la *Figura 3* de la *Parte A: Consideraciones Generales*, teniendo en cuenta que el material es acero inoxidable 304 y que la temperatura de diseño es de 136°F. El factor de corrección por corrosión se selecciona de 2 mm ya que el fluido que circula por la camisa es agua.

Parámetro	Valor
$r_i$ (mm)	25,40
$P_i$ (psi)	80,01
$S$ (psi)	15.000
$t_{calculado}$ (mm)	0,16
$t_{norma}$ (mm)	1,50
Corrosión permisible (mm)	2,00
$t_{corregido}$ por corrosión (mm)	3,50

El espesor calculado es de 0,15 mm, un valor inferior al mínimo de la norma ASME BPV Sección VIII División 1, que es de 1,5 mm. Por lo tanto, la corrección por corrosión se aplica a este valor, obteniendo un espesor final para la camisa de refrigeración de 3,5 mm.

### 11.5 Cabezales

Los recipientes agitados convencionales utilizan un tanque cilíndrico con un fondo plano o cóncavo. En el diseño del reactor R-201, como un recipiente a presión, la importancia de la selección de los cabezales reside en el efecto que tienen en el comportamiento mecánico y en el coste asociado. En la *Parte A: Diseño Mecánico* se mencionan los principales tipos de cabezales y se descartan los planos, dejando las opciones entre los cabezales abombados. Para seleccionarlos por presión interna se calcula el espesor de los torisféricos, los elípticos y los hemisféricos siguiendo las *Ecuaciones [9], [10] y [11]* de la *Parte A: Consideraciones Generales*. En la *Tabla 36* se muestran los resultados de los espesores obtenidos teniendo en cuenta que el material de fabricación es el mismo que el de la pared del reactor, acero inoxidable 304.

Tabla 36. Cálculo espesores mínimos de los cabezales por presión interna. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
D <sub>i</sub> (m)	1,60
P <sub>i</sub> (MPa)	0,27
S (MPa)	103,42
E	1,00
R <sub>c</sub> (m)	1,60
t <sub>torisférico</sub> (mm)	3,75
t <sub>elíptico</sub> (mm)	2,12
t <sub>hemisférico</sub> (mm)	1,06

El cabezal seleccionado es el torisférico, que como se indica en la *Parte A: Consideraciones Generales* son los recomendados para presiones inferiores a los 15 bar. A pesar de presentar el valor más elevado de espesor en comparación con los cabezales elípticos y hemisféricos, sigue siendo la opción más económica debido a su simplicidad de fabricación.

El reactor R-201 cuenta con una camisa de refrigeración, por lo tanto, el espesor se debe de verificar frente a presión interna y externa, seleccionando el valor más restrictivo. Para el cálculo por presión externo del espesor de un cabezal torisférico se emplea la ecuación [41] obtenida específicamente para rectores de tanque agitado.

$$t_p = 4,4 \cdot R_c \cdot \sqrt{\frac{(1 - \mu^2) \cdot P}{2 \cdot E_y}} \quad [41]$$

Donde:

- t<sub>p</sub>: Espesor del cabezal torisférico por presión externa (m)
- R<sub>c</sub>: Radio de la corona, se asume igual a diámetro interno (m)
- μ: Coeficiente de Poisson de material, para acero inoxidable típicamente 0,30
- P: Presión de diseño de la camisa de refrigeración (MPa)
- E<sub>y</sub>: Módulo de elasticidad del material (MPa)

El valor obtenido de espesor de cabezales, como se muestra en la Tabla 37. Cálculo espesores mínimos de los cabezales por presión externa. Fuente: Elaboración propia, es de 8,03 mm. Este valor por presión externa es mayor que frente a presión interna. Por lo tanto, es el seleccionado y se le aplica un sobre espesor de 4 mm por corrosión al igual que el espesor de pared de recipiente.

Tabla 37. Cálculo espesores mínimos de los cabezales por presión externa. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
R <sub>c</sub> (m)	1,60
μ	0,30
P (MPa)	0,55
E <sub>y</sub> (GPa)	193,00
t <sub>p</sub> (mm)	8,03
Corrosión permisible (mm)	4,00
t (mm)	12,03

Los cabezales del reactor R-201, de acero inoxidable 304, son torisféricos con un espesor de 12,03 mm. Las dimensiones del cabezal siguen la norma DIN 28011, que presenta las ecuaciones [42], [43], [44], [45], [46] y [47] para el cálculo. En la Figura 10, se muestra un esquema de las dimensiones típicas de los cabezales torisféricos.

$$r_1 = d_a \quad [42]$$

$$r_2 = 0,1 \cdot d_a \quad [43]$$

$$h_1 = 3,5 \cdot s \quad [44]$$

$$h_2 = 0,1935 \cdot d_a - 0,455 \cdot s \quad [45]$$

$$h_3 = h_1 + h_2 \quad [46]$$

$$V = 0,1 \cdot (d_a - 2 \cdot s)^3 \quad [47]$$

Donde:

- $d_a$ : Diámetro exterior del fondo
- $r_1$ : Radio de bombeado (m)
- $r_2$ : Radio de reborde (m)
- $h_1$ : Altura del borde cilíndrico (m)
- $h_2$ : Altura de bombeado (m)
- $h_3$ : Altura total del fondo interior (m)
- $s$ : Espesor de la pared
- $V$ : Volumen del cabezal ( $m^3$ )

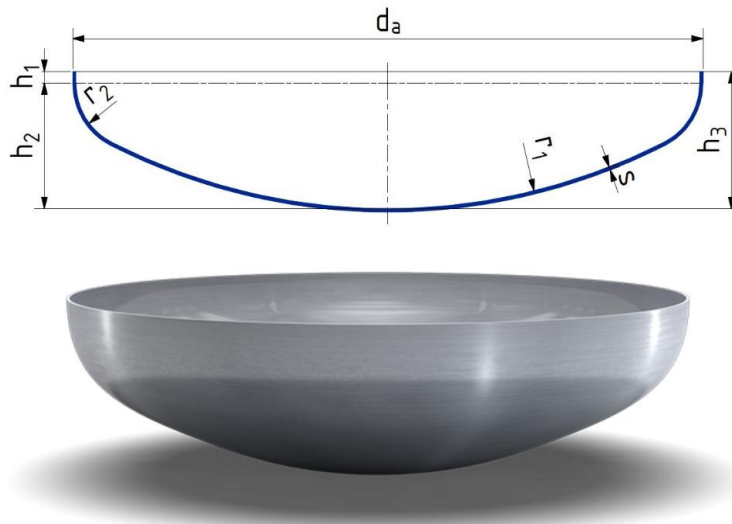


Figura 10. Esquema dimensiones cabezal torisférico. Fuente: (22)

En la Tabla 38 se muestran las dimensiones obtenidas para los cabezales del reactor R-201.

Tabla 38. Dimensiones de los cabezales torisféricos. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$r_1$ (m)	1,62
$r_2$ (m)	0,16
$h_1$ (m)	0,05
$h_2$ (m)	0,31
$h_3$ (m)	0,36
$V$ (m <sup>3</sup> )	0,40

## 11.6 Cálculo de cargas

En este apartado se analizan las cargas mecánicas que pueden afectar el equipo y comprometer su integridad estructural. Por tanto, se debe de comprobar que el diseño debe garantizar que el recipiente sea capaz de soportarlas sin riesgo de fallo o colapso.

Tal y como se detalla en la *Parte A: Consideraciones Generales*, los recipientes a presión deben dimensionarse frente a la combinación más desfavorable de acciones. En el caso del reactor R-201 las cargas principales son el propio peso del recipiente y su contenido, y la carga por viento.

La carga sísmica se descarta, ya que la planta se ubica en Tarragona, una zona clasificada como de muy baja peligrosidad, por lo que su influencia en el diseño se considera despreciable.

### 11.6.1 Cargas por peso

Las cargas por peso incluyen el propio peso del reactor R-201, el de la camisa, los fluidos contenidos y el de los componentes internos. El peso aproximado de un recipiente cilíndrico con terminaciones abombadas y espesor de pared uniforme se calcula empleando la ecuación *Ecuación [12]* de la *Parte A: Consideraciones Generales*. El factor que incluye a los internos toma un valor de 1,15 debido al sistema de agitación, además de así plantear un diseño más conservador. Los resultados correspondientes al peso del reactor vacío se muestran en la Tabla 39.

Tabla 39. Cálculo de la carga por peso de la carcasa del reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$C_w$	1,15
$\rho_m$ (kg/m <sup>3</sup> )	7.900
$D_m$ (m)	1,61
$H_v$ (m)	2,70
$t$ (mm)	19,26
$W_v$ (kN)	34,61

A continuación, se evalúa el peso de la mezcla líquida que contiene el reactor R-201 mediante la ecuación [48]. Los cálculos se pueden observar en la Tabla 40.

$$W_L = V_L \cdot \rho_L \cdot g \quad [48]$$

Donde:

- $W_L$ : Peso del líquido (N)
- $V_L$ : Volumen del líquido ( $m^3$ )
- $\rho_L$ : Densidad del líquido ( $kg/m^3$ )
- $g$ : Aceleración de la gravedad,  $9,81 m/s^2$

Tabla 40. Cálculo de la carga asociada al peso de la mezcla reaccionante del R-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$V_L (m^3)$	4,48
$\rho_L (kg/m^3)$	1.293,57
$W_L (kN)$	56,78

También es necesario evaluar el peso del sistema de refrigeración. Para determinar la carga asociada al fluido de refrigeración que circula por la camisa se emplea la ecuación [49]. Los resultados se muestran en la Tabla 41.

$$W_{cw} = m_{cw} \cdot \left( \frac{L_c}{v_{cw}} \right) \cdot g \quad [49]$$

Donde:

- $W_{cw}$ : Peso del fluido de refrigeración (N)
- $m_{cw}$ : Caudal másico de fluido refrigerante (kg/s)
- $L_c$ : Longitud total del recorrido del agua (m)
- $v_{cw}$ : Velocidad del fluido refrigerante en el interior de la camisa (m/s)

Tabla 41. Cálculo de la carga asociada al peso del fluido refrigerante de la camisa. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$m_{cw} (kg/s)$	2,36
$L_c (m)$	177,85
$v_{cw} (m/s)$	2,34
$W_{cw} (kN)$	1,76

Por último, se calcula la carga asociada al peso de la camisa de refrigeración con la ecuación [50], que se puede observar en la Tabla 42.

$$W_C = \frac{\pi \cdot d_{ci} \cdot L_c}{2} \cdot t_{camisa} \cdot \rho_m \cdot g \quad [50]$$

Donde:

- $W_C$ : Peso de la camisa de refrigeración (N)
- $d_{ci}$ : Diámetro interno del medio tubo de la camisa de refrigeración (m)
- $t_{camisa}$ : Espesor del tubo de la camisa de refrigeración (m)

Tabla 42. Cálculo de la carga asociada al peso de la camisa de refrigeración. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$d_{ci}$ (mm)	50,80
$t_{camisa}$ (mm)	3,50
$W_C$ (kN)	3,85

La carga total a la que está sometido el reactor R-201 por efecto del peso se obtiene como la suma de todas las cargas parciales, tal como se indica en la ecuación resumen [51]. Es importante destacar que no se ha considerado la carga asociada a la prueba hidráulica, ya que esta implica una densidad inferior a la de la mezcla reaccionante. Por tanto, el escenario más exigente, y para el que se calcula la carga, es el de las condiciones normales de operación.

$$W_{total} = W_v + W_L + W_{cw} + W_C \quad [51]$$

La carga total por peso tiene un valor de 97,00 kN.

### 11.6.2 Carga por viento

El reactor R-201 está dispuesto en posición vertical y se encuentra instalado en el exterior, por lo que es necesario tener en cuenta la carga asociada al viento. Esta carga puede generar esfuerzos significativos que afecten a la integridad estructural del equipo. Para poder realizar el análisis se modela el reactor como una viga en voladizo sometida a flexión, siguiendo el procedimiento descrito en la *Parte A: Consideraciones Generales*. En concreto, se emplea la *Ecuación [13]*, para el cálculo del momento de flexión, la *Ecuación [14]* para el cálculo de la presión ejercida por el viento a partir de su velocidad, y la *Ecuación [15]* y *Ecuación [17]* para obtener la carga por unidad de longitud.

Para el cálculo se tiene en cuenta una velocidad de referencia de 160 km/h (). Los datos empleados y los resultados obtenidos se detallan en la Tabla 43.

Tabla 43. Cálculo carga por viento del reactor R-201. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$u$ (km/h)	160
$P_w$ (N/m <sup>2</sup> )	1.280
$D_i$ (m)	1,60
$t_{carcasa}$ (mm)	19,26
$d_{ci}$ (mm)	50,80
$t_{camisa}$ (mm)	3,5
$D_{ef}$ (m)	1,70
$W$ (N/m)	2.171,29
$x$ (m)	3,06
$M_x$ (kN·m)	10,18

### 11.7 Análisis de esfuerzos

El reactor R-201 está sometido a una serie de esfuerzos que se determinan siguiendo la metodología descrita en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales*.

Este análisis es fundamental para verificar la integridad estructural del equipo frente a las cargas a las que se encuentra sometido, permitiendo comprobar que opera bajo condiciones seguras.

### 11.7.1 Esfuerzos primarios

Los primeros esfuerzos que se evalúan son los circunferenciales, *Ecuación [18]*, y los longitudinales, *Ecuación [19]*, generados por la presión que ejerce la camisa al reactor. Por ello el resultado son esfuerzos de compresión. Además, también se tiene en cuenta el esfuerzo directo debido a las cargas por peso mediante la *Ecuación [20]* y el esfuerzo de flexión mediante las *Ecuaciones [21]* y *[22]*. Todas las ecuaciones del *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales*. El esfuerzo por el peso del propio equipo y del fluido contenido se considera de compresión porque el reactor está apoyado sobre su base. El peso actúa hacia abajo sobre el fondo, y este lo transmite a las paredes, generando un esfuerzo axial negativo. Los resultantes valores obtenidos se muestran en la Tabla 44.

Tabla 44. Cálculos de los esfuerzos primarios. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
P (MPa)	0,55
$D_i$ (m)	1,60
$t_{\text{carcasa}}$ (mm)	19,26
$\sigma_h$ (MPa)	-22,91
$\sigma_L$ (MPa)	-11,46
$W_{\text{total}}$ (kN)	97,00
$\sigma_w$ (MPa)	-0,99
$D_0$ (m)	1,64
$I_v$ (m <sup>4</sup> )	0,03
$M_x$ (kN·m)	10,18
$\sigma_b$ (MPa)	0,26

### 11.7.2 Esfuerzos principales

Siguiendo la metodología del *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Diseño Mecánico* se calcula con la *Ecuación [23]* el esfuerzo longitudinal total. En la Tabla 45 se muestran los resultados.

Tabla 45. Cálculos de los esfuerzos longitudinales totales. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$(+\sigma_b) \sigma_z$ (MPa)	-12,19
$(-\sigma_b) \sigma_z$ (MPa)	-12,71

Los esfuerzos principales se calculan con las *Ecuaciones [24]*, *[25]* y *[26]* del *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Diseño Mecánico*. Se tiene en cuenta que el esfuerzo de cizalladura de torsión se desprecia, ya que normalmente tiene un valor muy pequeño. (). Los resultados se muestran en la Tabla 46.

Tabla 46. Cálculos de los esfuerzos principales. Fuente: Elaboración propia

	( $+\sigma_b$ )	( $-\sigma_b$ )
$\sigma_1$ (MPa)	-12,19	-12,71
$\sigma_2$ (MPa)	-22,91	-22,91
$\sigma_3$ (MPa)		-0,28

### 11.7.3 Intensidad del esfuerzo permisible

Como indica el Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales, la intensidad máxima permitida es el valor resultante mayor de evaluar las Ecuaciones [27], [28] y [29]. Los resultados se muestran en la Tabla 47. Se comprueba que el valor obtenido es menor que el del material seleccionado.

Tabla 47. Cálculo Intensidad Máxima Permitida. Fuente: Elaboración propia

	( $+\sigma_b$ )	( $-\sigma_b$ )
( $\sigma_1-\sigma_2$ ) (MPa)	10,73	10,21
( $\sigma_1-\sigma_3$ ) (MPa)	11,91	12,43
( $\sigma_2-\sigma_3$ ) (MPa)	22,64	22,64
S calculado (MPa)		22,64
S material (MPa)		103,42

### 11.7.4 Esfuerzo de compresión y estabilidad estática

El reactor R-201 está sometido a presión externa debido a la camisa de refrigeración con la que cuenta. La combinación de cargas puede inducir esfuerzos de compresión que provoquen la inestabilidad elástica o pandeo.

Se calcula la tensión crítica de pandeo y se comprueba que el valor obtenido es menor que el esfuerzo total de compresión, por lo que la columna es segura y no presenta un riesgo de fallo por estabilidad elástica. El esfuerzo total de compresión es la suma de todos los esfuerzos de compresión, que para este caso son el circunferencial, longitudinal, debido al peso y el de flexión. Como se puede observar en la Tabla 48 el esfuerzo crítico es mayor que el generado por compresión, por lo que se cumple la estabilidad estática y no hay riesgo por pandeo.

Tabla 48. Cálculo esfuerzo crítico, esfuerzo por compresión y estabilidad estática.

Parámetro	Valor
$\sigma_{\text{crítico}}$ (MPa)	-235,08
$\sigma_{\text{compresión}}$ (MPa)	-35,36

## 11.8 Soportes

La selección del soporte para el reactor R-201 se basa en su geometría y condiciones de operación. Se trata de un recipiente vertical con una relación de altura y diámetro que no lo clasifica como esbelto, pero que teniendo en cuenta el volumen y peso del reactor justifica el uso de un soporte

tipo falda. En el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales* se explican los tres tipos de soportes más utilizados y sus características y utilidades principales.

El soporte más típico para un reactor de tanque agitado con camisa de refrigeración es la falda, por su capacidad para soportar grandes cargas, la compatibilidad con la camisa y su fácil mantenimiento. Dentro de los tipos de soportes de tipo falda, se selecciona el de falda recta, por ser el más habitual.

Para comprobar que el soporte resiste las cargas por peso y los momentos provocados por el reactor R-201, se calculan los esfuerzos por tensión y compresión con las *Ecuaciones [30] y [31]*, a partir de las *Ecuaciones [32] y [33]* del *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales*.

Los valores obtenidos se muestran en la

Tabla 49, donde se puede observar que los valores de obtenidos de tensión y compresivo son mayores que las limitaciones de las *Ecuaciones [34] y [35]*. Por lo tanto, el espesor de falda seleccionado que es el mínimo es suficiente para para verificar los criterios de diseño.

Tabla 49. Cálculos soportes. Fuente: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$M_s$ (kN·m)	37,50
$D_s$ (m)	1,70
$t_{sk}$ (mm)	6
$\sigma_{bs}$ (MPa)	0,75
$W_v$ (kN)	97,00
$\sigma_{ws}$ (MPa)	3,02
$\sigma_s$ (MPa) (Tensión)	-2,27
$\sigma_s$ (MPa) (Compresivo)	3,77
$S_s$ (MPa)	103,42
E	0,85
$\Theta_s$ (°)	90,00
$S_s \cdot E \cdot \text{sen}(\Theta_s)$ (MPa)	87,91
$E_Y$ (GPa)	193
$0,125 \cdot E_Y \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) \cdot \text{sen}(\Theta_s)$ (MPa)	85,33

## 11.9 Aberturas y conexiones

Como se explica en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales* los equipos cuentan con aberturas y conexiones para la entrada, salida de reactivos, sistema de limpieza, instrumentación y conexiones auxiliares. En el caso del reactor R-201 se cuenta con dos aberturas en la parte superior para la entrada de las dos corrientes de reactivos líquidos y una en la parte inferior para la salida del producto. La ubicación y diseño de las boquillas de entrada y

salida se basan en el tipo de proceso, de la naturaleza de la alimentación y de la sensibilidad del sistema a la tasa de dispersión de la alimentación.

La alimentación se introduce por la parte superior. La introducción debe ser hacia una superficie activa alejada de las paredes del tanque y del eje del impulsor, para favorecer una buena distribución. Las boquillas de entrada deben estar dimensionadas para prevenir la recirculación del contenido del tanque hacia la tubería de entrada, lo que podría provocar una mezcla deficiente y afectar negativamente al rendimiento del proceso.

La salida se suele ubicar de forma general en la parte inferior lateral del fondo torisférico, sobre todo cuando el recipiente necesita ser drenado completamente. Además, en tanques agitados continuos, la salida se ubica lo más alejada de la entrada para minimizar el cortocircuito de la alimentación.

También, siguiendo la normativa ASME BPV Sección VIII División I, se debe de tener en cuenta la ubicación de una boca de hombre para permitir el acceso al interior del equipo para tareas de inspección, mantenimiento y limpieza, ya que el recipiente supera las 36 pulgadas de diámetro interno.

Por último, mencionar la necesidad de boquillas para sensores, relacionadas con el control operativo y una conexión para válvula de seguridad PSV que se diseña a continuación.

### 11.10 Diseño de válvula de alivio

Para evitar cualquier accidente, como medida de seguridad se instala una válvula de alivio de presión en el reactor R-201 como la mostrada en la Figura 11. El diseño y dimensionamiento seguido se explica en el *Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A: Consideraciones Generales*, de acuerdo con la normativa estándar *API RP 520 Sizing, Selection, and Installation of Pressure-Relieving Devices in Refineries Part I*, de acuerdo con el Código ASME BPV Sección VIII.

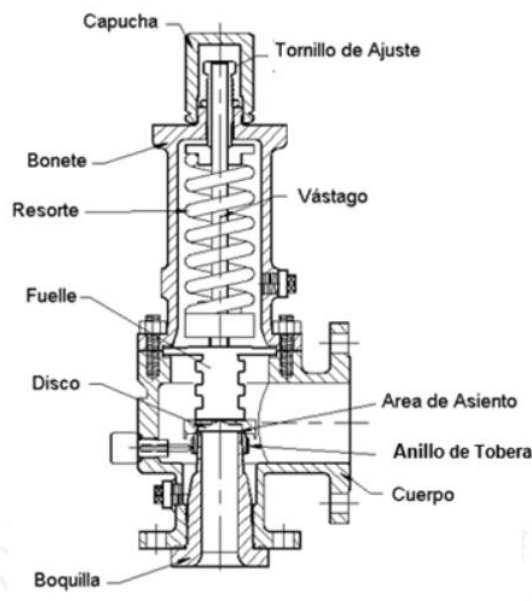


Figura 11. Válvula de seguridad de alivio balanceada.

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 50.

Tabla 50. Cálculos diseño de la válvula de alivio. Fuente: Elaboración propia

Parámetros	Valor
Relación contrapresión (%)	0
$K_w$	1
$K_c$	1
$K_v$	1
$K_d$	0,65
$P_{\text{disparo}}$ (kPa)	1172,37
Sobrepresión (%)	10
$P_1$ (kPa)	301,09
$P_2$ (kPa)	101,33
$Q$ (L/min)	56,71
$G$	1,30
Área mínima efectiva necesaria (mm <sup>2</sup> )	83
Área mínima efectiva válvula	126
$\mu$ (cP)	26,45
$Re$	6205,21
$K_{v, \text{recalculado}}$	0,97
$K_{d, \text{actual}}$	0,58
Área real de descarga necesaria (mm <sup>2</sup> )	96
Área real de descarga válvula (mm <sup>2</sup> )	126

## 12 Hoja de especificaciones

Planta de producción de detergente tipo LABS		<b>HOJA DE ESPECIFICACIONES DEL REACTOR R-201</b>	
		<b>TAG EQUIPO</b>	R-201
		<b>SECCIÓN</b>	200
<b>DATOS GENERALES</b>			
<b>DENOMINACIÓN EQUIPO</b>		Reactor continuo de tanque agitado	
<b>FUNCIÓN</b>		Hacer reaccionar dodecibenceno con óleum (22%) para obtener ácido dodecibencensulfónico	
<b>DATOS DE OPERACIÓN</b>			
<b>REACTIVOS</b>		Dodecibenceno y óleum (22%)	
<b>PRODUCTO</b>		Ácido dodecibencensulfónico	
<b>MODO DE OPERACIÓN</b>		Isotérmico	
<b>TEMPERATURA DE OPERACIÓN (°C)</b>		40	
<b>FRACCIÓN DE VAPOR</b>		0	
<b>DENSIDAD (kg/m<sup>3</sup>)</b>		1294	
<b>VISCOSIDAD (cP)</b>		26,45	
<b>PRESIÓN DE OPERACIÓN (bar)</b>		1,01	
<b>FLUJO MÁSIICO (kg/h)</b>		4217	
<b>DATOS DE DISEÑO</b>			
<b>TEMPERATURA DE DISEÑO (°C)</b>		68	
<b>PRESIÓN DE DISEÑO (bar)</b>		5,5	
<b>ORIENTACIÓN</b>		Vertical	
<b>MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN</b>		Acero Inoxidable 304	
<b>NORMA DE DISEÑO</b>		Código ASME BPV S.VIII Div. 1	
<b>CABEZALES</b>		Torisféricos	
<b>SOPORTE</b>		Falda	
<b>AGITADOR</b>			
<b>NÚMERO DE BOMBEO</b>		0,79	
<b>NÚMERO DE POTENCIA</b>		1,27	
<b>POTENCIA (kW)</b>		0,61	
<b>CARCASA</b>			
<b>VOLUMEN (m<sup>3</sup>)</b>		6,73	
<b>DIÁMETRO (m)</b>		1,60	
<b>LONGITUD (m)</b>		3,02	
<b>ESPESOR (mm)</b>		19,26	
<b>CAMISA</b>			
<b>MATERIAL</b>		Acero Inoxidable 304	
<b>FLUIDO REFRIGERANTE</b>		Agua de refrigeración	
<b>ESPESOR (mm)</b>		3,5	
<b>ACCESORIOS INTERNOS</b>			
Agitador		Turbina de placas inclinadas 45°	
Deflectores (número)		4	
Colector de salida		Válvula de alivio	

## 13 Bibliografía

1. FOSTER, Norman C. *Sulfonation and Sulfation Processes Online*. 1997. Disponible en: [www.chemithon.com](http://www.chemithon.com)
2. DE GROOT, W. Herman. *Sulphonation Technology in the Detergent Industry*. Dordrecht: Springer Netherlands, 1991.
3. AMOUS, Jamal M. *Kinetic study on dodecylbenzene sulfonation in a mixed batch reactor*. Chemical and Materials Engineering. En línea. Vol. 4 (2016), no. 3, pp. 33–38. DOI: 10.13189/cme.2016.040301. Disponible en: [https://www.researchgate.net/publication/346201794\\_Kinetic\\_Study\\_on\\_Dodecylbenzene\\_Sulfonation\\_in\\_a\\_Mixed\\_Batch\\_Reactor](https://www.researchgate.net/publication/346201794_Kinetic_Study_on_Dodecylbenzene_Sulfonation_in_a_Mixed_Batch_Reactor) [Consulta: 10-02-2025]
4. MORENO, A., BENGOCHEA, J., BRAVO, J. y BERNA, J.L. *A Contribution to Understanding Secondary Reactions in Linear Alkylbenzene Sulfonation*. Journal of Surfactants and Detergents. En línea. Vol. 6 (2003). Disponible en: <https://aocs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1007/s11743-003-0257-2> [Consulta: 10-02-2025]
5. SINNOTT, Ray, TOWLER, Gavin y COSTA LÓPEZ, José. *Diseño en ingeniería química*. 1.<sup>a</sup> ed. Barcelona: Reverté, 2012. ISBN 84-291-9504-1.
6. FOGLER, H. Scott. *Essentials of chemical reaction engineering*. 2.<sup>a</sup> ed. Upper Saddle River, NJ: Pearson Education, 2018.
7. PAUL, Edward L., ATIEMO-OBENG, Victor A. y KRESTA, Suzanne M. *Handbook on industrial mixing: science and practice*. Hoboken, NJ: Wiley-Interscience, 2004. ISBN 0471269190.
8. FORTEQUIM. *Ficha de datos de seguridad del LABSA*. En línea. Disponible en: <https://www.fortequim.com.mx> [Consulta: 20-02-2025]
9. AMIN, Mohamed. *Temperature dependence of viscosity of some crude oils and pure liquids*. Tesis doctoral. Oklahoma: Oklahoma State University, 1979.
10. VISWANATH, D. S. *Viscosity of liquids: theory, estimation, experiment, and data*. Dordrecht: Springer, 2007. ISBN 9781402054822.
11. SINNOTT, Ray y TOWLER, Gavin. *Design information and data*. En: SINNOTT, Ray y TOWLER, Gavin. *Chemical engineering design*, pp. 399–450. Oxford: Elsevier, 2020. ISBN 9780081025994.
12. TOWLER, Gavin, SINNOTT, Ray, BOSTON, Amsterdam, HEIDELBERG, London, SAN, Paris, SAN DIEGO, SINGAPORE, Francisco y TOKYO, Sydney. *Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design*. En línea. Oxford: Elsevier, 2008. Disponible en: <http://elsevier.com> [Consulta: 02-03-2025]
13. FLUID ENGINEERING, Fusion EQ. *Impeller diameter scale*. En línea. [sin fecha]. Disponible en: [https://fusion-express.com/impellers/pitch-blade-turbine/pitch-blade-turbine-6?srsId=AfmBOopO8CCXOOak\\_3t8SvrlnaYn4P4kPFSsNrw1ndnpJlNo3nlyCXEZ](https://fusion-express.com/impellers/pitch-blade-turbine/pitch-blade-turbine-6?srsId=AfmBOopO8CCXOOak_3t8SvrlnaYn4P4kPFSsNrw1ndnpJlNo3nlyCXEZ) [Consulta: 16-05-2025]
14. WALAS, Stanley M. *Chemical process equipment: selection and design*. Boston: Butterworth-Heinemann, 1990. ISBN 075069264X.

15. AMERICAN ALLOY FABRICATORS. *Jacketed vessels: what you need to know*. En línea. 9 mayo 2022. Disponible en: <https://americanalloyfab.com/blog/jacketed-vessels-what-you-need-to-know/> [Consulta: 02-03-2025]
16. CENTRAL FABRICATORS. *Conventional jackets for tanks & vessels*. En línea. [sin fecha]. Disponible en: <https://centralfabricators.com/conventional-jackets/> [Consulta: 12-03-2025]
17. TURTON, R., BAILIE, R.C., WHITING, W.B. y SHAEIWITZ, J.A. *Analysis, synthesis and design of chemical processes*. 4.<sup>a</sup> ed. Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2013.
18. R-V INDUSTRIES INC. *Pressure vessels: jacket selection and surface enhancement*. En línea. [sin fecha]. Disponible en: <https://cdn.thomasnet.com/ccp/00145878/292146.pdf> [Consulta: 02-04-2025]
19. WIDARTI, Politeknik y BANDUNG, Negeri. *Correlation of steam velocity and pipe diameter with heat transfer performance on 120° half-pipe jacket*. En línea. DOI: 10.35313/fluida.v16isp1.2023. [Consulta: 02-04-2025]
20. COULSON y RICHARDSON. *Chemical engineering design*. 4.<sup>a</sup> ed. Oxford: Elsevier, 2005. ISBN 0750665386.
21. INCROPERA, Frank. *Transferencia de calor*. 4.<sup>a</sup> ed. México: McGraw-Hill, [sin fecha].
22. SLAWINSKI. *Fondo torisférico conforme a DIN 28011*. En línea. [Consulta: 17-04-2025]. Disponible en: <https://www.slawinski.es/cms/upload/downloads/Slawinski-Datasheet-EN.pdf>

ANEXO III.  
ANÁLISIS DE  
VIABILIDAD  
ECONÓMICA

## Índice

1	Introducción.....	2
2	Inversión inicial.....	2
3	Financiación .....	2
3.1	Préstamo para la puesta en marcha .....	2
4	Costes de producción.....	3
4.1	Costes de fabricación .....	3
4.1.1	Materias primas principales.....	4
4.1.2	Recursos consumibles .....	4
4.1.3	Costes de distribución y envasado de los productos.....	4
4.1.4	Coste de utilidades.....	5
4.1.5	Coste de mano de obra .....	5
4.2	Gastos generales corporativos .....	6
4.2.1	Costos de investigación y desarrollo .....	6
4.2.2	Costos de venta y marketing.....	6
4.2.3	Costos generales y administrativos .....	6
5	Amortización .....	6
6	Ingresos por ventas .....	7
7	Flujos de caja.....	7
8	Evaluación de la rentabilidad .....	10
8.1	Valor Actual Neto (VAN).....	10
8.2	Tasa Interna de Retorno (TIR).....	10
8.3	Período de retorno o Payback .....	10
9	Análisis de sensibilidad .....	11
9.1	Variación en el precio de las materias primas.....	11
9.2	Ingresos por ventas del producto principal .....	12
10	Conclusión.....	12
11	Bibliografía.....	13

## 1 Introducción

En el presente anexo se llevará a cabo el estudio de viabilidad económica de la planta de producción de detergente tipo LABS. Esta evaluación económica requiere de un análisis de rentabilidad, puesto que para poder llevar a cabo un proyecto industrial se necesita que sea viable económicamente.

Para la evaluación económica del proyecto se tendrán en cuenta algunos indicadores de rentabilidad, como el Valor Actual Neto (VAN) y la Tasa Interna de Retorno (TIR). Asimismo, se estudiará el tiempo necesario para recuperar la inversión inicial, a través del Payback. Por otra parte, se realizará un análisis de sensibilidad de las variables más significantes en la inversión, como puede ser el coste de las materias primas o el precio de venta de los productos.

## 2 Inversión inicial

La inversión inicial de un proyecto es la cantidad de capital necesario para hacerlo viable, incluyendo todas las etapas desde la planificación hasta la puesta en marcha. Dicha inversión incluye los costes de capital fijo y el capital circulante. En el *Documento V. Presupuesto* se calcula la inversión inicial, obteniendo un valor de 40.687.454,48€.

## 3 Financiación

La financiación de un proyecto es un paso fundamental en la construcción y operación de una planta química, ya que las empresas no solo se financian con capital propio, al requerir de grandes inversiones de capital. Por esta razón, las empresas buscan un financiamiento adecuado mediante la elaboración de análisis económicos que permitan a los accionistas, prestamistas y otros interesados evaluar la situación financiera del proyecto.

### 3.1 Préstamo para la puesta en marcha

El método principal de financiación para la puesta en marcha de un proyecto consiste en la sollicitación de préstamos, por lo que la empresa hace pagos regulares de intereses. Se considera como préstamo inicial que el banco cubrirá el 60% del capital total inicial. Estos pagos se consideran costos fijos del proyecto y se emplea el promedio ponderado entre el costo de la deuda y el costo del capital propio mediante la ecuación [1]. (1)

$$A (\text{Cuota anual}) = C_0 \cdot \frac{i \cdot (1 + i)^n}{(1 + i)^n - 1} \quad [1]$$

Donde:

- A es la cuantía anual equivalente, €.
- $C_0$  es la cuantía total del préstamo original, €.
- $i$  es la tasa de interés anual fijo.
- $n$  período de devolución del préstamo, años.

En este tipo de proyectos, el tiempo que suele operar una planta suele estar en el rango de 10 a 20 años, siendo entre 1-3 años el tiempo inicial que requiere el proyecto para pasar de las fases iniciales. Se tomarán 20 años como vida útil de la planta y un interés fijo  $i$  de 7,928 %, según valores actuales publicados por el Instituto de Crédito Oficial, ICO. (2)

Por otra parte, se emplea el método francés para realizar un análisis de la devolución del préstamo, obteniendo el interés total de cada año,  $I_n$ , y el capital del año  $n$ ,  $C_n$ , empleando las ecuaciones [2] y [3], donde  $C_{n-1}$  es el capital del año anterior.

$$C_n = A - I_n \quad [2]$$

$$I_n = C_{n-1} \cdot i \quad [3]$$

Se muestra en la Tabla 1 la evolución del préstamo en los 20 años de vida útil del proyecto.

Tabla 1. Evolución del préstamo empleando el método francés. Fuente: Elaboración propia.

<b>Financiación de la inversión inicial</b>				
<b>Año</b>	<b>Intereses</b>	<b>Amortización</b>	<b>Anualidad</b>	<b>Capital vivo</b>
0			2.473.157 €	24.412.473 €
1	1.935.420,83 €	537.736 €	2.473.157 €	23.874.737 €
2	1.892.789,13 €	580.368 €	2.473.157 €	23.294.369 €
3	1.846.777,58 €	626.379 €	2.473.157 €	22.667.990 €
4	1.797.118,24 €	676.039 €	2.473.157 €	21.991.951 €
5	1.743.521,91 €	729.635 €	2.473.157 €	21.262.317 €
6	1.685.676,45 €	787.480 €	2.473.157 €	20.474.836 €
7	1.623.245,01 €	849.912 €	2.473.157 €	19.624.924 €
8	1.555.864,01 €	917.293 €	2.473.157 €	18.707.632 €
9	1.483.141,04 €	990.016 €	2.473.157 €	17.717.616 €
10	1.404.652,59 €	1.068.504 €	2.473.157 €	16.649.112 €
11	1.319.941,58 €	1.153.215 €	2.473.157 €	15.495.897 €
12	1.228.514,68 €	1.244.642 €	2.473.157 €	14.251.255 €
13	1.129.839,46 €	1.343.317 €	2.473.157 €	12.907.937 €
14	1.023.341,26 €	1.449.816 €	2.473.157 €	11.458.122 €
15	908.399,89 €	1.564.757 €	2.473.157 €	9.893.365 €
16	784.345,96 €	1.688.811 €	2.473.157 €	8.204.554 €
17	650.457,04 €	1.822.700 €	2.473.157 €	6.381.854 €
18	505.953,40 €	1.967.203 €	2.473.157 €	4.414.651 €
19	349.993,52 €	2.123.163 €	2.473.157 €	2.291.488 €
20	181.669,14 €	2.291.488 €	2.473.157 €	0 €

## 4 Costes de producción

Los diferentes costes que supone la operación habitual de una planta se diferencian según distintos criterios. La manera más habitual de diferenciarlos consiste en clasificarlos según costes de fabricación o explotación, y costes generales o de gestión. Asimismo, los costes se pueden clasificar según sean costes variables, que dependen de la producción, o fijos, que no dependen de la producción. (3)

### 4.1 Costes de fabricación

El coste de fabricación, o explotación, consiste en el capital necesario para que una planta empiece a funcionar. Este capital incluye habitualmente los costes directamente relacionados con la actividad principal de la empresa. (4)

#### 4.1.1 Materias primas principales

El capital necesario para la obtención de materias primas es un coste variable, puesto que el valor de mercado está sujeto a variaciones. El coste de las materias primas necesarias en el proceso se obtuvo en el *Documento I. Memoria*, y se muestra en la Tabla 2 el resumen de los datos necesarios.

Tabla 2. Precios de mercado de materias primas. Fuente: Elaboración propia.

Materia prima	Flujo másico (kg/h)	Coste anual (€/año)
Benceno	536,41	4.602.681,02
Dodeceno	1.156,2	12.004.963,3
Óleum 22%	2.524,19	7.996.633,92
NaOH 20%	1.830,29	28.266.998,8
H <sub>2</sub> O	5.998,79	143.322,821
Dietanolamina de coco	1.136,36	12.599.959,7
Pirofosfato de tetrapotasio	2.272,72	25.560.030,7
Tolueno sulfonato de potasio	1.136,36	1.576.794,95
Metasilicato de sodio	490,91	1.508.224,02

#### 4.1.2 Recursos consumibles

Los consumibles son recursos que se emplean continuamente en un proceso químico y que se agotan, degradan o deben reemplazarse. Suelen suponer una mínima parte del coste de operación, pero ciertos catalizadores pueden adquirir altos precios. Por tanto, en los reactores R-101 A/B del presente proyecto se obtiene la cantidad de catalizador total, según se especifica en el *Anexo II. Cálculos justificativos*. Asimismo, se obtiene el precio del catalizador en el *Documento I. Memoria* y se muestra en la Tabla 3 un resumen de los datos obtenidos. (4)

Tabla 3. Precio de mercado del catalizador. Fuente: Elaboración propia.

Materia prima	Cantidad total (kg)	Coste anual (€/año)
Catalizador	5.596,92	1.949,83

#### 4.1.3 Costes de distribución y envasado de los productos

Siendo el objetivo de la presente planta la producción de detergente líquido se debe tener en cuenta el coste que implica el correcto envasado y etiquetado del producto final. Se obtiene el precio de los envases por parte del proveedor Shenzhen Yunbo Hardware And Plastic Co., Ltd, en el cual se determina un precio de 0,55USD por envase de dos litros. En la Tabla 4 se muestra el coste que supone el envasado del producto final. (5)

Tabla 4. Precios de envasado. Fuente: (5)

Parámetro	Valor
Envase (E)	0,477
Cantidad (l/año)	100.000.000
Cantidad de envases	50.000.000
Coste total (€)	23.871.527,78

#### 4.1.4 Coste de utilidades

En una planta química se definen como utilidades a aquellas corrientes necesarias para el funcionamiento de los equipos, pero que no están directamente implicadas en las reacciones ni transformación del producto. Por tanto, se identifican como utilidades el combustible, el vapor de proceso, el agua de enfriamiento, la electricidad etc. El capital destinado a cubrir estos servicios representa una parte significativa de los costos operativos, y se clasifica como un costo variable. (4)

Normalmente se asume el coste de las utilidades como un 10% de los costes de producción variables, que suponen el capital destinado a la obtención de materias primas, los recursos consumibles y el envasado y distribución del producto final. (4)

Tabla 5. Coste de utilidades. Fuente: Elaboración propia.

	Parámetro	Importe (€)
Costes variables sin utilidades	$C_{var-u}$	118.133.313,74 €
Coste utilidades	$0,10 \cdot C_{var-u}$	11.813.331,37 €

#### 4.1.5 Coste de mano de obra

El coste destinado a los salarios tanto de operarios como supervisores se considera un costo fijo, y se opera habitualmente mediante un sistema de turnos rotativos. El salario de los operarios varía en función del tipo de puesto y de la región, siendo en España un promedio en la industria química de 21.912,00€ (6)

$$N_{OL} = (6,29 + 31,7 \cdot P^2 + 0,23 \cdot N_{NP})^{0,5} \quad [4]$$

Donde:

- $N_{OL}$ : Número de operarios por turno
- $P$ : Número de equipos que trabajan con sólidos
- $N_{np}$ : Número de equipos que no trabajan con partículas sólidas que incluyen compresión, calentamiento, enfriamiento, mezclado, y reacción.

El valor de  $N_{OL}$  es el número de operarios requeridos para operar la planta por turno. Un operario trabaja de media 49 semanas al año, con 5 turnos por semana, de 8 horas por turno. Esto implica que cada trabajador realiza 245 turnos al año. La planta necesita trabajadores los 365 días al año, las 24 horas del día, si durante cada día hay 3 turnos, esto implica 1095 turnos al año. Si cada trabajador realiza 245 turnos, se necesitan 4,5 trabajadores por puesto para cubrir los 1095 turnos

al año. Finalmente, se multiplica el número de operarios por turno por el número de operarios por puesto, obteniendo un total de 15 operarios en planta. (7)

Por otra parte, los costes de mano de obra indirectos se relacionan con el capital empleado en personal que no está directamente relacionado con las tareas productivas, lo que representa entre un 15-30% de la mano de obra directa. (8)

Empleando el sueldo medio en España para industria química, se obtiene que el coste total por mano de obra directa es de 328.680,00 €. Aplicando un 15% a este coste, se obtiene que el coste por mano de obra indirecta es de 49.302,00 €.

## 4.2 Gastos generales corporativos

Por otra parte, los gastos generales o costes de gestión abarcan las actividades que no están directamente vinculadas a la producción, incluyendo servicios administrativos, recursos humanos, gastos en investigación y desarrollo, entre otros. (3)

### 4.2.1 Costos de investigación y desarrollo

Los costos de investigación y desarrollo abarcan actividades relacionadas con el desarrollo de nuevos productos y mejoras de los productos ya existentes. Su costo varía según el sector, asumiendo un valor de 1% del coste total de explotación. (4)

### 4.2.2 Costos de venta y marketing

En esta sección se incluyen los gastos implicados en ventas, publicidad, estudios de mercado y el desarrollo de la marca, que suelen tomar un valor de entre un 5-20% del coste de fabricación. En el presente diseño se asumen como un 10% del costo total de fabricación. (3)

### 4.2.3 Costos generales y administrativos

Estos gastos incluyen los pertinentes a la gestión corporativa; administración, recursos humanos, finanzas, compras, salud y seguridad, entre otros. Estos costos se pueden expresar en función del coste de fabricación, y se encuentran normalmente entre un 3 y 6% del mismo. En este diseño se tomará un valor de un 6% como estimación inicial. (8)

## 5 Amortización

Se define como amortización al proceso contable por el cual se reparte el costo de un activo fijo a lo largo de su vida útil, reflejando la pérdida de valor que experimenta a lo largo del tiempo. Se distinguen por tanto dos conceptos fundamentales; la vida útil, que es el tiempo estimado por el cual el bien se puede utilizar, y el valor residual, que consiste en el valor estimado que obtendrá la empresa en caso de venderlo al final de su vida útil. (9)

Existen diversas maneras de determinar la amortización en un análisis económico, sin embargo, se opta por el método de amortización lineal, por el que se distribuye el valor del activo en partes iguales durante todos los años de su vida útil. Para ello, se emplea la ecuación [5], que excluye el coste de la parcela, ya que esta se considera como parte de la inversión inicial, por lo cual no será amortizada. (4)

$$\text{Amortización} = \frac{C_{\text{adquisición}}}{n} = \frac{\text{Costes fijos} - \text{Coste parcela}}{\text{Vida útil de la planta}} \quad [5]$$

Donde:

- $C_{adquisición}$ : Coste total a amortizar, €.
- n: Vida útil de la planta, años

Se presenta en la Tabla 6 el resultado de la amortización anual de los bienes adquiridos.

Tabla 6. Obtención de la cuota anual del amortizado. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
Costes del inmovilizado (€)	35.380.395,20
Años de vida media	20
Coste parcela (€)	15.635.687
Amortización (€/año)	987.235,41

## 6 Ingresos por ventas

Las ventas principales del presente proyecto las constituyen el producto principal y la corriente residual proveniente del decantador. Una vez elaborado el estudio de mercado, presente en el Documento I. Memoria, se establece un precio de venta adecuado y se obtiene el beneficio anual proveniente de las ventas. Se muestra el resumen de los cálculos en la Tabla 7.

Tabla 7. Resultados de la obtención de ingresos por ventas. Fuente: Elaboración propia.

Producto	Cantidad producida (t/año)	Precio (€/t)	Beneficio (€/año)
Detergente	120.000,00	1.333,33	160.000.000 €
Ácido sulfúrico (92,4%)	16.800,94	138,00	2.318.528,84 €
<b>Ingresos por ventas anuales (€/año)</b>			
			162.318.528,84

## 7 Flujos de caja

Durante un proyecto, los flujos de caja reflejan el movimiento de dinero que entra y sale de la empresa en cada etapa. En las fases iniciales, el flujo de caja es negativo, ya que se incluyen los gastos de diseño, adquisición de equipos, construcción de planta y puesta en marcha. Sin embargo, una vez la planta empieza a operar, comienzan a generarse ingresos por la venta del producto, lo que produce flujos de caja positivos. (3)

Se define el flujo de caja neto en cualquier momento del proyecto como la diferencia entre los ingresos y los gastos, y se emplea para el análisis de rentabilidad de los proyectos. Sin embargo, este valor está sujeto a variaciones del precio tanto en los gastos como en los ingresos y, por tanto, se debe emplear un factor que tenga en cuenta la inflación,  $i$ . Para ello, se considera el IPC vigente en España, que se encuentra en un 1,9% en mayo de 2025. (10)

Se emplea la ecuación [6], que tiene en cuenta la inflación al calcular el valor en el año  $n$ .

$$C_n = C_i \cdot (1 + i)^n \quad [6]$$

Donde:

- $C_n$ : Capital en el año n
- $C_i$ : Capital inicial
- n: Vida útil del proyecto
- i: Tasa de inflación anual.

A continuación, se debe calcular el beneficio bruto de cada año, en el que influyen positivamente los ingresos y se descuentan los costes de producción, de amortización y de deuda, según la ecuación [7]. (4)

$$\text{Beneficio bruto} = \text{Ingresos} - \text{Costes} \quad [7]$$

Por otra parte, tanto las personas como las empresas deben pagar una serie de impuestos, que vienen determinados por la ley, por lo que es necesario calcular el beneficio del flujo de caja una vez descontados los impuestos, I. En España, se establecen los impuestos para actividades económicas desarrolladas por personas jurídicas en un 25%, según la Ley 27/2014 del 27 de noviembre, del Impuesto sobre sociedades. Por tanto, se emplea la ecuación [8] para obtener el beneficio neto después de impuestos. Dicho valor se calcula empleando la ecuación [9]. (11)

$$\text{Beneficio neto} = \text{Beneficio bruto} - \text{Impuestos} \quad [8]$$

$$\text{Impuestos} = \text{Beneficio bruto} \cdot I \quad [9]$$

Una vez determinados todos los parámetros que influyen en las entradas y salidas de dinero de un proyecto, se pueden determinar los flujos de caja de cada año,  $F_t$ , que se obtienen según la ecuación [10].

$$F_t = \text{Beneficio neto} + \text{Amortización} \quad [10]$$

A continuación, se obtienen los flujos de caja acumulados,  $F_{ta}$ , empleando la ecuación [11].

$$F_{ta} = \sum_{t=1}^n F_t - I_0 \quad [11]$$

Donde:

- t: Número de periodos de tiempo.
- $I_0$ : Inversión inicial en el momento inicial  $t=0$ .

Finalmente, se muestra en la Tabla 8 los flujos de caja obtenidos durante la vida útil del proyecto.

Tabla 8. Flujos de caja del proyecto durante su vida útil. Fuente: Elaboración propia.

Flujos de caja									
Año	Ingresos por ventas actualizado	Costes anuales actualizados	Intereses	Amortización	Beneficio Bruto	Impuestos	Beneficio Neto	CFn	Cfa
0								-24.412.472,69	-24.412.472,69
1	165.402.580,88	155.376.930,19	1.935.420,83	987.235,41	7.102.994,45	1.775.748,61	5.327.245,84	6.314.481,25	-18.097.991,44
2	168.545.229,92	158.329.091,86	1.892.789,13	987.235,41	7.336.113,52	1.834.028,38	5.502.085,14	6.489.320,55	-11.608.670,89
3	171.747.589,29	161.337.344,61	1.846.777,58	987.235,41	7.576.231,69	1.894.057,92	5.682.173,77	6.669.409,18	-4.939.261,71
4	175.010.793,49	164.402.754,15	1.797.118,24	987.235,41	7.823.685,68	1.955.921,42	5.867.764,26	6.854.999,67	1.915.737,96
5	178.335.998,56	167.526.406,48	1.743.521,91	987.235,41	8.078.834,76	2.019.708,69	6.059.126,07	7.046.361,48	8.962.099,45
6	181.724.382,54	170.709.408,20	1.685.676,45	987.235,41	8.342.062,47	2.085.515,62	6.256.546,85	7.243.782,26	16.205.881,71
7	185.177.145,80	173.952.886,96	1.623.245,01	987.235,41	8.613.778,42	2.153.444,60	6.460.333,81	7.447.569,22	23.653.450,93
8	188.695.511,57	177.257.991,81	1.555.864,01	987.235,41	8.894.420,34	2.223.605,09	6.670.815,26	7.658.050,67	31.311.501,60
9	192.280.726,29	180.625.893,66	1.483.141,04	987.235,41	9.184.456,19	2.296.114,05	6.888.342,14	7.875.577,55	39.187.079,15
10	195.934.060,09	184.057.785,64	1.404.652,59	987.235,41	9.484.386,45	2.371.096,61	7.113.289,84	8.100.525,25	47.287.604,40
11	199.656.807,24	187.554.883,56	1.319.941,58	987.235,41	9.794.746,68	2.448.686,67	7.346.060,01	8.333.295,42	55.620.899,81
12	203.450.286,57	191.118.426,35	1.228.514,68	987.235,41	10.116.110,13	2.529.027,53	7.587.082,60	8.574.318,01	64.195.217,82
13	207.315.842,02	194.749.676,45	1.129.839,46	987.235,41	10.449.090,70	2.612.272,67	7.836.818,02	8.824.053,43	73.019.271,26
14	211.254.843,02	198.449.920,30	1.023.341,26	987.235,41	10.794.346,04	2.698.586,51	8.095.759,53	9.082.994,94	82.102.266,20
15	215.268.685,03	202.220.468,79	908.399,89	987.235,41	11.152.580,95	2.788.145,24	8.364.435,71	9.351.671,12	91.453.937,32
16	219.358.790,05	206.062.657,70	784.345,96	987.235,41	11.524.550,98	2.881.137,75	8.643.413,24	9.630.648,65	101.084.585,96
17	223.526.607,06	209.977.848,19	650.457,04	987.235,41	11.911.066,42	2.977.766,60	8.933.299,81	9.920.535,22	111.005.121,18
18	227.773.612,59	213.967.427,31	505.953,40	987.235,41	12.312.996,47	3.078.249,12	9.234.747,35	10.221.982,76	121.227.103,95
19	232.101.311,23	218.032.808,43	349.993,52	987.235,41	12.731.273,87	3.182.818,47	9.548.455,40	10.535.690,81	131.762.794,76
20	236.511.236,15	222.175.431,79	181.669,14	987.235,41	13.166.899,81	3.291.724,95	9.875.174,86	10.862.410,27	142.625.205,03

## 8 Evaluación de la rentabilidad

Existen diversos métodos para analizar la rentabilidad de la inversión económica de los proyectos. Por tanto, en el presente proyecto se llevará a cabo la evaluación económica empleando tres conceptos fundamentales, el Valor Actual Neto (VAN), la Tasa Interna de Retorno (TIR) y el período de recuperación, o *Payback*.

### 8.1 Valor Actual Neto (VAN)

El Valor Actual Neto de un proyecto es una medida de la rentabilidad de una inversión, e indica lo que se va a ganar o perder con dicha inversión. Se obtiene calculando el valor actual de todos los ingresos y gastos futuros, de manera que, si el resultado de emplear la ecuación [12] resulta positivo, el proyecto generará ganancias en el futuro. Por otra parte, si es negativo o cero el proyecto resultará en pérdidas futuras o su realización será indiferente. (12)

$$VAN = \sum_{t=1}^n \frac{F_t}{(1+k)^t} - I_0 \quad [12]$$

El cálculo del VAN implica establecer un valor de la tasa de descuento anual, que consiste en el coste que se aplica para obtener el valor actual del dinero que se recibirá en el futuro. Se aplica una tasa de descuento de un 6%. (4)

Finalmente, se obtiene un valor para el VAN de 62.544.812,47 € lo que implica que se producen excedentes superiores a la inversión inicial y, por tanto, el proyecto es rentable.

### 8.2 Tasa Interna de Retorno (TIR)

La TIR, Tasa Interna de Retorno, es una variable de medida que se encuentra muy relacionada con el VAN de un proyecto. Se define, por tanto, como la tasa interna de retorno que mide la rentabilidad esperada de una inversión, expresada en porcentaje. Cuanto más elevado es su valor, mayor rentabilidad, por lo que la mayor tasa de descuento será la que iguale el VAN a cero, según la ecuación [13]. (13)

$$0 = \sum_{t=1}^n \frac{F_t}{(1+k_{tir})^t} - I_0 \quad [13]$$

Se obtiene un valor de 28% para la TIR, siendo superior a la tasa de descuento establecida en el cálculo del VAN, por lo que se determina que el proyecto será rentable.

### 8.3 Período de retorno o Payback

Se puede definir el *Payback*, o período de retorno, como una medida de rentabilidad que indica cuánto tiempo tarda un proyecto en recuperar la inversión inicial a través del flujo de caja anual. El valor el período de retorno ofrece una estimación de cuantos años necesita el proyecto para recuperarse de la inversión inicial, y para ser rentable debe ofrecer un plazo aceptable de recuperación según los criterios financieros establecidos. (12)

$$Payback = \sum_{t=1}^n FC_t \quad [14]$$

Donde:

- $FC_t$ : Flujos de caja del proyecto, €.

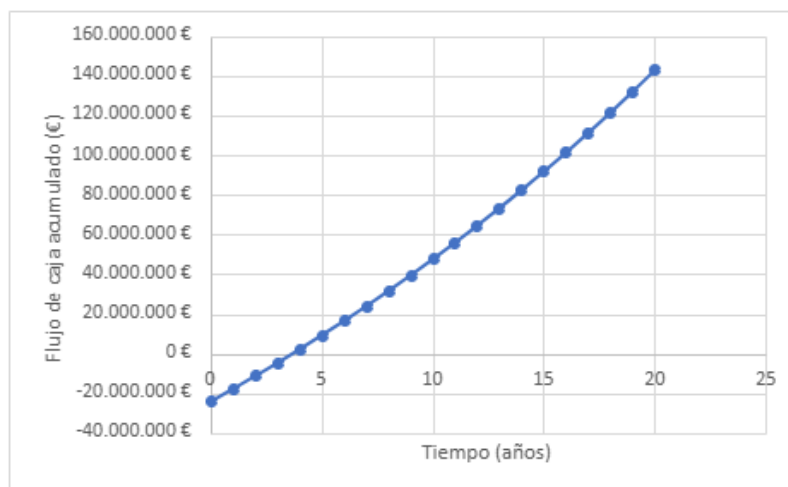


Figura 1. Flujos de caja en función de la vida útil del proyecto. Fuente: Elaboración propia.

El tiempo de recuperación de un proyecto suele encontrarse entre el año uno y el tres, en función del tipo de proyecto que se esté evaluando. En la Figura 1 se muestra la evolución de los flujos de caja acumulados durante la vida útil del proyecto. Se observa una rápida evolución y se determina el plazo de recuperación en el año cuatro, lo que indica un corto período de recuperación, por lo que se espera una alta rentabilidad. (4)

## 9 Análisis de sensibilidad

Por último, se llevará a cabo un análisis de sensibilidad del proyecto, con el objetivo de evaluar el impacto de la incertidumbre asociada a posibles variaciones en los flujos de caja. Estas variaciones pueden deberse a cambios en el costo de materias primas, costos operativos y, mayormente, al volumen y precio de ventas en el mercado. (4)

Este análisis permitirá evaluar cuáles son los factores que más afectan a la rentabilidad del proyecto y, por tanto, dónde se concentran los principales riesgos económicos.

### 9.1 Variación en el precio de las materias primas

Las materias primas principales, como el benceno y el dodeceno, están directamente relacionadas con el precio del petróleo, lo que las hace especialmente sensibles a las fluctuaciones del mercado energético y a fenómenos políticos globales. Es por esta razón que se debe analizar la influencia de la variación del precio de las materias primas en la rentabilidad del proyecto. Por tanto, se considera un incremento y una reducción del 10% y se muestra en la Tabla 9 cómo afectaría a los parámetros de interés. (3)

Tabla 9. Análisis de sensibilidad del precio de las materias primas. Fuente: Elaboración propia.

	Inicial	+10%	-10%
Coste materias primas (€)	94.259.836,14 €	103.685.819,75 €	84.833.852,52 €
VAN	62.544.812,47 €	-53.797.135,04 €	179.020.151,01 €
TIR	28%	-	66%
Payback	Año 4	Nunca	Año 2

## 9.2 Ingresos por ventas del producto principal

Se analiza otra de las variables más importantes de la evaluación económica de proyectos, que son los ingresos por ventas, que vienen determinados tanto por el precio de mercado como por el volumen de ventas. En este análisis se observará cómo fluctúan tanto la VAN como la TIR con un porcentaje de variación de un 10%.

Tabla 10. Análisis de sensibilidad del ingreso por ventas. Fuente: Elaboración propia.

	Inicial	+10%	-10%
Ingresos (€)	160.000.000,00 €	176.000.000,00 €	144.000.000,00 €
VAN	62.544.812,47 €	216.143.887,91 €	-90.920.871,93 €
TIR	28%	78%	-
Payback	Año 4	Año 2	Nunca

## 10 Conclusión

El análisis económico de la construcción de la planta de producción de detergente tipo LABS indica que el proyecto es rentable, con valores positivos de VAN y TIR que cumplen los criterios de aceptación.

El análisis de sensibilidad del proyecto permitió identificar factores críticos, como el aumento en el costo de materias primas y la posible disminución en las ventas, los cuales podrían afectar a la rentabilidad del proyecto.

En conclusión, el presente proyecto se considera una inversión rentable, considerando los riesgos asumidos y su potencial de retorno económico.

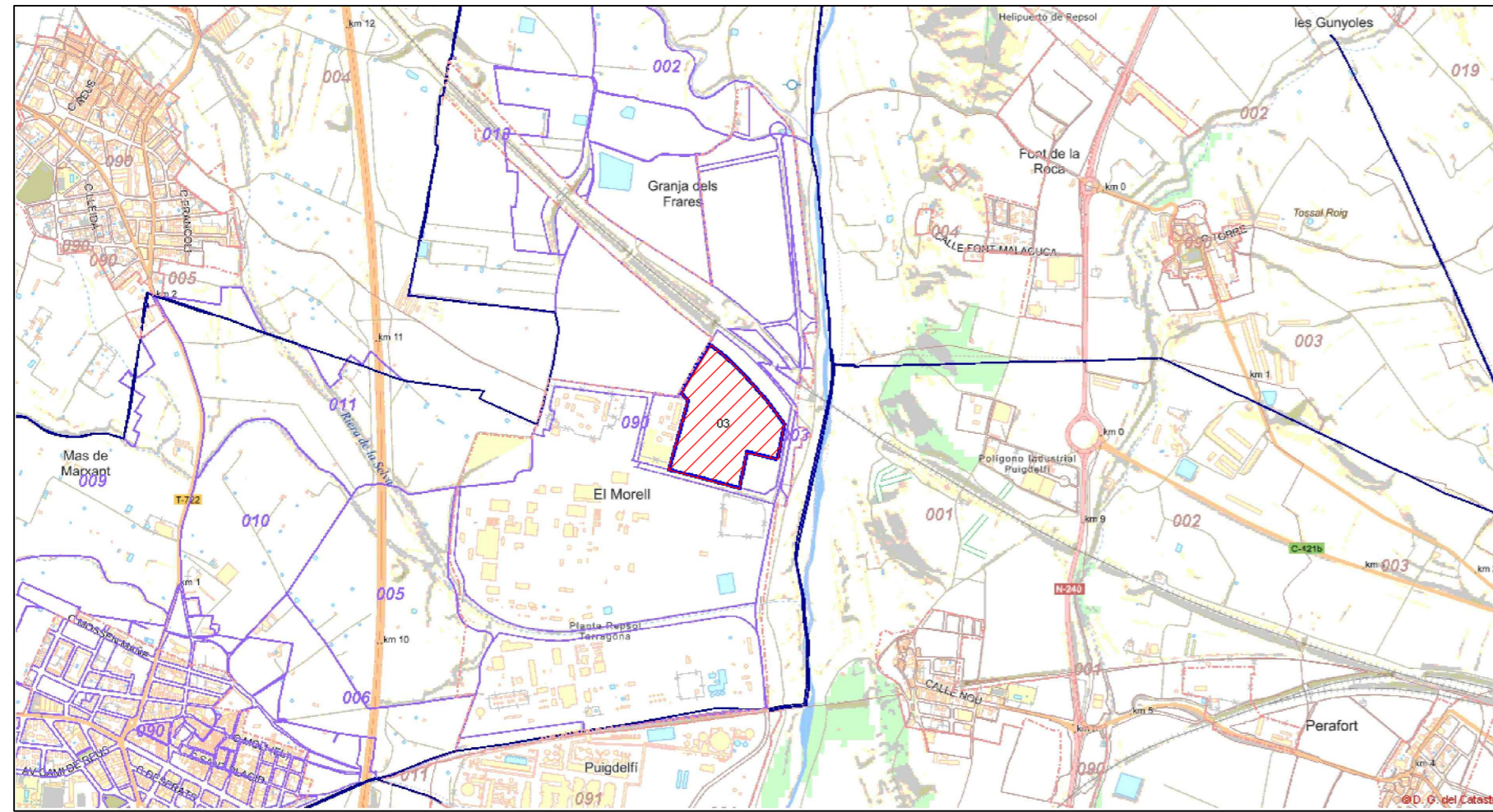
## 11 Bibliografía

1. ¿Cómo calcular los intereses y cuota de una hipoteca? En línea. BBVA Asset Management, [s. f.]. [Consulta: 25 junio 2025]. Disponible en: <https://www.bbvaassetmanagement.com/es/actualidad/como-se-calculan-los-intereses-y-la-cuota-cuando-pedimos-un-credito-hipotecario-el-sistema-de-amortizacion-frances/>
2. Tipos de interés TAE. En línea. Instituto de Crédito Oficial (ICO), [s. f.]. [Consulta: 24 junio 2025]. Disponible en: <https://www.ico.es/ico-empresas-y-emprendedores/tipos-interes-tae>
3. CALLEJA PARDO, Guillermo, GARCÍA HERRUZO, Francisco, IGLESIAS MORÁN, José, DE LUCAS MARTÍNEZ, Antonio y RODRÍGUEZ MAROTO, José M. *Nueva introducción a la ingeniería química*. Madrid: Ediciones Díaz de Santos, 2016. ISBN 978-84-9052-118-6.
4. TOWLER, Gavin y SINNOTT, Ray. *Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design*. 3.ª ed. Amsterdam: Elsevier, 2022. ISBN 978-0-12-821470-4.
5. El HDPE plástico modificó el detergente para ropa para requisitos particulares vacío líquido embotella los jarros 2 litros. En línea. [S. l.]: plasticbottlescaps.com, [s. f.]. [Consulta: 25-06- 2025]. Disponible en: <https://spanish.plasticbottlescaps.com/sale-14482396-plastic-hdpe-customized-liquid-empty-laundry-detergent-bottles-jugs-2-liters.html>
6. Industria química salario – Comprueba industria química salario promedio en Jooble. En línea. [S. l.]: Jooble, [s. f.]. [Consulta: 24-06-2025]. Disponible en: <https://es.jooble.org/salary/industria-quimica#yearly>
7. TURTON, Richard, SHAEIWITZ, Joseph A., BHATTACHARYYA, Debangsu y WHITING, Wallace B. *Analysis, synthesis, and design of chemical processes*. 5.ª ed. Boston: Pearson, 2018. ISBN 978-0-13-417740-4.
8. PETERS, Max S., TIMMERHAUS, Klaus D. y WEST, Ronald E. *Plant design and economics for chemical engineers*. 5.ª ed. New York: McGraw-Hill, 2003. ISBN 978-0-07-239266-3.
9. Introducción al cálculo de la amortización con ejemplos – IONOS España. En línea. IONOS, [s. f.]. [Consulta: 24-06-2025]. Disponible en: <https://www.ionos.es/startupguide/gestion/calculo-de-la-amortizacion/>
10. Nota de prensa: indicador adelantado del Índice de Precios de Consumo (IPC). Mayo 2025. En línea. Instituto Nacional de Estadística (INE), 28 mayo 2025. [Consulta: 25-06-2025]. Disponible en: <https://www.ine.es/dyngs/Prensa/adIPC0525.htm>
11. España. Ley 27/2014, de 27 de noviembre, del Impuesto sobre Sociedades. *Boletín Oficial del Estado*, 28 noviembre 2014. [Consulta: 26-06-2025]. Disponible en: <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-2014-12328>
12. Valor actual neto (VAN) – Qué es y cómo utilizarlo. En línea. Economipedia, [s. f.]. [Consulta: 24-06-2025]. Disponible en: <https://economipedia.com/definiciones/valor-actual-neto.html>
13. Tasa interna de retorno (TIR): ¿Qué es? Fórmula y ejemplos. En línea. Economipedia, [s. f.]. [Consulta: 26-06-2025]. Disponible en: <https://economipedia.com/definiciones/tasa-interna-de-retorno-tir.html>

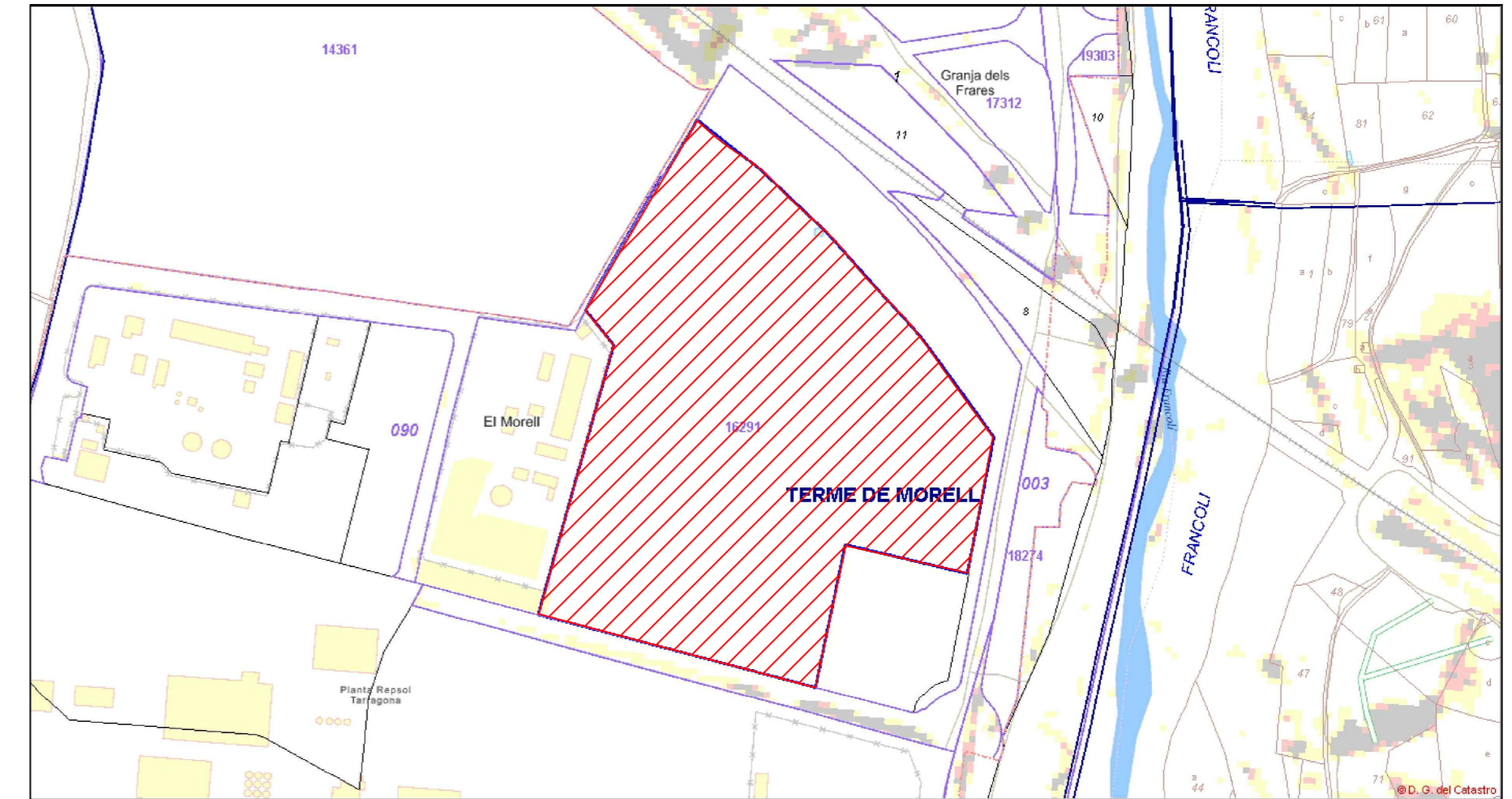
DOCUMENTO II.  
PLANOS

## ÍNDICE

1. Plano de situación y emplazamiento
2. Plano de implantación
3. Diagrama de flujo
4. Diagrama de instrumentación y control (Sección 100)
5. Diagrama de instrumentación y control (Secciones 200 y 300)
6. Reactor R-101 A/B
7. Columna de destilación T-102
8. Reactor R-201



PLANO DE SITUACIÓN  
E: 1/20000

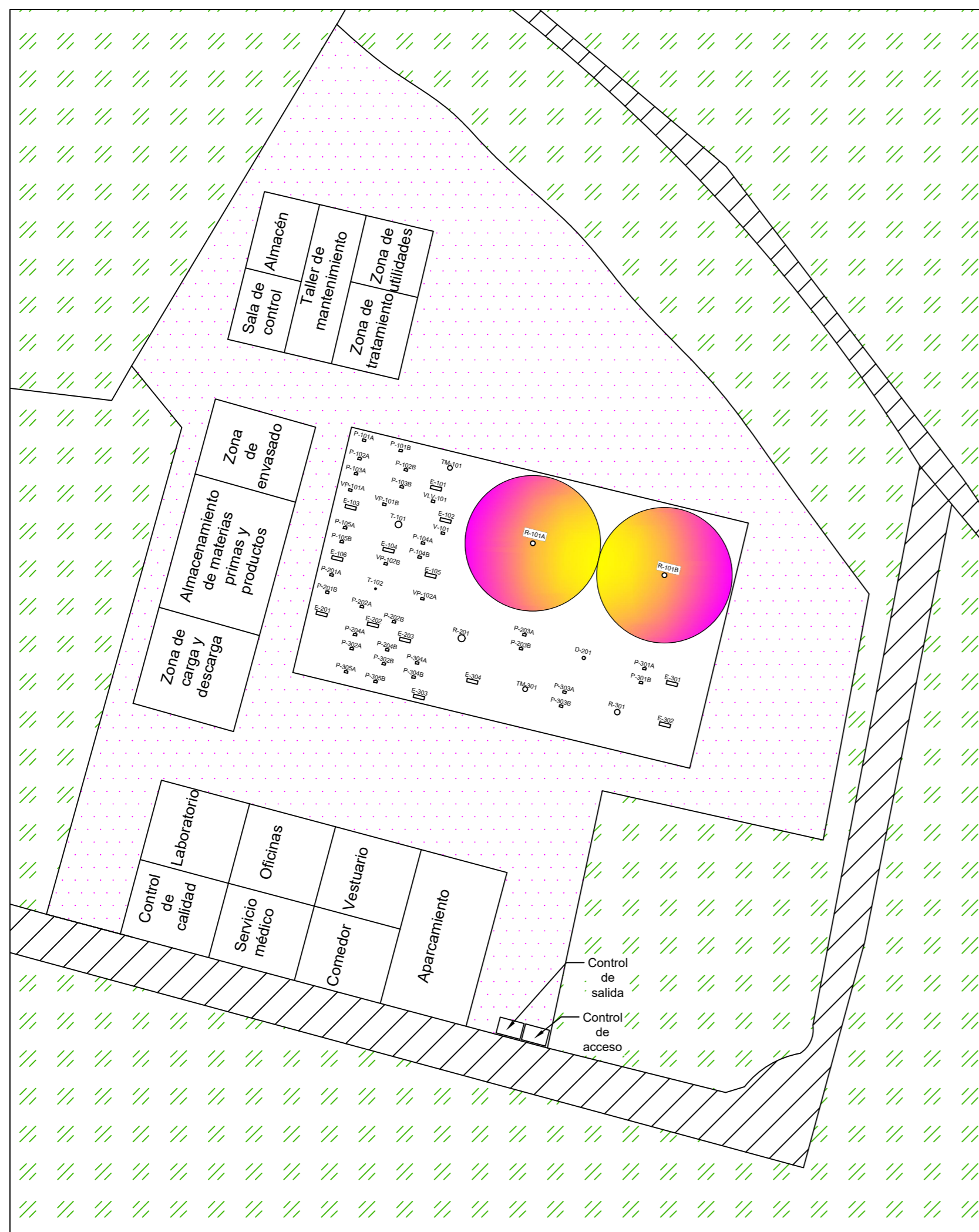


PLANO DE EMPLAZAMIENTO  
E: 1/5000

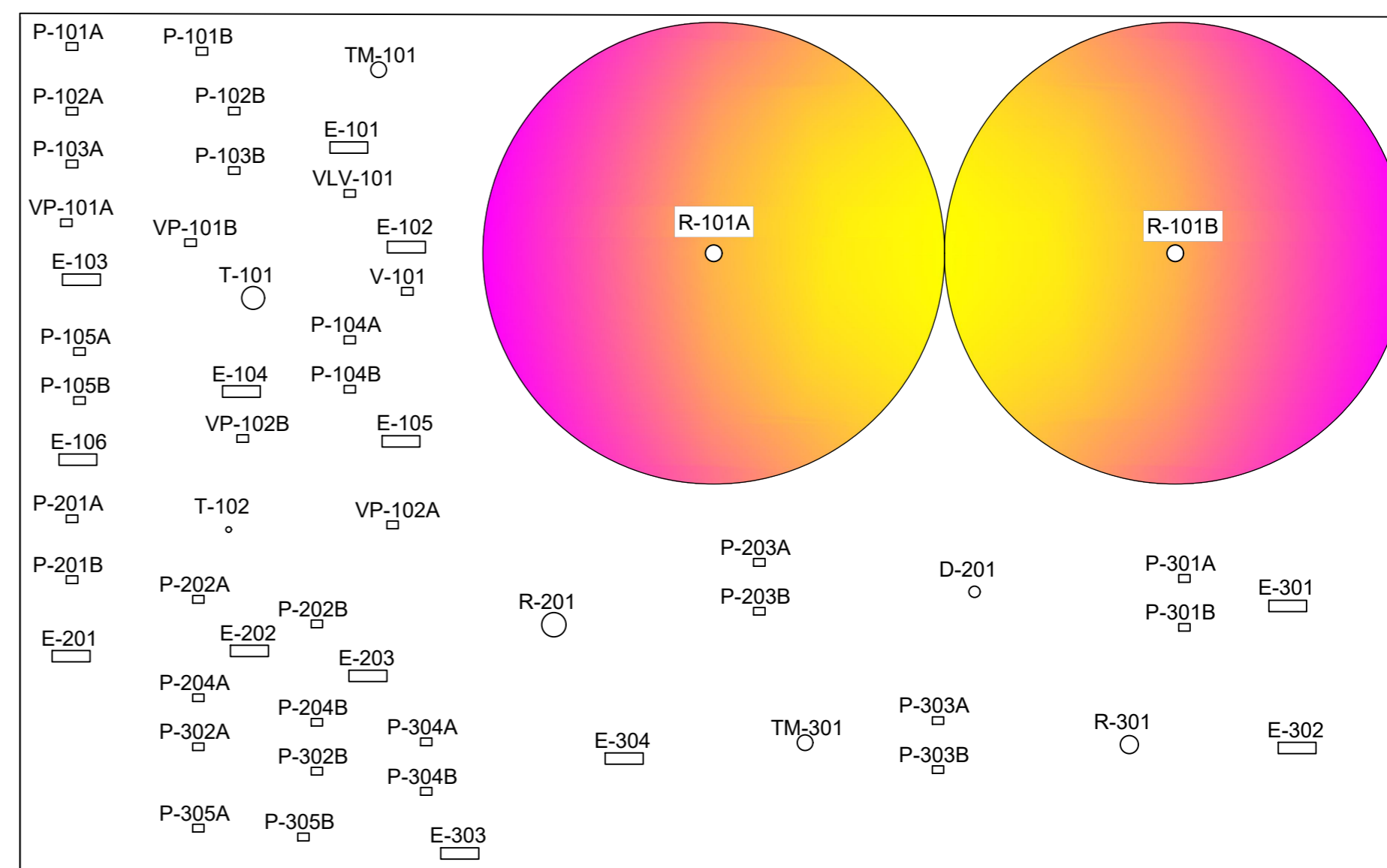
POLÍGONO: Polígono Petroquímico Norte de Tarragona  
 PROVINCIA: Tarragona  
 MUNICIPIO: El Morell y La Pobla de Mafumet  
 PARCELA: 102 194 m<sup>2</sup>  
 REFERENCIA CATASTRAL: 1629103CF5612H0001BI





 UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO		
		<b>PLANTA DE PRODUCCIÓN DE DETERGENTE TIPO LABS</b>
AUTORES: Antía Gándara Vieito Noelia López García Lucía Pardilla Fraguas	SINATURAS: 	ESCALA: 1/20000 1/5000
<b>PLANO DE SITUACIÓN Y EMPLAZAMIENTO</b>		<b>1/8</b>

ESCALA 1:2000



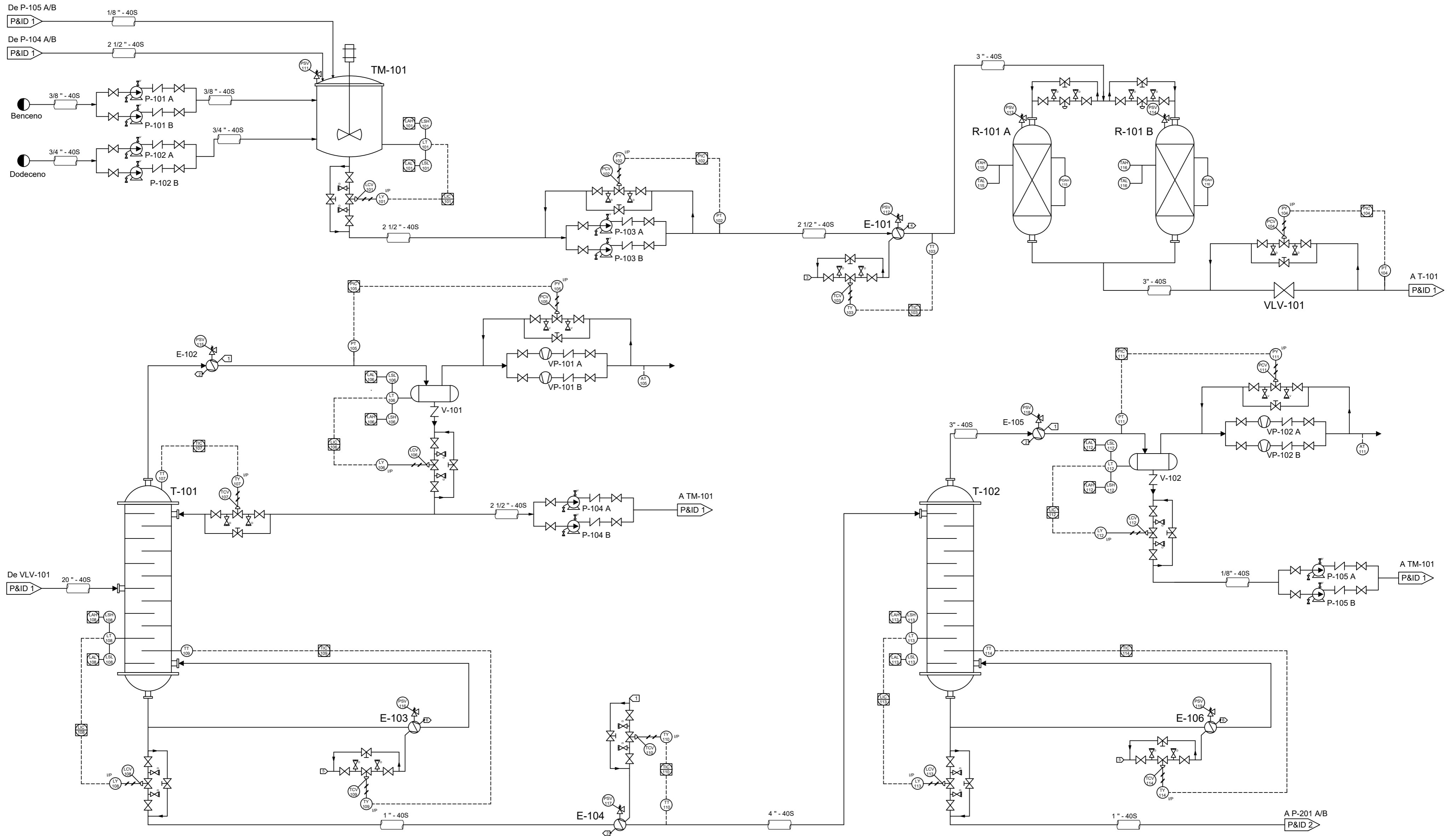
ESCALA: 1:750



LEYENDA	NOTAS
 Carretera	1. Se han considerado las distancias de seguridad recomendadas por Global Asset Protection Services (GAPS) dirigida a plantas químicas y petroquímicas. 2. Los equipos que conforman la planta están representados con dimensiones aproximadas.
 Zona de expansión	
 Parcelas colindantes	
 Área de exposición en caso de incendio o explosión	

	UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO	
PLANTA DE PRODUCCIÓN DE DETERGENTE TIPO LABS		
AUTORES: Antía Gándara Vieito Noella López García Lucía Pardilla Fraguas	SINATURAS: 	ESCALA VARIABLE JUNIO 2025
PLANO DE IMPLANTACIÓN		2/8





SIMBOLOGÍA	VÁLVULAS	NOMENCLATURA DE LAZOS	NOMENCLATURA DE UTILIDADES	LÍNEAS DE CONTROL				
<b>Según función</b> XYZ 123 Elemento discreto XYZ 123 Elemento que realiza la función de control	Válvula de control Válvula de control manual Válvula genérica Válvula de alivio Válvula antirretorno Válvula de venteo Válvula de drenaje	XYZ 123 X: Variable controlada YZ: Función del dispositivo 1: Sección del lazo 23: Número de lazo <table border="1"> <tr> <th>LETRA X</th> <th>LETRAS YZ</th> </tr> <tr> <td>T: Temperatura P: Presión F: Flujo L: Nivel PD: Presión diferencial A: Composición</td> <td>A: Alarma C: Controlador H: Alto I: Indicador L: Bajo S: Sensor / Seguridad T: Transmisor Y: Conversor V: Válvula</td> </tr> </table>	LETRA X	LETRAS YZ	T: Temperatura P: Presión F: Flujo L: Nivel PD: Presión diferencial A: Composición	A: Alarma C: Controlador H: Alto I: Indicador L: Bajo S: Sensor / Seguridad T: Transmisor Y: Conversor V: Válvula	1: Alimentación agua de refrigeración 2: Retorno agua de refrigeración 3: Alimentación vapor de baja presión 4: Retorno vapor de baja presión 5: Alimentación vapor de alta presión 6: Retorno vapor de alta presión 7: Entrada aire regenerador del lecho 8: Salida aire regenerador del lecho	Conexión eléctrica Señal neumática Conexión a proceso  <b>NOTA</b> Todas las tuberías van acompañadas de su diámetro nominal en pulgadas (") y de su Schedule.
LETRA X	LETRAS YZ							
T: Temperatura P: Presión F: Flujo L: Nivel PD: Presión diferencial A: Composición	A: Alarma C: Controlador H: Alto I: Indicador L: Bajo S: Sensor / Seguridad T: Transmisor Y: Conversor V: Válvula							
<b>Según localización</b> XYZ 123 Equipo montado en planta XYZ 123 Equipo montado en sala de control								

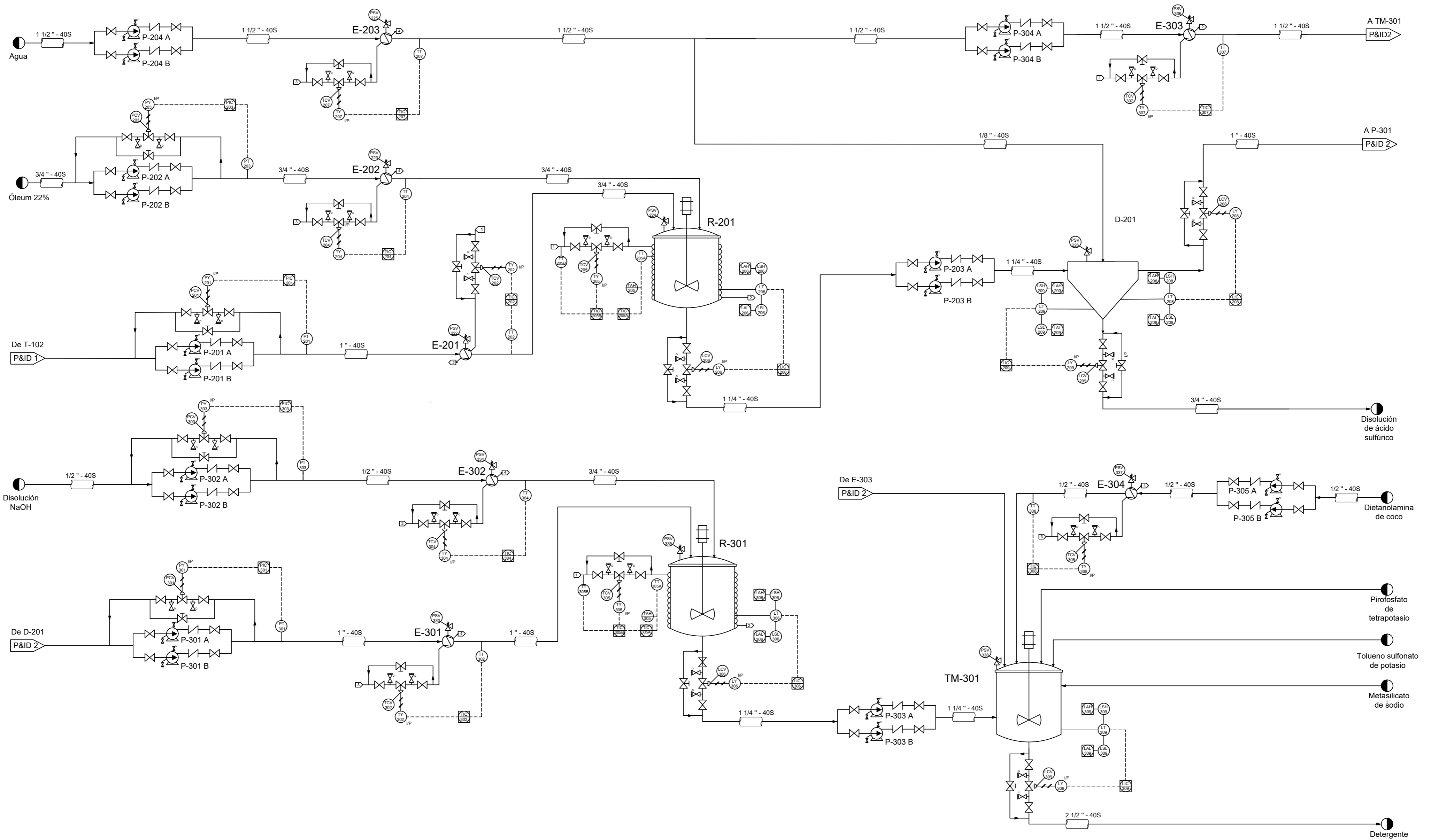
UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA  
GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO

**PLANTA DE PRODUCCIÓN DE DETERGENTE TIPO LABS**

<b>AUTORES:</b> Antía Gándara Vieito Noelia López García Lucía Pardilla Fraguas	<b>SINATURAS:</b> 	<b>ESCALA:</b> S/E JUNIO 2025
--	-----------------------	----------------------------------

**DIAGRAMA DE INSTRUMENTACIÓN Y CONTROL**  
**P&ID SECCIÓN 100**

4/8



SIMBOLOGÍA	VÁLVULAS	NOMENCLATURA DE LAZOS	NOMENCLATURA DE UTILIDADES	LÍNEAS DE CONTROL				
<b>Según función</b> Elemento discreto Elemento que realiza la función de control	Válvula de control Válvula de control manual Válvula genérica Válvula de alivio Válvula antirretorno Válvula de venteo Válvula de drenaje	XYZ 123 X: Variable controlada YZ: Función del dispositivo 1: Sección del lazo 23: Número de lazo <table border="1"> <tr> <th>LETRA X</th> <th>LETRAS YZ</th> </tr> <tr> <td>T: Temperatura P: Presión F: Flujo L: Nivel PD: Presión diferencial A: Composición</td> <td>A: Alarma C: Controlador H: Alto I: Indicador L: Bajo S: Sensor / Seguridad T: Transmisor Y: Conversor V: Válvula</td> </tr> </table>	LETRA X	LETRAS YZ	T: Temperatura P: Presión F: Flujo L: Nivel PD: Presión diferencial A: Composición	A: Alarma C: Controlador H: Alto I: Indicador L: Bajo S: Sensor / Seguridad T: Transmisor Y: Conversor V: Válvula	1: Alimentación agua de refrigeración 2: Retorno agua de refrigeración 3: Alimentación vapor de baja presión 4: Retorno vapor de baja presión 5: Alimentación vapor de alta presión 6: Retorno vapor de alta presión 7: Entrada aire regenerador del lecho 8: Salida aire regenerador del lecho	Conexión eléctrica Señal neumática Conexión a proceso  <b>NOTA</b> Todas las tuberías van acompañadas de su diámetro nominal en pulgadas (") y de su Schedule.
LETRA X	LETRAS YZ							
T: Temperatura P: Presión F: Flujo L: Nivel PD: Presión diferencial A: Composición	A: Alarma C: Controlador H: Alto I: Indicador L: Bajo S: Sensor / Seguridad T: Transmisor Y: Conversor V: Válvula							

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA

GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO

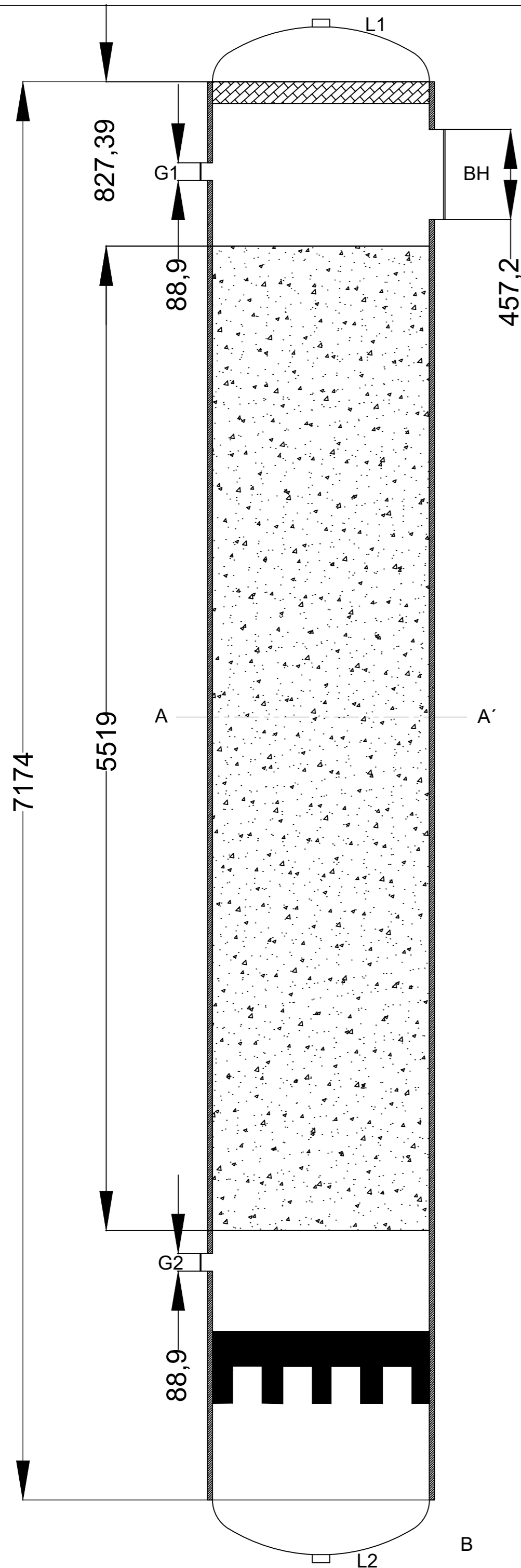
### PLANTA DE PRODUCCIÓN DE DETERGENTE TIPO LABS

<b>AUTORES:</b> Antía Gándara Vieito Noelia López García Lucía Pardilla Fraguas	<b>SINATURAS:</b> 	<b>ESCALA:</b> S/E JUNIO 2025
--	-----------------------	----------------------------------

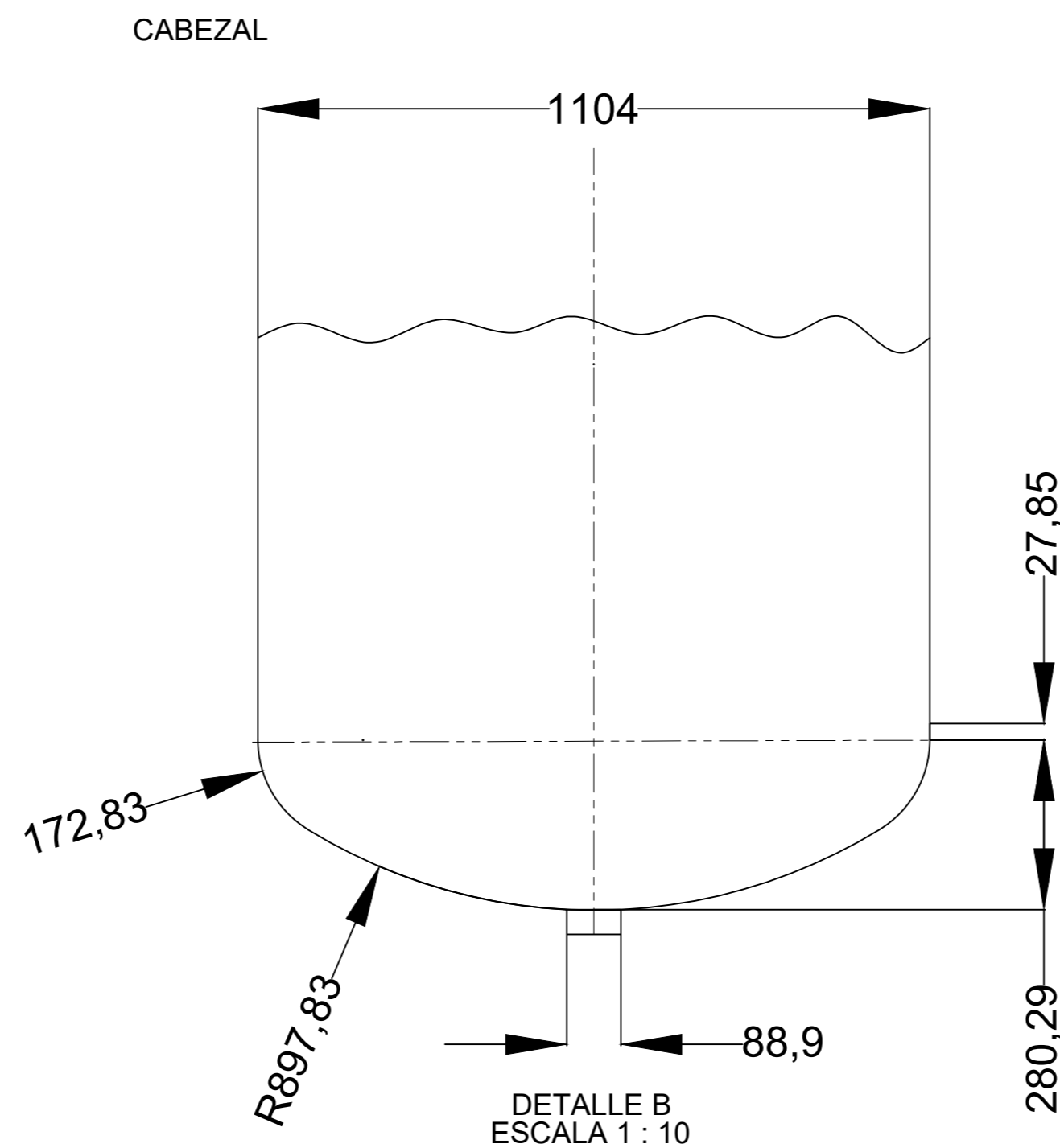
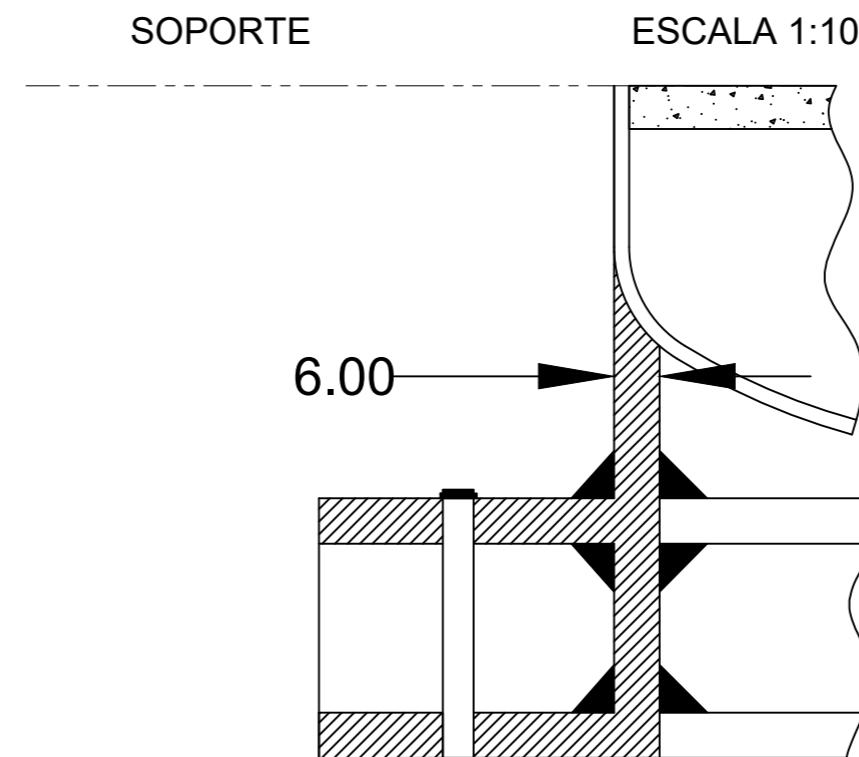
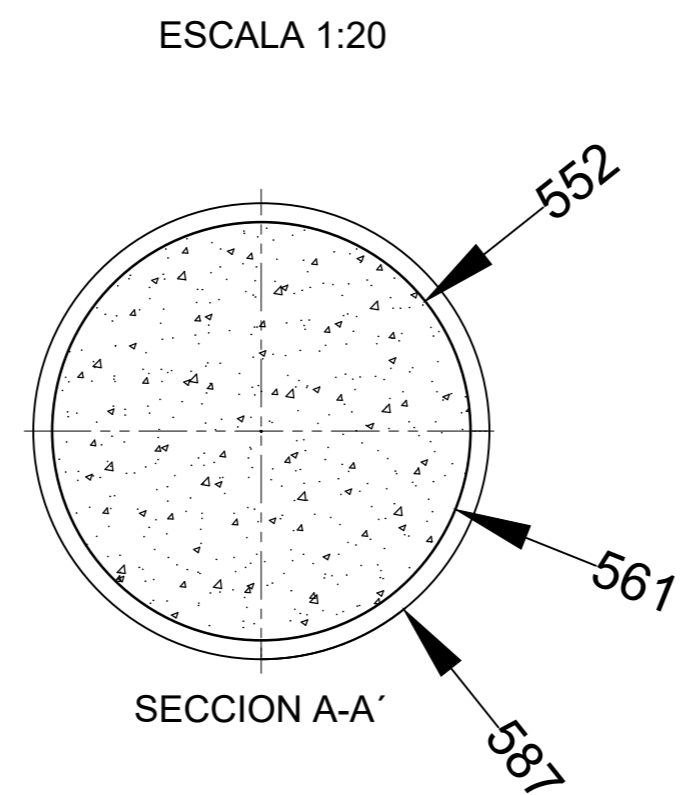
## DIAGRAMA DE INSTRUMENTACIÓN Y CONTROL

### P&ID SECCIONES 200 Y 300

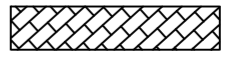
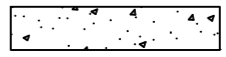


5/8






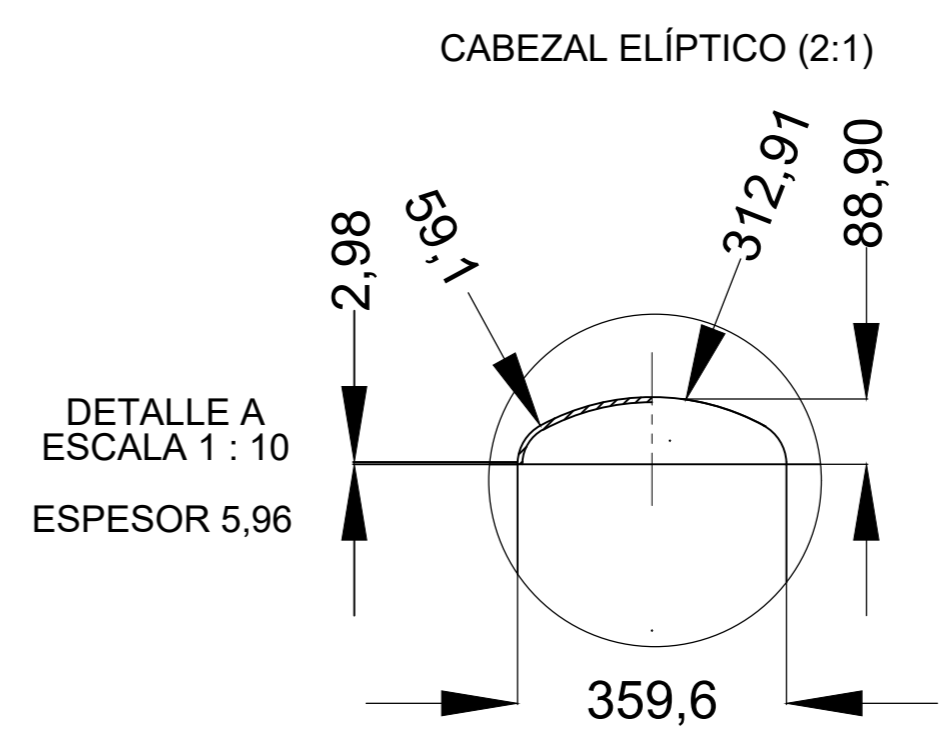
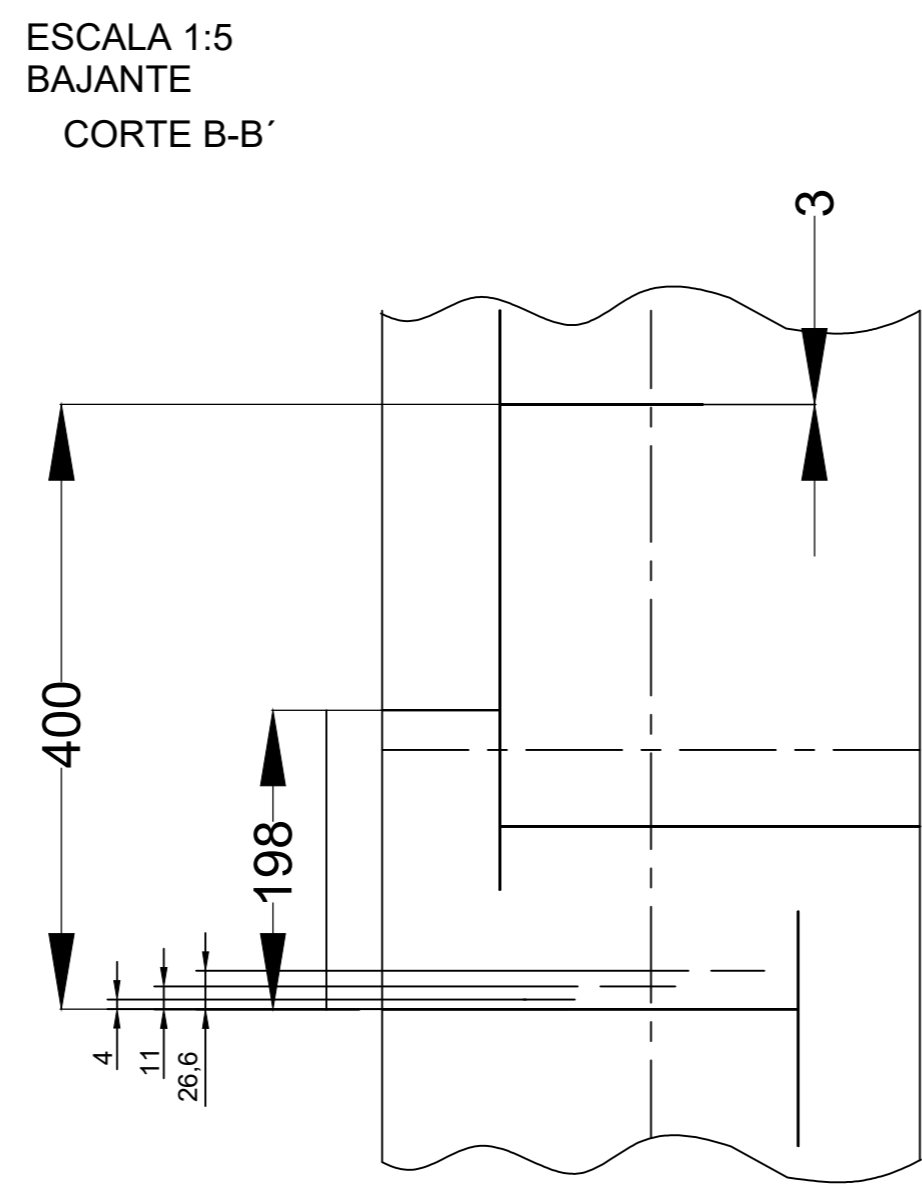
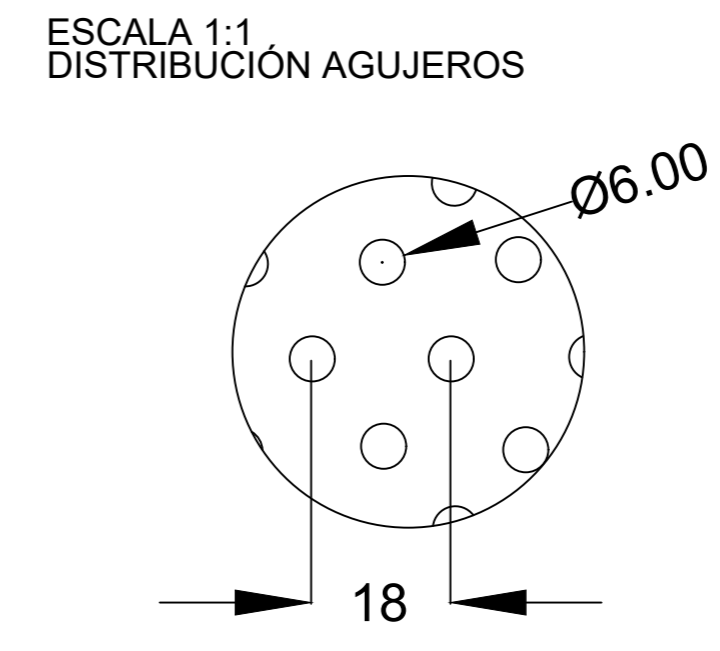
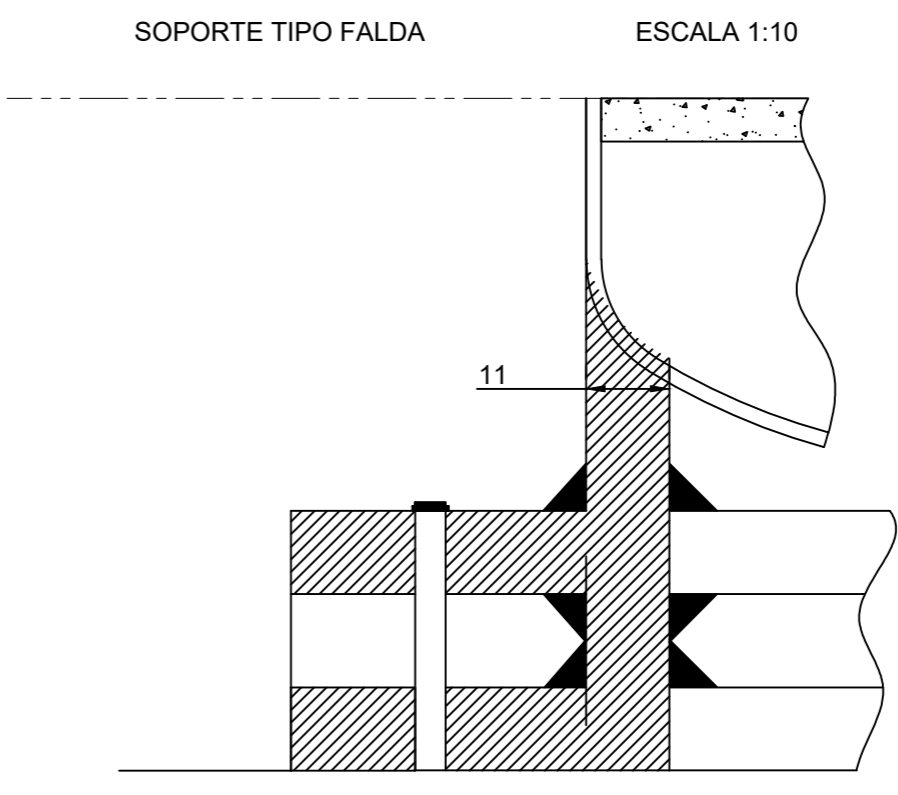
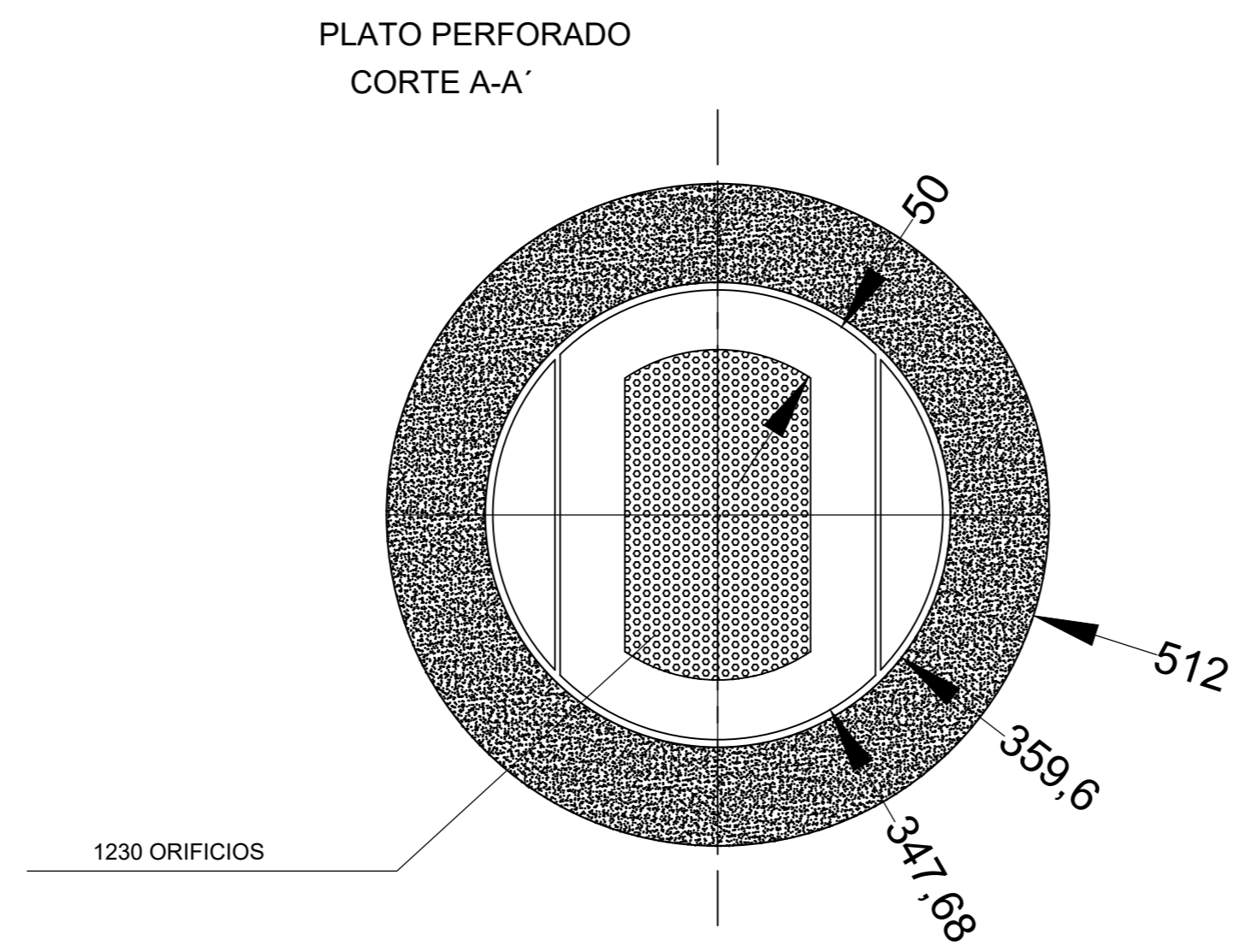
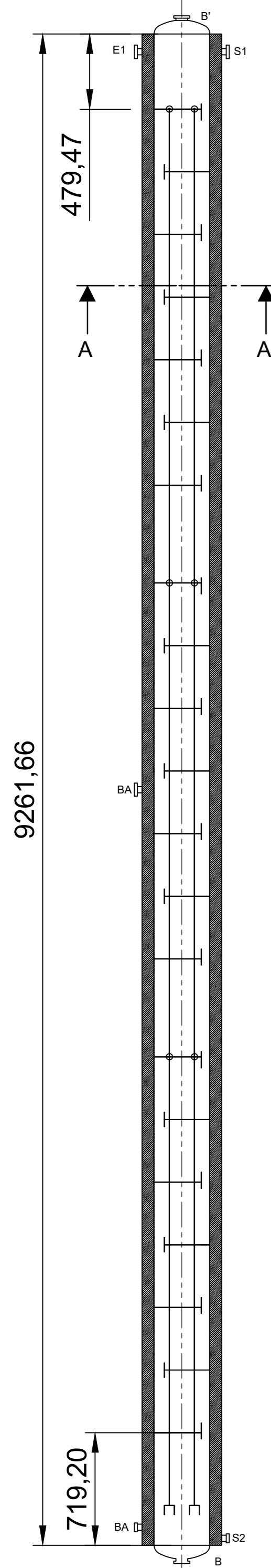
ESCALA 1:20



DETALLE B  
ESCALA 1 : 10

DATOS DE DISEÑO	
REACTOR R-101 A/B	
CÓDIGO DE DISEÑO: ASME BPV SEC. VIII	
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN: ACERO INOXIDABLE 304	
SOPORTE: TIPO FALDA ACERO INOXIDABLE 304	
CARACTERÍSTICAS	
Presión de operación	10 bar
Temperatura de operación	125-147,17°C
Altura total	7,79 m
Diámetro de carcasa	1,12 m
Volumen reactor	6,86 m <sup>3</sup>
Tipo de cabezal	Elíptico
Aislante	Fibra de vidrio
LEYENDA	
	Distribuidor de líquido
	Catalizador
	Aislante
	Colector de líquido
ANOTACIONES	
1. Las medidas están expresadas en milímetros. 2. L1 representa la entrada de reactivos. 3. L2 representa la salida de productos. 4. G1 representa la entrada de aire para regenerar. 5. G2 representa la salida de aire para regenerar.	

 UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO		
PLANTA DE PRODUCCIÓN DE DETERGENTE TIPO LABS		
AUTORES: Lucía Pardilla Fraguas	SINATURAS: 	ESCALA: Variable
DISEÑO DE REACTOR R-101 A/B		JUNIO 2025
		6/8

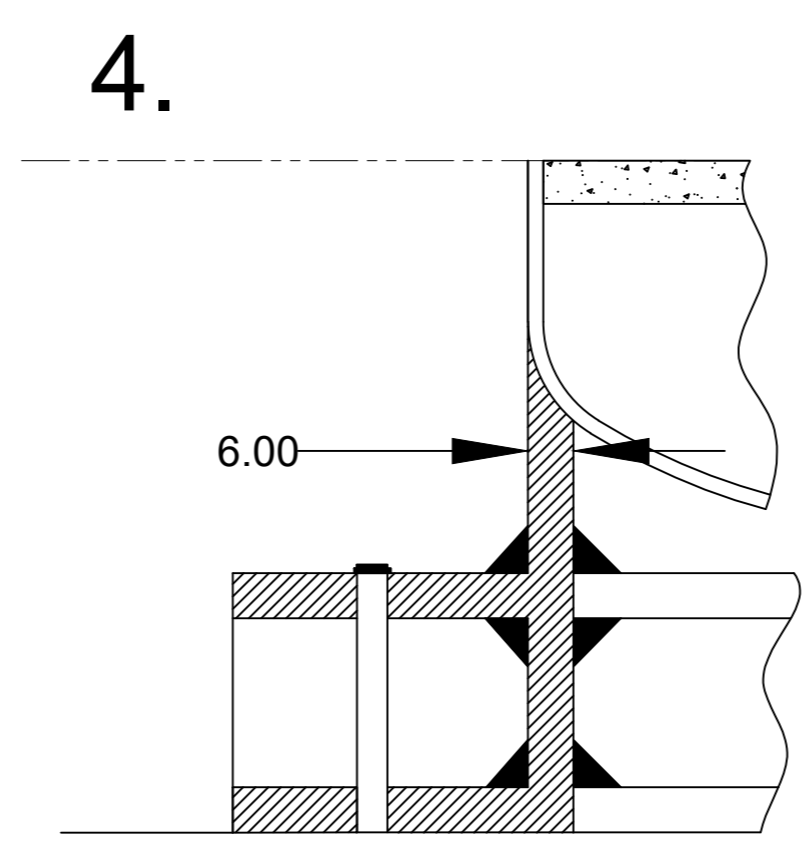
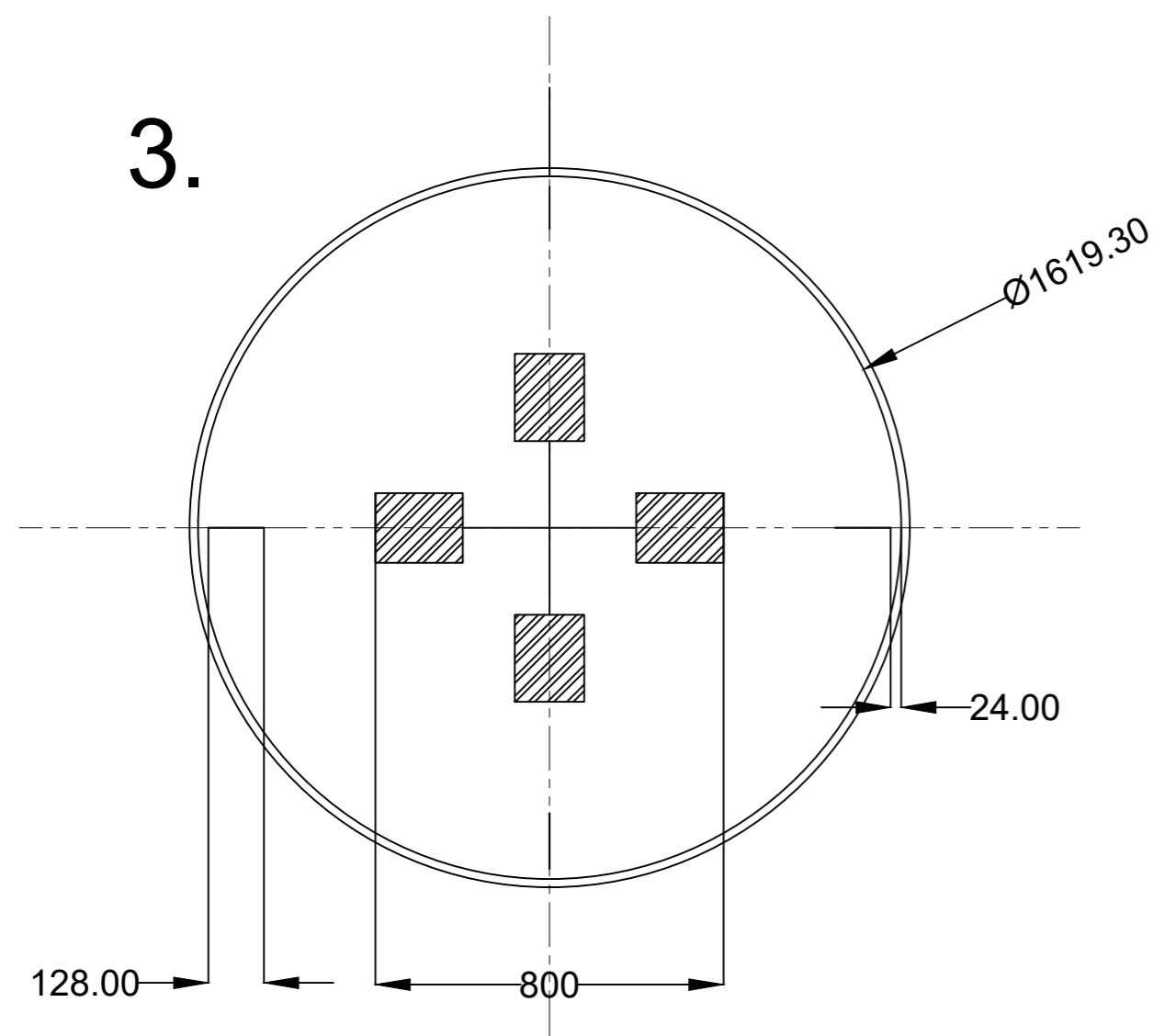
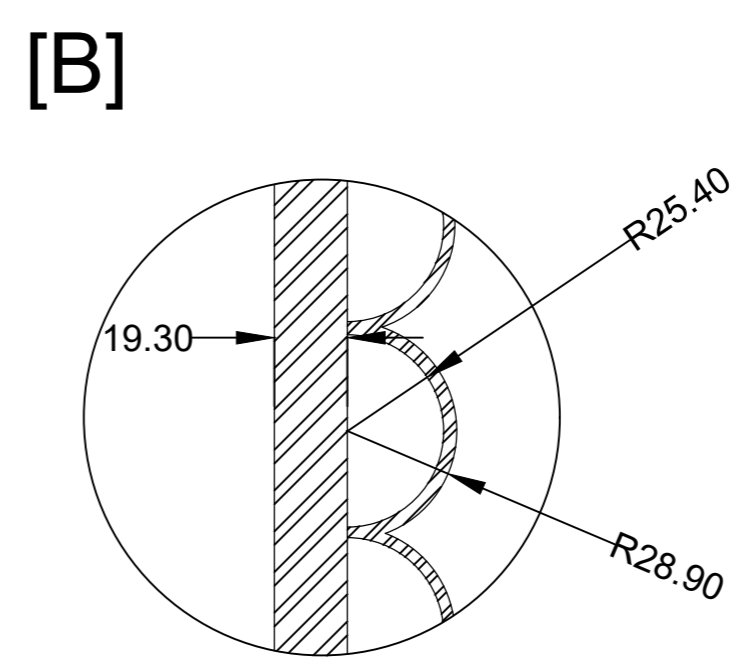
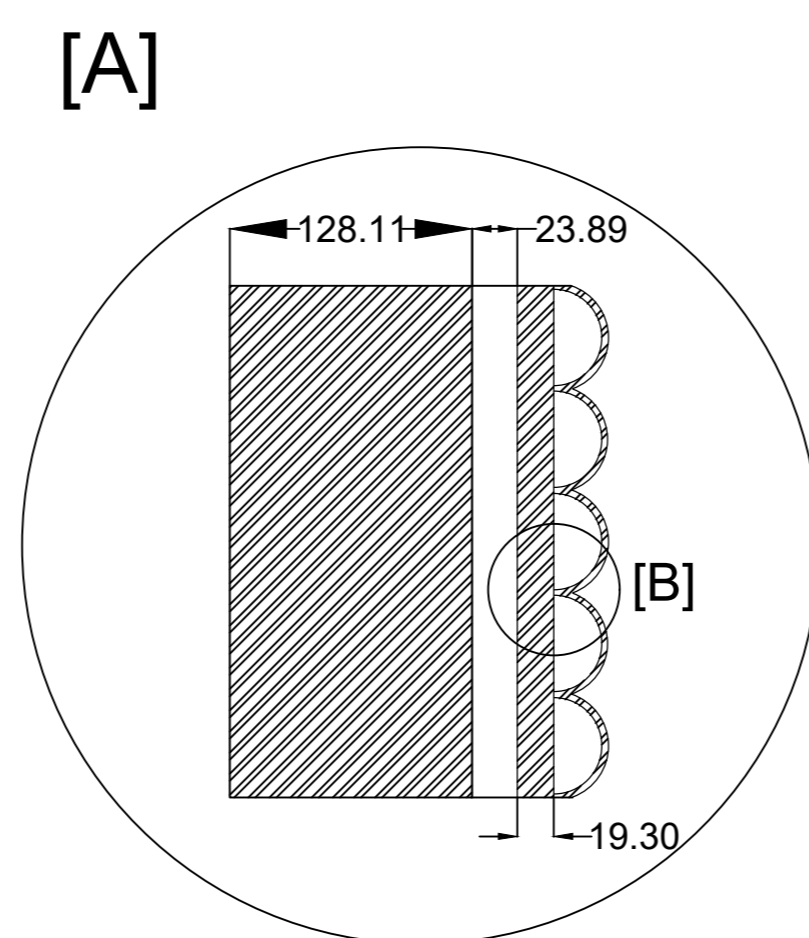
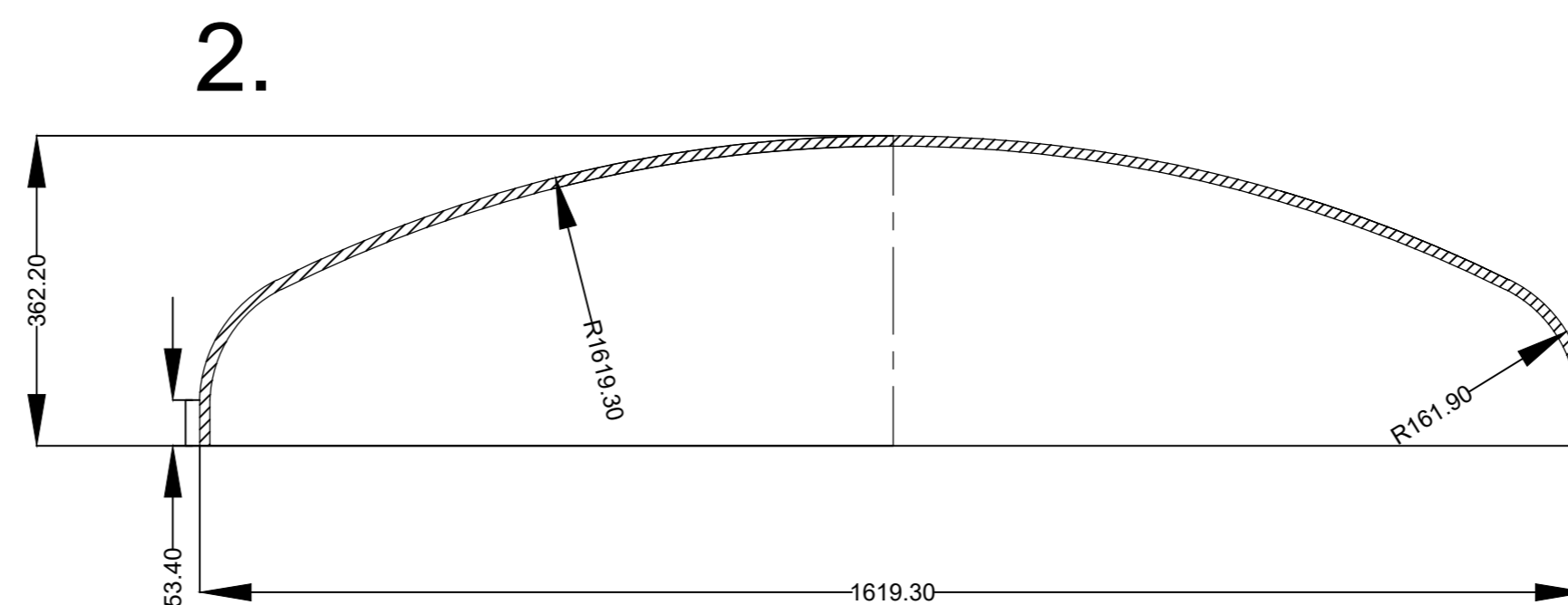
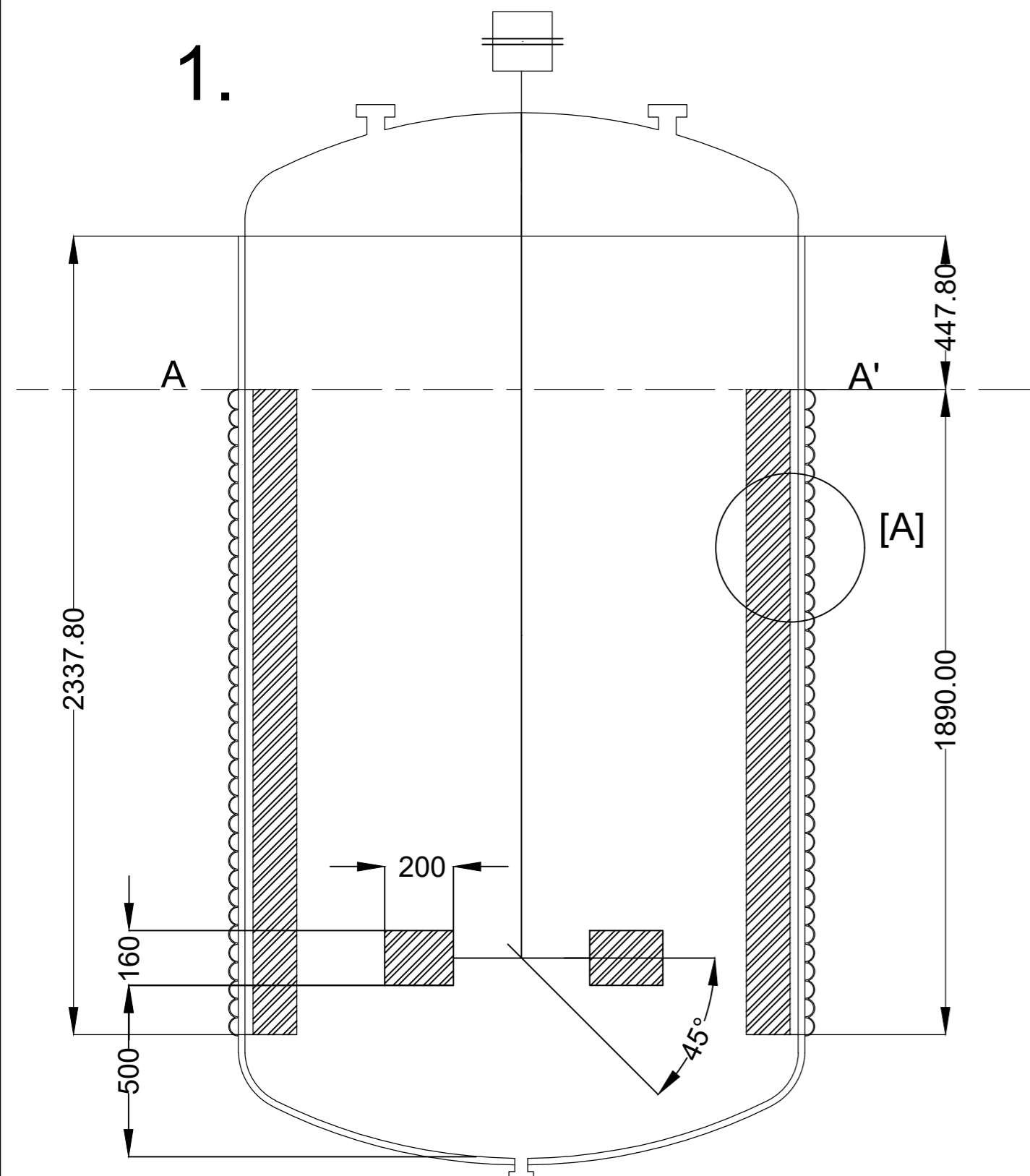


DATOS DE DISEÑO	
CÓDIGO DE DISEÑO	ASME BPV Sec. VIII-Div. 1
EQUIPO	Columna de destilación de platos perforados (T-102)
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN	Acero inoxidable 304
NÚMERO DE PLATOS	21
TIPO DE PLATO	Perforado
Nº DE ORIFICIOS POR PLATO	1230
EFICIENCIA DE SOLDADURA	1
ESFUERZO MÁXIMO PERMISIBLE	80,67 N/mm <sup>2</sup>
CAUDAL DE ALIMENTACIÓN	1837,03 kg/h
TEMPERATURA DE DISEÑO	266,77 °C
PRESIÓN DE DISEÑO	1,013 bar
TIPO DE SOPORTE	Falda
AISLANTE	Fibra de vidrio
NOTAS	
1. Medidas en milímetros, mm.	
2. E1 representa la entrada y cabezas.	
3. S1 y S2 representa las salidas por cabeza y colas.	
4. BA representa las bocas de acceso	


 UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA  
 GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO
 

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE DETERGENTE TIPO LABS

AUTORES: Noelia López García	SINATURAS: 	ESCALA: Variable
DISEÑO DE COLUMNA DE DESTILACIÓN T-102		JUNIO 2025
		7/8



DATOS DE DISEÑO	
CÓDIGO DE DISEÑO	ASME BPV Sección VIII Div.1
NOMBRE	Reactor de tanque agitado
ETIQUETA	R-201
TIPO DE CAMISA	Media tubería
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN	Acero inoxidable 304
ORIENTACIÓN	Vertical
VOLUMEN DE REACTOR	6,73 m <sup>3</sup>
FLUIDO REFRIGERANTE	Agua de refrigeración
CALIDAD DE ALIMENTACIÓN	Líquido
CAUDAL DE ALIMENTACIÓN	4217 kg/h
TEMPERATURA DE DISEÑO	68 °C
PRESIÓN DE DISEÑO	5,5 bar
LEYENDA	
	Acero inoxidable 304
NOTAS	
1. Perfil del reactor R-201, escala 1:50	
[A] Detalle del espesor del reactor, escala 1:1	
[B] Detalle del la camisa de refrigeración	
2. Cabezal torisférico, escala 1:20	
3. Corte A-A', escala 1:50	
4. Soporte tipo falda recta, escala 1:50	
Todas las cotas se expresan en milímetros	
Las aberturas del equipo son solo de referencia	

	UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA	
	GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO	
PLANTA DE PRODUCCIÓN DE DETERGENTE TIPO LABS		
AUTORES:	SINATURAS:	ESCALA: Variable
Antía Gándara Vieito		JUNIO 2025
DISEÑO DEL REACTOR R-201		8/8

DOCUMENTO III.  
ESTUDIOS CON  
ENTIDAD PROPIA

## Índice

1	Introducción.....	3
2	Legislación vigente.....	3
3	Descripción del proyecto .....	3
3.1	Objeto .....	3
3.2	Resumen de emisiones.....	4
3.3	Análisis medioambiental de las alternativas .....	6
4	Justificación de la ubicación.....	7
5	Inventario ambiental e identificación de impactos .....	8
5.1	Medio físico .....	8
5.1.1	Temperaturas .....	8
5.1.2	Hidrología.....	8
5.1.3	Calidad del aire.....	8
5.1.4	Hidrogeología.....	9
5.2	Medio biológico.....	10
5.2.1	Flora.....	10
5.2.2	Fauna .....	10
5.2.3	Red Natura 2000.....	11
5.3	Medio socioeconómico .....	12
5.3.1	Población.....	12
5.3.2	Economía.....	12
5.4	Paisaje y patrimonio cultural .....	12
6	Identificación y valorización de impactos ambientales .....	12
6.1	Fase de construcción.....	13
6.2	Fase de explotación.....	14
6.3	Fase de desmantelamiento .....	14
7	Medidas preventivas y correctoras .....	14
7.1.1	Medidas en la fase de construcción .....	14
7.1.2	Medidas en la fase de explotación.....	14
7.1.3	Medidas en la fase de desmantelamiento .....	15
7.1.4	Medidas generales .....	15

8	Programa de vigilancia ambiental .....	15
9	Documento de síntesis.....	16
10	Bibliografía.....	17

## 1 Introducción

En el presente documento se encuentra desarrollado el Estudio de Impacto Ambiental (EIA) de la planta de producción de detergente tipo LABS, documento obligatorio en proyectos que puedan tener efectos significativos sobre el medio ambiente, según viene estipulado en la Ley 21/2013 de 11 de diciembre de 2013. En el artículo 2 de la presente Ley se establecen los procedimientos a seguir para la evaluación ambiental de cualquier plan, programa o proyecto en específico. Según lo expuesto en la Ley 21/2013, se sigue el procedimiento explicado en el Anexo VI. Parte A: Estudio de impacto ambiental. (1)

Por otra parte, durante el diseño del proceso se han considerado las Mejores Técnicas Disponibles (MTD), así como documentos europeos BREF (*Best Available Techniques Reference Documents*). Las MTD hacen referencia a aquellas técnicas más eficaces y avanzadas disponibles en relación con los procesos de producción para prevenir y reducir el impacto ambiental. (2)

## 2 Legislación vigente

El presente proyecto se enmarca en el subsector de los tensioactivos y agentes de superficie, que debido a las sustancias que tratan, se encuentran afectadas por la Directiva 96/82/CE (Directiva Seveso III), sustituida por la Directiva 2012/18/UE. (3)

Aunque la normativa aplicable no establece métodos de referencia para la caracterización de efluentes, se establece un orden de prioridad que establezca un criterio único, por lo que se seguirán primeramente los métodos estándar requeridos en las Directivas de la Unión Europea, seguidamente por las normas UNE, CEN, ISO y por último otras normas internacionales y patentes. (3)

En el presente anexo se aplican una serie de leyes y normativas tanto a nivel nacional como europeo, y que se encuentran resumidas en el *Documento I: Memoria*.

## 3 Descripción del proyecto

### 3.1 Objeto

El objeto del presente proyecto es el diseño de una planta de producción de detergente compuesto por dodecilbencensulfonato de sodio, un conocido surfactante tensioactivo aniónico.

La planta opera en régimen continuo 330 días al año durante 24 horas al día y cuenta con una capacidad de producción inicial de 120.000 t/año, dedicando el resto del año a tareas de limpieza y mantenimiento. El proceso de producción se divide en tres secciones, siendo diferenciadas según la reacción que tenga lugar.

- **Sección 100**

La primera sección consta de la alquilación del benceno con el dodeceno en el reactor de alquilación con un catalizador heterogéneo (ácido tungstofosfórico soportado sobre SiO<sub>2</sub>) en los reactores R-101 A/B. Para ello, las materias primas se mezclan con las corrientes de recirculación en el tanque de mezcla TM-101 y se acondicionan empleando el intercambiador E-101 para introducirlas a 10 bar y 125°C al reactor de alquilación.

Posteriormente, se introduce el efluente del reactor en la secuencia de separación con el objetivo de obtener dodecilbenceno puro en la corriente de colas. Esta separación consta de dos columnas de destilación que operan a vacío, la primera de ellas, T-101, siendo una columna de rectificación operando a 0,2 bar, y la segunda, T-102, siendo una columna de agotamiento que trabaja a 0,1 bar. Tanto la corriente de cabezas de la primera como de la segunda columna se recirculan al tanque de mezcla previo a la entrada al reactor de alquilación, con el objetivo de mejorar el aprovechamiento de los recursos y la eficiencia del proceso.

- **Sección 200**

El objetivo en la segunda sección consiste en obtener ácido dodecilbencensulfónico (LAS) para su posterior neutralización y obtención del producto buscado. El reactor de sulfonación, R-201, es un reactor homogéneo que emplea óleum al 22% para llevar a cabo la reacción de sulfonación del dodecilbenceno. La corriente de salida se dirige al decantador, D-201, que separa la fase acuosa de la orgánica.

- **Sección 300**

En la última sección de la planta tendrá lugar la reacción de neutralización, que se lleva a cabo en el reactor R-301, al cual entra la corriente orgánica procedente del decantador. Se produce por tanto la reacción de neutralización entre el ácido dodecilbencensulfónico y una disolución NaOH al 20% y se lleva a cabo en condiciones de operación de 1,01 bar y 50°C.

### **3.2 Resumen de emisiones**

El objetivo del presente documento se centra en la evaluación del impacto ambiental que supondrá la construcción y funcionamiento de la planta de producción de detergente. Por ello, es necesario evaluar las emisiones al ambiente que provocaría dicha planta.

Se identifican por tanto los principales aspectos ambientales del subsector de tensioactivos y agentes de superficie según el proceso de síntesis. En el presente análisis, se identifican las tres reacciones principales llevadas a cabo, que serán la alquilación, sulfonación y la neutralización para obtener el producto deseado.

- **Emisiones gaseosas**

Esta planta no presenta grandes amenazas en lo que concierne a emisiones al aire en condiciones habituales de operación. Sin embargo, se deben evaluar los impactos ambientales que producirían las emisiones producidas en los reactores en caso de fallo en alguno de ellos. En el reactor de alquilación se pueden generar emisiones gaseosas que contienen benceno o dodeceno no reaccionado, así como residuos de reacciones secundarias formadas por hidrocarburos ligeros.

Por otra parte, en el reactor de sulfonación se pueden generar vapores ácidos formados por  $\text{SO}_3$  y  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , también conocido como niebla ácida. Además, también puede generar emisiones de compuestos orgánicos volátiles (COVs). (4)

Por otra parte, al emplear bombas de vacío para extraer el aire de las columnas de destilación, se generan emisiones de gases no contaminantes, sin presencia significativa de compuestos orgánicos volátiles (COVs). Debido a la posible presencia de hidrocarburos en la corriente de salida del aire de las bombas de vacío se dispone de un medidor de carbono orgánico total para que, en caso de superar los límites, la corriente emitida se derive a una antorcha, donde se produce la combustión.

- **Efluentes líquidos**

Se identifica como uno de los efluentes líquidos principales del proceso la fase acuosa proveniente del decantador. Esta corriente residual es altamente ácida, al estar formada por H<sub>2</sub>O y H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, por lo que es importante su adecuado manejo. Se realiza el estudio de mercado pertinente a dicho subproducto en el *Documento I: Memoria*, y se destina por tanto su uso a la venta, por lo que se almacenará acorde con las medidas de almacenamiento y seguridad de este producto. (4)

Por otra parte, tanto por parte del propio proceso como por los servicios auxiliares, se obtienen corrientes de agua residuales que deben ser tratadas debidamente para o bien su reutilización o bien el vertido controlado.

Por último, se identifica como salida principal del proceso la corriente del producto, que se almacenará de forma adecuada como fase previa al envasado.

- **Generación de residuos sólidos**

Una planta de producción de tensioactivos normalmente casi no genera residuos eliminables, puesto que todo lo que entra reacciona para dar lugar al producto final. (3)

En este proceso no existen corrientes significativas de sólidos residuales, pero se puede identificar como residuo sólido generado durante la fase de explotación el catalizador agotado que no puede ser regenerado en el reactor de alquilación. Por otra parte, se debe tener en cuenta la generación de residuos relacionados con la actividad humana habitual en los edificios de la planta, así como los asociados al envase y etiquetado del producto final.

Además, se identifica como fuente de generación de residuos sólidos los envases defectuosos o que contengan producto no válido. Estos residuos, formados principalmente por plásticos, requieren una gestión adecuada. Se contempla como opción el envío a una empresa especializada en este tipo de tratamientos.

La existencia de una depuradora para el tratamiento de aguas residuales de las instalaciones genera la producción de lodos, que estarán formados por sólidos en suspensión, y por tanto deben ser tratados adecuadamente.

Por otra parte, la principal fuente de residuos sólidos durante las fases de construcción y desmantelamiento consiste en los escombros generados durante las obras.

- **Generación de ruido**

Este tipo de emisión tendrá lugar tanto en la fase de construcción, como en la de explotación y desmantelamiento. En la fase de explotación la principal fuente de ruido consistirá en el conjunto de equipos mecánicos necesarios para el funcionamiento de la planta, formado por bombas, compresores etc. Además, tanto en la fase de construcción como la de desmantelamiento se derivan los principales ruidos por parte del transporte de vehículos pesados y maquinaria de construcción. Por último, el ruido por parte del tráfico rodado y de la actividad humana contribuirá a la contaminación acústica. Se sigue la Ley 37/2003, del 17 de noviembre, en lo referente al cumplimiento de los límites de inmisión sonora para aplicaciones industriales. (5)

### 3.3 Análisis medioambiental de las alternativas

En el *Documento I: Memoria* se ha llevado a cabo un estudio detallado de las alternativas y materias primas disponibles para llevar a cabo el proceso de síntesis del presente proyecto. Por tanto, en este apartado se llevará a cabo un breve análisis comparativo desde el punto de vista medioambiental de las alternativas de producción de LAS a partir del alquilbenceno lineal.

En primer lugar, según lo indicado en las MTD, la principal etapa implicada en el proceso de producción de tensioactivos aniónicos consiste en la sulfonación, en la cual un alquilbenceno reacciona con un agente sulfonante. Se obtendrá dicho alquilbenceno mediante la reacción de alquilación previa. Por último, se lleva a cabo la neutralización del compuesto ácido para dar una sal. Las tres reacciones implicadas se pueden llevar a cabo de diversas formas, por lo que se analizan sus respectivos impactos ambientales.

En primer lugar, cabe destacar el hecho de que existen diversos tipos de detergente en función de los tipos de compuestos que lo formen. En este proyecto se emplea el dodecibencensulfonato de sodio, un surfactante aniónico derivado de un alquilbenceno lineal, también llamados alquil aril sulfonatos, y que ha reemplazado a los alquilbencenos sulfonados ramificados ampliamente debido a su mayor biodegradabilidad. La longitud habitual de estos compuestos consiste en 12 carbonos y, por tanto, el LAS es una mezcla de sulfonatos de alquilbenceno secundarios. Sin embargo, los isómeros existentes en formas estereoisoméricas no han presentado inicialmente diferencias en el comportamiento ambiental, por lo que se trata el compuesto final como una mezcla de isómeros con iguales propiedades. (6, 7)

- **Reacción de alquilación**

Según las MTD para el sector de la química fina orgánica, la alquilación de Friedel-Crafts debe, desde un punto de vista medioambiental, llevarse a cabo con catalizadores distintos a los tradicionales, que son el HF y  $AlCl_3$ . El uso de catalizadores diferentes permite reducir el consumo de agua y la generación de aguas residuales que implican estos procesos. (3)

Se propone el uso de catalizadores que permitan su posterior recuperación, como lo son las zeolitas, arcillas o los heteropoliácidos. De esta forma se disminuye el impacto ambiental, al disminuir el requerimiento energético, hidráulico, así como la disminución de la generación de residuos peligrosos.

- **Reacción de sulfonación**

En el proceso principal de producción de alquilbencenos sulfonados se determina como el método más empleado para su producción la sulfonación con  $SO_3$  y posterior neutralización. (3)

La sulfonación del alquilbenceno con óleum ha sido uno de los métodos más comunes debido al bajo coste que implican los equipos empleados. En esta alternativa el  $SO_3$  se encuentra ya disuelto, lo que reduce los riesgos asociados con el manejo del gas puro. Por tanto, y aunque el manejo de óleum se debe realizar con sumo cuidado para evitar riesgos de corrosión y de posibles emisiones por niebla ácida, su uso está ampliamente adaptado e incluido en los documentos BREF europeos para el sector de la Química Fina Orgánica. Esta guía indica los principales procesos de fabricación, siendo para la producción de LABS la sulfonación con  $SO_3$  y posterior neutralización con NaOH. (7)

El uso de  $SO_3$  en fase gas consiste en una alternativa moderna y de alta eficiencia, reduciendo la emisión de efluentes líquidos. No obstante, el manejo de  $SO_3$  gas requiere sistemas de dosificación

y control muy precisos, presentando un alto riesgo en caso de fuga debido a la formación de niebla ácida altamente corrosiva. Este proceso puede generar aguas madre muy ácidas y producto defectuoso, así como emisiones de  $\text{SO}_3$  y  $\text{SO}_2$ . (3, 8)

- **Reacción de neutralización**

Por último, la reacción de neutralización se puede llevar a cabo con diversos agentes neutralizadores. Se emplean ampliamente en la industria la sosa cáustica ( $\text{NaOH}$ ) y el carbonato sódico ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ), así como otros agentes como las soluciones de amoníaco o las mono- y dietanolaminas.

La utilización de  $\text{NaOH}$  permite una alta reactividad y bajo coste, llevándose a cabo una reacción muy exotérmica que permite la neutralización completa sin generar subproductos tóxicos. Sin embargo, la utilización de carbonato sódico produce una reacción menos agresiva térmicamente, pero la reactividad es baja y se produce  $\text{CO}_2$ , por lo que puede afectar gravemente a las emisiones. (8)

Por último, y debido a su alto coste y dificultad de control, no se considera viable la neutralización mediante amoníaco ni mediante monoetanolaminas.

#### **4 Justificación de la ubicación**

La planta se ha ubicado estratégicamente en el Polígono Petroquímico Norte de Tarragona, dentro del Complejo Petroquímico de Tarragona, entre los municipios de El Morell y La Poble de Mafumet. La elección de la ubicación de la planta se encuentra justificada rigurosamente en el *Documento I: Memoria*, pero cabe destacar que la existencia de grandes multinacionales en la zona de Barcelona y Tarragona confirma la elección geográfica. Dichas empresas han ido adaptando la exigente legislación de seguridad y medioambiente desde su construcción. (3)

En primer lugar, se trata de suelo industrial calificado para uso petroquímico, por lo que no se estaría ocupando nuevo suelo natural, lo que reduce el impacto en el medioambiente. Por otra parte, se ha escogido dicha ubicación debido a la red de infraestructuras existentes que permiten transportar las materias primas del proyecto, por lo que el impacto que causaría la construcción de nuevas vías de transporte se reduce.

Una ventaja clave de esta ubicación es la proximidad a la refinería de Repsol, que proporciona benceno por oleoducto, lo que representa la eliminación de emisiones y riesgos que conlleva el transporte terrestre de esta sustancia. Asimismo, se reduce el consumo de combustibles fósiles por tráfico rodado.

Por último, siendo la ubicación escogida una zona industrial, se minimiza el impacto sobre poblaciones cercanas, al mantener una distancia de seguridad respecto a núcleos residenciales y zonas naturales protegidas.

## 5 Inventario ambiental e identificación de impactos

Se lleva a cabo la elaboración de un inventario ambiental y la descripción de los procesos e interacciones ambientales clave del proceso, según dicta la Ley 21/2013. (1)

### 5.1 Medio físico

El estudio del clima en Tarragona ha sido llevado a cabo rigurosamente en el *Documento I. Memoria*, y por tanto se resume en este apartado los datos más relevantes.

#### 5.1.1 Temperaturas

La ciudad de Tarragona presente un clima mediterráneo, característicos por experimentar inviernos suaves y veranos calurosos. La temperatura media de los meses más fríos es de 10°C, mientras que la de los meses más cálidos es de 25,5°C. (9)

#### 5.1.2 Hidrología

En Tarragona las precipitaciones fluctúan en función del mes, siendo octubre el mes en el que más llueve y julio el más seco. Se caracterizan por su irregularidad, con periodos de precipitaciones muy abundantes seguidos de periodos secos. Los meses de sequía requieren una planificación acorde en lo que respecta al consumo de los recursos hídricos. (9)

#### 5.1.3 Calidad del aire

Respecto a la calidad del aire, se siguen los criterios impuestos en la Ley 34/2007, de 15 de noviembre, que sustituye a la anterior Ley 38/1972, de 22 de diciembre, y que aborda la gestión de la calidad del aire y protección de la atmósfera. En dicha ley se establecen los valores límite para contaminantes atmosféricos y los mecanismos de control por parte de las autoridades. (10)

En cuanto a la mejora de la calidad del aire, el Real Decreto 102/2011, de 29/01/2011 y modificado por última vez el 25/01/2023, tiene como objeto *'Definir y establecer objetivos de calidad del aire, de acuerdo con el anexo III de la Ley 34/2007, con respecto a las concentraciones de dióxido de azufre, dióxido de nitrógeno y óxidos de nitrógeno, partículas, plomo, benceno, monóxido de carbono, ozono, arsénico, cadmio, níquel y benzo(a)pireno en el aire ambiente.'* (11)

El Índice Nacional de Calidad del Aire informa sobre el estado de la calidad del aire en diferentes zonas del territorio español. Este índice evalúa la calidad del aire para los siguientes compuestos: dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>), dióxido de nitrógeno y óxidos de nitrógeno (NO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>), partículas (PM10 y PM2,5), plomo (Pb), benceno (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>), monóxido de carbono (CO), arsénico (As), cadmio (Cd), níquel (Ni), benzo(a)pireno (B(a)P) y ozono (O<sub>3</sub>). Se obtienen, por tanto, los datos de calidad del aire en la zona de Tarragona de los informes proporcionados por el Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, y se muestran en la Figura 1. (12)

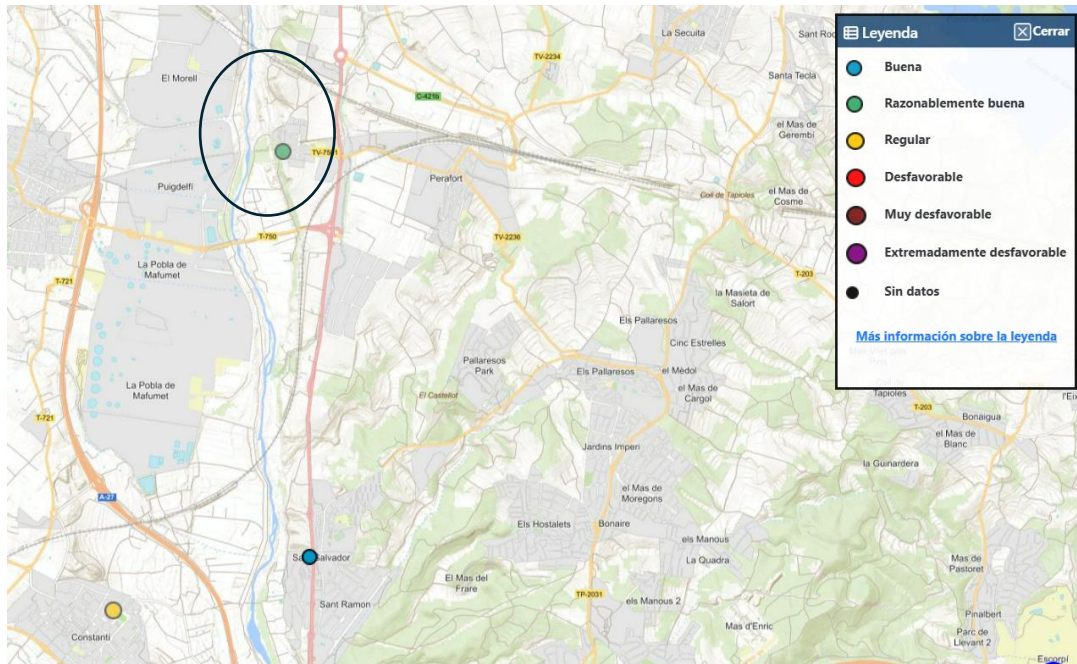


Figura 1. Representación del ICA en Tarragona. Fuente:(12)

Aunque el índice de calidad de las poblaciones cercanas al polígono industrial del norte de Tarragona muestre estándares de buena y razonablemente buena, se ha determinado por el Observatorio de la Calidad del Aire resultados en 2024 que muestran una elevada concentración de 1,3-Butadieno muy cerca del polígono norte, llegando a alcanzar una concentración de 2,7 microgramos por metro cúbico. Se han realizado estudios para determinar la presencia de químicos en el aire y se ha analizado la presencia de 75 compuestos orgánicos volátiles en quince poblaciones de los alrededores de los polígonos petroquímicos norte y sur. (13)

Por otra parte, se analiza también la presencia del benceno en la atmósfera, materia prima principal en el presente proyecto y que la ley establece en concentraciones medias anuales máximas de 5 microgramos por metro cúbico.

#### 5.1.4 Hidrogeología

La zona de implantación de la planta se encuentra influenciada por una red hidrográfica característica del litoral mediterráneo. Se destaca la presencia del río Francolí, que atraviesa el Municipio de Tarragona para desembocar en el mar Mediterráneo.

Respecto a las explotaciones de las masas de agua subterránea, la Generalitat de Catalunya ha desarrollado un plan de gestión de la cuenca fluvial de Cataluña, con el objetivo de determinar el índice de explotación de los recursos hidráulicos disponibles. Si este valor es mayor que 0,80 implica la sobreexplotación de la zona, optando por medidas de control. (14)

Masa	Toponimia	Recurso subterráneo disponible año normal (hm <sup>3</sup> /año)	Recurso subterráneo disponible año seco (hm <sup>3</sup> /año)	Extracciones				Balance año normal (hm <sup>3</sup> /año)	Balance año seco (hm <sup>3</sup> /año)	Índice de extracción en año normal	Índice de extracción en año seco	
				Aléctric (hm <sup>3</sup> /año)	Industriales (hm <sup>3</sup> /año)	Agrícolas (hm <sup>3</sup> /año)	Generales (hm <sup>3</sup> /año)					TOTALES (hm <sup>3</sup> /año)
20	Bloc del Gaia-Sant Martí Sarroca-Bonastre	8,7	3,2	2,16	0,01	0,92	0,13	3,23	5,5	0,0	0,4	1,0
21	Detritic neogen del Baix Penedés	7,4	4,5	3,05	0,79	1,00	0,12	4,96	2,5	-0,5	0,7	1,1
22	Al·luvials del Penedés i aqüífers locals	6,4	3,8	1,43	0,13	0,21	0,01	1,77	4,6	2,1	0,3	0,5
23	Garraf	32,1	19,3	10,72	0,96	2,50	0,17	14,35	17,8	4,9	0,4	0,7
24	Baix Francolí	29,3	17,6	0,63	1,83	14,60	0,25	17,31	12,0	0,3	0,6	1,0
25	Alt Camp	24,4	14,6	2,39	0,35	6,81	0,40	9,95	14,5	4,7	0,4	0,7
26	Baix Camp	34,0	20,4	4,73	0,78	25,26	0,46	31,24	2,8	-10,8	0,9	1,5
27	Prades-Alt Francolí	16,2	7,3	1,08	0,13	4,94	0,27	6,43	9,8	0,9	0,4	0,9
28	Lliveria-Prades meridional	13,8	6,9	1,25	0,05	8,23	0,17	9,70	4,1	-2,8	0,7	1,4
32	Fluviodeltaic del Fluvià-Muga	23,0	13,4	2,81	0,76	16,45	0,47	20,49	2,5	-7,1	0,9	1,5
33	Fluviodeltaic del Baix Ter	27,0	16,2	11,02	0,65	12,50	0,25	24,43	2,5	-8,3	0,9	1,5
34	Al·luvials de l'alta i mitjana Tordera	12,5	7,5	1,32	2,20	0,19	0,02	3,73	8,8	3,8	0,3	0,5
35	Al·luvials de la baixa Tordera i delta	30,3	18,2	20,63	1,90	5,20	0,02	27,75	2,5	-9,6	0,9	1,5
36	Baix Besòs i Pla de Barcelona	25,0	15,6	0,52	16,27	0,04	0,00	16,83	8,2	-1,8	0,67	1,12
37	Cubeta d'Àbrera	21,8	13,1	12,11	4,17	0,22	0,00	16,50	5,3	-3,4	0,8	1,3
38	Cubeta de Sant Andreu	7,4	4,5	1,82	3,76	0,04	0,00	5,62	1,8	-1,2	0,8	1,3
39	Vall Baixa i Delta del Llobregat	49,9	29,1	32,40	9,63	1,09	0,03	43,15	6,8	-14,0	0,9	1,5
55	l'Ametlla de Mar- el Perelló	4,0	1,6	0,75	0,02	2,30	0,04	3,11	0,9	-1,5	0,8	1,9
<b>Total</b>		<b>1093,6</b>	<b>708,7</b>	<b>161,21</b>	<b>64,15</b>	<b>173,83</b>	<b>9,44</b>	<b>408,6</b>	<b>684,9</b>	<b>300,0</b>		

Figura 2. Datos sobre la explotación de masas subterráneas de agua en El Morell. Fuente: (14)

Según el Anexo IV del Plan de Gestión de la Cuenca Fluvial de Cataluña el polígono se sitúa en la zona baja del río Francolí, y se observan en la Figura 2 valores de explotación para usos industriales superior al umbral recomendado. Por tanto, se debe realizar un seguimiento y control del uso de los recursos hidráulicos disponibles.

## 5.2 Medio biológico

El Estado de la biodiversidad en España decreta que en Cataluña existen 27 especies en peligro crítico y 84 en peligro, siendo el grupo de los artrópodos el más amenazado. (15)

### 5.2.1 Flora

Entre las especies de flora que cuentan con protección legal en la provincia de Tarragona se encuentran algunas clasificadas como en peligro o vulnerables según el Decreto 172/2022. Aunque en las proximidades del polígono industrial no existen hábitats naturales relevantes, se han identificado la presencia de algunas especies relevantes como *Limonium gibertii* o *Delphinium bolosii*. (16)

### 5.2.2 Fauna

En primer lugar, se debe distinguir entre algunos conceptos clave en lo referente a la clasificación de las especies de fauna salvaje autóctona en la comunidad de Cataluña, que se encuentra presente en el anexo de la Ley de protección de los animales, del Decreto Legislativo 2/2008, de 15 de abril. (17)

Se han identificado en la zona de Tarragona, empleando el visor ambiental de la Generalitat, la presencia de especies sensibles como el murciélago (*Miniopterus schreibersii*) o el cangrejo de río autóctono (*Austroptamobius pallipes*). Además, se establecen planes de recuperación de diversas aves, como la *Aphanius Iberus* o el buitres-águila barbado (*Gypaetus Barbatius*). (16)

En la siguiente Figura 3 se observa un modelo de distribución de especies sensibles en el entorno del municipio de El Morell, donde los colores representan la probabilidad de presencia de fauna protegida. La ubicación seleccionada para el proyecto se encuentra principalmente representada en tonos azulados y verdes, lo que indica una baja o moderada probabilidad de presencia de

especies protegidas. Por tanto, se considera que la implantación del proyecto en la ubicación escogida no supone un riesgo elevado para la biodiversidad. (16)

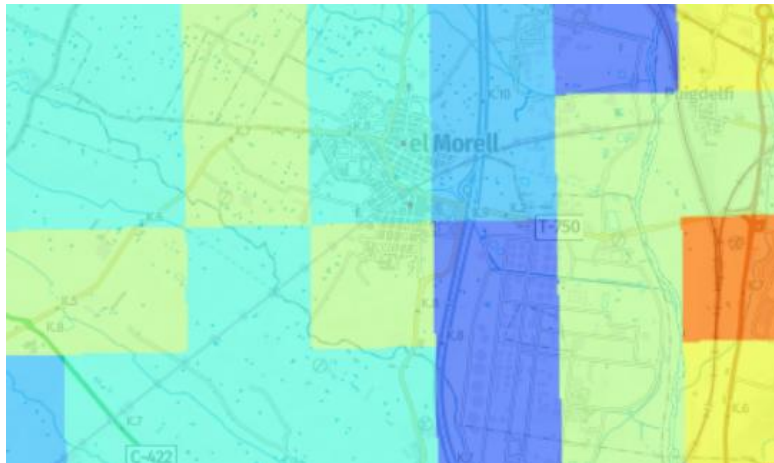


Figura 3. Representación por colores de la presencia de especies protegidas. Fuente: (16)

### 5.2.3 Red Natura 2000

La Red Natura 2000 es una red ecológica europea de conservación de la biodiversidad, que muestra los hábitats protegidos de una zona. Su uso es de elevada importancia para asegurar la supervivencia a largo plazo de especies y hábitats en Europa. (18)

En España se clasifican diversas zonas biogeográficas; Atlántica, Alpina, Macaronésica y Mediterránea, en las cuales se identifican 118 tipos de hábitats y más de 380 especies tanto en el territorio marino como terrestre. La Comunidad de Cataluña cuenta con una superficie terrestre de 963.802,51 ha, del cual el 29,93% se encuentra protegido. (19, 20)

Se muestra en la Figura 4 un mapa de la zona, donde los espacios en verde indican las áreas incluidas en la Red Natura 2000. Como se puede observar, la ubicación prevista para la planta se encuentra alejada de estos espacios protegidos, por lo que no se ve afectada directamente por dicha red ni por sus restricciones asociadas. (21)



Figura 4. Red Natura 2000 en la zona de Tarragona. Fuente: (21)

## 5.3 Medio socioeconómico

### 5.3.1 Población

El emplazamiento de la planta requería un estudio preliminar de la disponibilidad de mano de obra, por lo que se determinó en el *Documento I: Memoria* que la población en Tarragona en 2024 alcanzaba los 141.018 habitantes.

La construcción de una planta de producción química influirá positivamente en el empleo de la zona pertinente. Se obtienen datos recientes del desempleo en los municipios implicados en la implantación, tratándose de El Morell y La Pobla de Mafumet.

Por tanto, el municipio de El Morell registraba en 2024 una población de 3.851 habitantes, y registraba una tasa de paro de un 8,30% en abril de 2025. Por otra parte, la Pobla de Mafumet registraba una población de 4.127 habitantes y una tasa de paro del 10,42% en abril de 2025. (22–24)

La proximidad del polígono a otros municipios cercanos, así como la facilidad de desplazamiento desde el centro urbano de Tarragona, provoca un impacto positivo en la generación de trabajo en la zona.

### 5.3.2 Economía

La ubicación de la planta se sitúa en un entorno industrial altamente consolidado, con una fuerte especialización en el sector petroquímico. Según datos recientes del Instituto de Estadística de Cataluña (IDESCAT), el municipio de Tarragona registró en 2024 un VAB de 829,6 millones de euros en el sector industrial, del cual 510,4 millones correspondían al sector de la alimentación, textil, madera, artes gráficas, química y caucho. (22)

Estos datos reflejan un tejido industrial fuertemente relacionado con la química fina, lo que representa un papel central en la generación de empleo y de valor económico.

## 5.4 Paisaje y patrimonio cultural

De acuerdo con lo establecido en la Ley 42/2007, de 13 de diciembre, del Patrimonio Natural y de la Biodiversidad, se deben considerar los posibles efectos del proyecto sobre el paisaje y patrimonio cultural, así como la relación con espacios naturales protegidos en la Red Natura 2000. (25)

Como ya se ha determinado en los apartados anteriores, la zona escogida no se encuentra cerca de espacios protegidos por la Red Natura 2000 y, siendo la zona un polígono industrial, no supondrá grandes impactos visuales ni paisajísticos.

## 6 Identificación y valorización de impactos ambientales

En este apartado se realiza la identificación y evaluación de los impactos ambientales asociados a las distintas etapas del proyecto. Se estudian las acciones que tienen lugar durante la construcción y existencia del proceso, así como la demolición cuando proceda. Se identifican, por tanto, las tres fases del proyecto a analizar:

- Fase de construcción: Comprende las acciones necesarias para la edificación y puesta en marcha de la planta.

- Fase de explotación: Comprende las actividades desarrolladas durante el funcionamiento habitual de la planta.
- Fase de desmantelamiento: Acciones previstas para el cierre definitivo de la planta y su desmantelamiento.

Se emplea para ello la Matriz de Leopold, que consiste en un cuadro de doble entrada, donde las filas representan los factores ambientales y en las columnas se encuentran las acciones impactantes. Para emplear la matriz, se lleva a cabo la valorización de los impactos ambientales teniendo en cuenta dos variables; la magnitud del impacto (M), que valora el impacto o alteración potencial, y la importancia (I), que da el peso relativo del potencial del impacto. En la valoración de la magnitud un signo + implica un efecto positivo y un - sería uno negativo, mientras que el rango de valores irá de 1-5, siendo 1 muy baja magnitud o sin importancia y 5 alta magnitud e importancia.

ACCIONES DEL PROYECTO		FASE DE CONSTRUCCIÓN						FASE DE EXPLOTACIÓN						FASE DE DESMANTELAMIENTO						N° INDICADORES POSITIVOS	N° INDICADORES NEGATIVOS	IMPACTO POR SUBCOMPONENTE	IMPACTO POR COMPONENTES	IMPACTO TOTAL DEL PROYECTO																	
		Acondicionamiento del terreno		Generación de residuos		Cimentación y estructuras		Instalaciones de obra		Tránsitos de vehículos pesados		Ocupación del terreno		Depuración de aguas residuales		Emisiones a la atmósfera		Tránsito de vehículos							Mantenimiento		Tratamiento de residuos		Demolición		Generación de escombros		Restauración del terreno								
FACTORES AMBIENTALES		M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I												
MEDIO FÍSICO	SUELO	Tasa de erosión	-2	2			-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-2	2									-2	2	-2	1			-3	8	-14	31							
		Estructuras	-3	3	-2	3	-2	2	-1	2	-1	1	-1	1																	-3	9	-28								
	ATMOSFERA	Calidad del aire			-1	2									-2	1	-3	4	-3	2					-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		1	-2	8	-3			
		Ruido	-2	1																																-2	6	-9			
	AGUA	Turbidez																																		-2	3	10			
		Toxicidad																																		-2	4	10			
	PAISAJE	Calidad	-1	2	-1	2	-1	1	-1	2	-1	2	-1	2	-3	2																				-1	8	-8			
		Estructura y composición	-1	2	-1	2																														-2	2	-1			
	BIOLÓGICO	FLORA																																				-3	3	-6	
		FAUNA																																				-1,5	3	-2	
SOCIOECONÓMICO	POBLACIÓN																																			-2	2	-1			
	TERRITORIO																																			-3	1	-2			
	ECONOMÍA																																			8	0	105			
CULTURA	Sitio Arqueológico																																			-3	0	0			
INDICADORES con MAGNITUD POSITIVA				0	1	1	1	1	0	3	0	1	1	2	2	1	6																			3,5					
INDICADORES con MAGNITUD NEGATIVA				6	3	4	5	4	4	1	5	3	2	3	6	4	0																					46			
SUMA DE PRODUCTOS (M x I)				-16	10	5	-6	-13	35	-25	3	10	4	6	-2	20																								31	

Figura 5. Matriz de Leopold para la planta de producción de detergente tipo LABS. Fuente: Elaboración propia.

Como se observa en la Figura 5, La Matriz de Leopold da como resultado un impacto global del proyecto de +31, lo que indica un balance ambiental global favorable siempre que se apliquen las medidas preventivas, correctoras y de vigilancia comprendidas en este estudio.

### 6.1 Fase de construcción

Entre los impactos más destacados se encuentran la alteración del suelo por movimientos de tierra, emisión de polvo y ruido por la actividad de la obra. No obstante, al tratarse de una zona industrial ya consolidada, estos impactos se consideran localizados y reversibles. Como efecto positivo relevante, se destaca la generación de empleo temporal.

## 6.2 Fase de explotación

Se destaca como la etapa con mayor actividad e impacto, al implicar el funcionamiento continuo del proceso. Los principales impactos negativos se centran en la emisión de contaminantes a la atmósfera, el incremento de tráfico rodado, la generación de residuos sólidos y el consumo de recursos hídricos. Esta fase genera un impacto positivo en lo que implica la creación de empleo estable y cualificado, así como una elevada integración en la infraestructura existente, reduciendo así la necesidad de la creación de nuevas infraestructuras y servicios.

## 6.3 Fase de desmantelamiento

La fase final del proyecto implica la retirada de equipos, estructuras y limpieza del terreno. La generación de impactos en esta fase es similar a los de la fase de construcción, destacando la emisión de polvo, el tráfico de maquinaria pesada y la generación de residuos. Esta fase provoca impactos positivos, ya que se recupera un área previamente ocupada por las instalaciones, y además se crea empleo de manera temporal.

## 7 Medidas preventivas y correctoras

Las medidas preventivas y de minimización de impactos ambientales se implementan desde el diseño inicial del proceso, mediante la optimización de recursos, el control de emisiones y la implementación de tecnologías adecuadas. La planta operará bajo procedimientos de trabajo establecidos que aseguren la seguridad tanto de los trabajadores como medioambiental. (3)

### 7.1.1 Medidas en la fase de construcción

En lo referente a la prevención de efectos negativos en la calidad del aire, se deben controlar las emisiones de polvo y gases de combustión. Se realizarán riegos periódicos sobre zonas específicas y los escombros generados que sean transportados en camiones serán tapados con lonas para prevenir la formación de polvo.

Con respecto a la protección del sistema hidrológico, toda acción relacionada con el lavado de maquinaria se llevará a cabo en las zonas adecuadas para ello, diseñadas para evitar la contaminación de suelos y cursos de agua.

Como ya se ha adelantado previamente, se debe cumplir la normativa vigente en lo que respecta a la generación de ruido. Además, se comprobará que todos los vehículos utilizados en el proceso constructivo cuenten con la ITV vigente y el CE correspondiente, con el objetivo de reducir las emisiones sonoras.

### 7.1.2 Medidas en la fase de explotación

Durante la operación habitual de la planta, se aplicarán medidas destinadas a asegurar la sostenibilidad del proceso, cumpliendo asimismo con la normativa vigente.

La gestión de las aguas residuales generadas deberá cumplir lo dispuesto en el Real Decreto 849/1986, de 11 de abril, por el que se aprueba el Reglamento del Dominio Público Hidráulico. Por otra parte, se implementarán silenciadores en los equipos que lo requieran, con el objetivo de reducir el ruido ambiental. (26)

La gestión de emisiones a la atmósfera se basará en el análisis de las condiciones operativas y de los compuestos involucrados en el proceso. Se seguirá lo dispuesto en el Directiva 2010/75/UE, de 24 de noviembre de 2010, en relación con los compuestos orgánicos volátiles (COVs). Por

tanto, se emplea una antorcha para el tratamiento de las corrientes gaseosas procedentes de las bombas de vacío en caso de que superen los valores límite. (3)

En lo referente a la generación de polvo, al tratar con materias primas en este estado, se llevará a cabo su tratado en sistemas y equipos cerrados con venteos controlados, para evitar la emisión al entorno del polvo del proceso. En cuanto a la protección del suelo, se dispondrá de base de asfalto recubierto de material impermeable sellado, así como cubetos de retención en el parque de tanques. Además, se instalarán rejillas donde exista riesgo de derrame. (3)

Durante la operación de la planta se generan residuos, tanto de origen auxiliar como del propio proceso. Estos residuos deberán ser gestionados a través de sistemas externos especializados, con su transporte a cargo de operadores autorizados. Además, se llevarán a cabo revisiones periódicas de los equipos e instalaciones, con el fin de asegurar un funcionamiento eficiente, prevenir incidentes y garantizar la calidad del producto final. (3)

Se define el concepto de economía circular como *'un modelo de producción y consumo que implica compartir, alquilar, reutilizar, reparar, renovar y reciclar materiales y productos existentes todas las veces que sea posible para crear un valor añadido.'* El aprovechamiento de recursos es uno de los objetivos más importantes en una planta de producción, por lo que se implantarán en la medida de lo posible tecnologías verdes, con el objetivo de minimizar el impacto negativo en el medio ambiente y promover la sostenibilidad. (27)

### **7.1.3 Medidas en la fase de desmantelamiento**

Dado que las actividades propias de la fase de desmantelamiento presentan características similares a las de construcción, se aplicarán las mismas medidas recogidas en el apartado 7.1.1 Medidas en la fase de construcción. Adicionalmente, se añade un plan específico de descontaminación, gestión de residuos peligrosos y restauración del entorno.

### **7.1.4 Medidas generales**

Durante todas las fases del proyecto se llevará a cabo una serie de medidas generales que contribuyan a la protección ambiental y mejora continua del sistema. Se requiere de personal cualificado para los trabajos implicados, por lo que se llevarán a cabo planes específicos de formación del personal.

## **8 Programa de vigilancia ambiental**

Por último, en el estudio de impacto ambiental es necesaria la elaboración de un plan de vigilancia ambiental, según se expone en la Ley 21/2013, de 11 de diciembre. Este programa incluye las medidas previstas para el seguimiento del cumplimiento de las indicaciones y medidas previstas para prevenir, corregir y, en caso necesario, compensar, incluidas en el estudio de impacto ambiental. (1)

Los objetivos del PVA consisten en la vigilancia ambiental durante la fase de obras y el seguimiento ambiental durante la fase de explotación. Durante la fase de obras, la vigilancia consiste en verificar que se están aplicando correctamente las medidas preventivas y correctoras previamente definidas. Por otra parte, durante la fase de explotación se comprueba que el funcionamiento de la planta se ajusta a los parámetros ambientales establecidos por la normativa.

Por tanto, de acuerdo con lo establecido, se llevará a cabo el programa de vigilancia ambiental por una empresa externa que asegure la confiabilidad y posibles infracciones en lo que a ello respecta.

## 9 Documento de síntesis

El presente Estudio de Impacto Ambiental (EIA) se elabora conforme a la Ley 21/2013, de 9 de diciembre, con el objetivo de identificar, valorar y minimizar los impactos derivados de la construcción, operación y desmantelamiento de una planta de producción de detergente tipo LABS (dodecibencensulfonato de sodio), ubicada en el Polígono Petroquímico Norte de Tarragona. La instalación cuenta con una capacidad de 120.000 t/año y opera en tres etapas principales; alquilación, sulfonación y neutralización. El proceso incorpora tecnologías eficientes tanto en el tratamiento de residuos como en los procesos de fabricación.

Los principales impactos identificados en la planta se corresponden con las emisiones a la atmósfera de compuestos orgánicos volátiles (COVs), la generación de efluentes ácidos y el consumo de agua. Para mitigar el impacto ambiental se proponen medidas para el tratamiento de emisiones y residuos.

La ubicación elegida reduce el impacto sobre el territorio, ya que se trata de suelo de uso industrial, próximo a los suministradores de materias primas y alejado de zonas protegidas. Además, la existencia de infraestructuras en el área reduce el impacto en el paisaje que causaría la construcción de estas.

Además, se proponen una serie de medidas a llevar a cabo en las diferentes fases del proyecto, así como un Programa de Vigilancia Ambiental (PVA), que asegura el cumplimiento de las medidas y normativa pertinentes.

En conclusión, el proyecto se considera ambientalmente viable siempre que se apliquen las medidas comprendidas en este estudio.

En Santiago de Compostela, a 30 de junio de 2025

Las autoras del proyecto,

Antía Gándara Vieito

Noelia López García

Lucía Pardilla Fraguas

## 10 Bibliografía

1. JEFATURA DEL ESTADO. Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental. En línea. 11 de diciembre de 2013. Disponible en: <https://www.boe.es/buscar/pdf/2013/BOE-A-2013-12913-consolidado.pdf> [consulta: 15-06-2025].
2. MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO. Mejores Técnicas Disponibles. En línea. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/sostenibilidad-industrial/prevencion-y-control-integrados-de-la-contaminacion-ippc/mejores-tecnicas-disponibles-mtd.html> [consulta: 27-06-2025].
3. MINISTERIO DE MEDIO AMBIENTE. Guía de Mejores Técnicas Disponibles en España del Sector de Química Fina Orgánica. 2006.
4. FALCKE, Heino, HOLBROOK, Simon, CLENAHAN, Iain, LÓPEZ CARRETERO, Alfredo, SANALAN, Teoman, BRINKMANN, Thomas, ROTH, Joze, ZERGER, Benoit, ROUDIER, Serge e DELGADO SANCHO, Luis.. Best Available Techniques (BAT) Reference Document for the Production of Large Volume Organic Chemicals. 2017.
5. JEFATURA DEL ESTADO BOE-A-2003-20976 Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido. Disponible en: <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-2003-20976> [consulta: 15-06-2025].
6. DE OUDE, N.T. (ed.). The Handbook of Environmental Chemistry. 1992.
7. KENT, James A. Handbook of Industrial Chemistry and Biotechnology. 12ª ed. 2012.
8. DE GROOT, W.Herman. Sulphonation Technology in the Detergent Industry. 1ª ed. 1991.
9. CLIMAS Y VIAJES. Clima en Tarragona: temperatura, lluvia, cuándo ir. En línea. [consulta 21-06-2025 ]. Disponible en: <https://www.climasyviajes.com/clima/espana/tarragona>
10. España. Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera. Boletín Oficial del Estado, 16 de noviembre de 2007, núm. 275. Disponible en: <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-2007-19744>. [consulta: 18-06-2025]
11. España. Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire. Boletín Oficial del Estado, 29 de enero de 2011, núm. 25. Disponible en: <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-2011-1645>. [consulta: 18-06-2025]
12. MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO. Índice Nacional de Calidad del Aire. En línea. Disponible en: <https://ica.miteco.es/>. [Consulta: 18-06-2025]
13. DIARI MÉS. La calidad del aire mejora en Tarragona, pero el 1,3-butadieno sube en varios municipios. En línea. Disponible en: [https://www.diarimes.com/es/camp-tarragona/250407/dispara-presencia-1-3-butadieno-morell-constanti-2024-observatorio-calidad-aire\\_174024.html](https://www.diarimes.com/es/camp-tarragona/250407/dispara-presencia-1-3-butadieno-morell-constanti-2024-observatorio-calidad-aire_174024.html). [Consulta: 18-06-2025]
14. AGENCIA CATALANA DEL AGUA. GENERALITAT DE CATALUNYA. Anexo I.
15. BSM. 111 especies de Cataluña se encuentran en peligro de extinción |. En línea. Disponible en: <https://bsmsa.cat/es/notas/111-especies-de-cataluna-se-encuentran-en-peligro-de-extincion>. [Consulta: 19-06-2025]

16. GENERALITAT DE CATALUNYA. Cartografía. Medio Ambiente y Sostenibilidad. Disponible en: [https://mediambient.gencat.cat/es/05\\_ambits\\_dactuacio/patrimoni\\_natural/flora-autoctona-protegida/comissio\\_assessora\\_conservacio\\_flora\\_catalunya/](https://mediambient.gencat.cat/es/05_ambits_dactuacio/patrimoni_natural/flora-autoctona-protegida/comissio_assessora_conservacio_flora_catalunya/). [Consulta: 21-06-2025]
17. GENERALITAT DE CATALUNYA. Plantilla interna. Medio Ambiente y Sostenibilidad. En línea. Disponible en: <https://mediambient.gencat.cat/es/dades-documentacio/estadistica/indicadors-i-estadistiques/fauna/>. [Consulta: 19-06-2025]
18. MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO. Red Natura 2000. En línea. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000.html>. [Consulta: 19-06-2025]
19. MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO. La Red Natura 2000 en España. En línea. Disponible en: [https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000/rn\\_espana.html](https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000/rn_espana.html). [Consulta: 19-06-2025]
20. MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO. Zonas de Especial Conservación (ZEC) y Lugares propuestos de Importancia Comunitaria (LIC). En línea. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000/lic.html>. [Consulta: 19-06-2025]
21. AGENCIA EUROPEA DE MEDIO AMBIENTE. Natura 2000 Viewer. En línea. Disponible en: <https://natura2000.eea.europa.eu/>. [Consulta: 20-06-2025]
22. IDESCAT. El municipio en cifras. el Morell (Tarragonès). En línea. Disponible en: <https://www.idescat.cat/emex/?id=430957&lang=es>. [Consulta: 18-06-2025]
23. DATOSMACRO.COM. Paro por municipios: Morell, El - (Tarragona) 2025. En línea. Disponible en: <https://datosmacro.expansion.com/paro/espana/municipios/cataluna/tarragona/morell-el>. [Consulta: 18-06-2025]
24. DATOSMACRO.COM. Paro por municipios: Pobla de Mafumet, La - (Tarragona) 2025. En línea. Disponible en: <https://datosmacro.expansion.com/paro/espana/municipios/cataluna/tarragona/pobla-de-mafumet-la>. [Consulta: 18-06-2025]
25. España. Ley 42/2007, de 13 de diciembre, del Patrimonio Natural y de la Biodiversidad. Boletín Oficial del Estado, 14 de diciembre de 2007, núm. 299. Disponible en: [https://www.boe.es/diario\\_boe/txt.php?id=BOE-A-2007-21490](https://www.boe.es/diario_boe/txt.php?id=BOE-A-2007-21490). [Consulta: 21-06-2025]
26. España. Real Decreto 849/1986, de 11 de abril, por el que se aprueba el Reglamento del Dominio Público Hidráulico, que desarrolla los títulos Preliminar, I, IV, V, VI y VII de la Ley 29/1985, de 2 de agosto, de Aguas. Boletín Oficial del Estado, 30 de abril de 1986, núm. 103. Disponible en: <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-1986-10638>. [Consulta: 20-06-2025]
27. PARLAMENTO EUROPEO. Economía circular: definición, importancia y beneficios. En línea. Disponible en: <https://www.europarl.europa.eu/topics/es/article/20151201STO05603/economia-circular-definicion-importancia-y-beneficios>. [Consulta: 20-06-2025]

DOCUMENTO V  
PRESUPUESTO

## Índice

1	Introducción.....	2
2	Estimación del coste de los equipos .....	2
2.1	Estimación del coste mediante el método factorial.....	2
2.2	Costes por proveedores.....	4
3	Estimación del coste total de capital.....	5
3.1	Capital fijo .....	5
3.1.1	ISBL (Límites de la Batería Interna) .....	5
3.1.2	OSBL (Límites de la Batería Externa).....	10
3.1.3	Costos de ingeniería, construcción y por contingencias.....	10
3.1.4	Gastos iniciales de puesta en marcha .....	10
3.2	Fondo de maniobra .....	11
3.3	Coste total de capital.....	11
4	Partidas presupuestarias.....	11
5	Presupuesto total.....	12
6	Bibliografía.....	13

## 1 Introducción

El principal objetivo de la construcción de una planta química es el de generar ganancias, y por tanto es esencial estimar la inversión del proyecto como paso previo a la evaluación de la rentabilidad.

La inversión de capital fijo incluye todos los costos necesarios para diseñar, construir e instalar una planta, y lo conforman los costos del equipo e instalación (ISBL), los costos de las mejoras necesarias en infraestructuras existentes (OSBL), los costos relacionados con ingeniería y los costos por contingencias, que implican un margen para cubrir imprevistos. (1)

## 2 Estimación del coste de los equipos

La estimación del coste de los equipos es un paso clave en el diseño y evaluación económica de proyectos industriales, impactando directamente en la viabilidad económica del mismo. En este apartado se estimará el coste que suponen los equipos del presente proyecto, siguiendo los criterios técnicos expuesto en la bibliografía. (1)

### 2.1 Estimación del coste mediante el método factorial

En este primer apartado se calcula el coste asociado a los equipos del proyecto. En la ecuación [1] se muestra la correlación para obtener una estimación del coste de los equipos en función del tipo y tamaño. (1)

$$C_e = a + b \cdot S^n \quad [1]$$

Donde:

- $C_e$ : Coste de la adquisición del equipo.
- a, b: Constantes específicas para cada tipo de equipo.
- S: Parámetro relacionado con el tamaño.
- n: Exponente que refleja la economía de escala del equipo.

Se muestra en la Tabla 1 los exponentes necesarios para determinar el coste de los equipos pertinentes en el presente proyecto, así como el rango de utilización de estos.

Tabla 1. Parámetros para calcular el coste de los equipos. Fuente: (1)

Equipo	Unidades de tamaño, S	$S_{inferior}$	$S_{superior}$	a	b	n
Agitador	Potencia, kW	5	75	17.000	1.130	1,05
Bandeja de platos perforados	Diámetro, m	0,5	5	130	440	1,8
Intercambiador de carcasa y tubos en U	Área, m <sup>2</sup>	10	1.000	28.000	54	1,2
Intercambiador doble tubo	Área, m <sup>2</sup>	1	80	1.900	2.500	1
Caldera termosifón	Área, m <sup>2</sup>	0,5	100	61.500	32.500	0,8
Recipientes a presión, verticales, 304 ss	Masa de la carcasa, kg	120	250.000	17.400	79	0,85
Bomba	Caudal, L/s	0,2	126	8.000	250	0,9

Tabla 1. Continuación. Parámetros para calcular el coste de los equipos. Fuente (1)

Motor de la bomba	Potencia, kW	1	2.500	-1.100	2.100	0,6
Reactor con camisa agitado, 304 ss	Volumen, m <sup>3</sup>	0,5	100	61.500	32.500	0,8
Tanque de almacenamiento de techo flotante	Volumen, m <sup>3</sup>	10	4.000	5.800	1.600	0,7

Debido a lo general que es esta correlación, se deben aplicar una serie de factores de corrección, que tienen en cuenta el material de construcción y la temperatura y presión de operación. Se emplea para ello la ecuación [2]. (2)

$$C_{e,f} = C_e \cdot f_m \cdot f_p \cdot f_T \quad [2]$$

Donde:

- $C_{e,f}$ : Coste del equipo aplicando los factores correspondientes.
- $f_m$ : Factor de corrección en función del material de construcción.
- $f_p$ : Factor de corrección en función de la presión de operación.
- $f_T$ : Factor de corrección en función de la temperatura de operación.

En el *Anexo II: Cálculos justificativos: Parte A: Consideraciones generales* se determina como el material más adecuado para la fabricación de los equipos diseñados el acero inoxidable 304. Por tanto, se escogerá ese material para la mayoría de equipos, salvo en los que interactúan compuestos que no presentan mayores complicaciones, que se escogerá como material acero al carbono, con el objetivo de abaratar los costes. Por tanto, se obtiene de la Tabla 2 el factor de corrección correspondiente.

Tabla 2. Factores de corrección del material. Fuente: (1)

Material	$f_m$
Acero al carbono	1
Acero inoxidable 304	1,3

Respecto al factor de corrección debido a la presión de operación, se muestran en la Tabla 3 los valores correspondientes.

Tabla 3. Factores de corrección por presión. Fuente: (2)

Presión de diseño (bar abs)	$f_p$
0,01	2
0,1	1,3
0,5-7	1
50	1,5
100	1,9

Por último, el factor de corrección para la temperatura se obtiene de la Tabla 4.

Tabla 4. Factor de corrección por temperatura. Fuente:(2)

Temperatura de diseño (°C)	$f_T$
0-100	1
300	1,6
500	2,1

Debido a la variabilidad que experimentan los precios a lo largo del tiempo, se debe aplicar un método que permita estimar el valor del coste actual en función de los valores obtenidos con la ecuación [1], que pertenecen al año 2010. El método CEPCI es el más empleado en ingeniería de procesos, y se muestra en la ecuación [3]. (1)

$$\text{Coste año A} = \text{Coste año B} \cdot \frac{I_A}{I_B} \quad [3]$$

Donde:

- $I_A$ : Índice CEPCI correspondiente al año A.
- $I_B$ : Índice CEPCI correspondiente al año B.

Se presentan en la Tabla 5 los valores más recientes del CEPCI necesarios para el cálculo del coste actual de los equipos.

Tabla 5. Valores del CEPCI. Fuente: (1, 3)

Año	CEPCI
Enero 2024	798,8
2010	532,9

## 2.2 Costes por proveedores

Debido a la complejidad y variabilidad que implica la estimación del coste de ciertos equipos, es necesario obtener la cotización de precio real por parte de un proveedor. Por tanto, se tomaron valores de referencia para bombas de vacío, válvulas y cintas transportadoras, y se muestran en la Tabla 6 los valores obtenidos.

Tabla 6. Precio obtenido por proveedores. Fuente: (4-6)

Equipo	Importe (€)	Proveedor
VLV-101	524,16	MerXTrade (5)
VP-101 A/B	2.741,81	Marshall Scientific (4)
VP-102 A/B	2.741,81	Marshall Scientific (4)
Cintas transportadoras	1726,70	Hebei Fangtai Plastic Machinery Manufacture Co., Ltd. (6)

### 3 Estimación del coste total de capital

El coste total de capital del proceso está compuesto por el capital fijo, relacionado con la adquisición de equipos, infraestructura y servicios, y por el fondo de maniobra. (1)

#### 3.1 Capital fijo

La inversión de capital fijo consiste en el costo de diseñar, construir e instalar una planta. Para ello, este cálculo lo compone la inversión dentro de los límites de batería (ISBL), la inversión fuera de los límites de batería (OSBL), los costos de ingeniería y construcción y los cargos por contingencias, según la ecuación [4]. (1)

$$C_F = C_{ISBL} + C_{OSBL} + C_{ingeniería} + C_{contingencia} \quad [4]$$

##### 3.1.1 ISBL (Límites de la Batería Interna)

Los costos ISBL, o costos de área de proceso, comprenden la compra e instalación de los equipos principales, así como instrumentación, obras civiles, mano de obra y supervisión. Incluye asimismo costos indirectos como alquiler de maquinaria, seguros, gastos de obra, beneficios laborales y otros costos. (1)

Empleando la ecuación [5], adecuada para aleaciones, se obtiene el coste del equipo en función de los factores de corrección. Asimismo, la ecuación [6] se emplea para equipos cuyo material de construcción sea acero al carbono. Los factores de corrección correspondientes se obtienen de la Tabla 7.

$$C_{ISBL} = \sum_{i=1}^{i=M} C_{e,i,ss} \cdot [(1 + f_p) + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l) / f_m] \quad [5]$$

$$C_{ISBL} = \sum_{i=1}^{i=M} C_{e,i,cs} \cdot [(1 + f_p) f_m + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l)] \quad [6]$$

Donde:

- $C_{e,i}$ : Coste individual de cada equipo hecho de aleación.
- M: Número total de equipos

Tabla 7. Factores de corrección para el coste de equipos. Fuente: (1)

Factor	Parámetro	Valor (fluidos)
$f_{pip}$	Tuberías	0,8
$f_{er}$	Montaje	0,3
$f_{el}$	Trabajo eléctrico	0,2
$f_i$	Instrumentación y control de procesos	0,3
$f_c$	Obras civiles	0,3
$f_s$	Estructuras y edificaciones	0,2
$f_l$	Aislamiento, recubrimiento o pintura	0,1

### 3.1.1.1 Resultados

Se emplea el procedimiento explicado anteriormente, realizando algunas suposiciones en los casos en los que los equipos no alcanzan el rango mínimo de utilización. En el caso de las bombas que no cumplen con este criterio, se considera como valor de referencia el mínimo del rango de operación mostrado en la Tabla 1 para el cálculo del coste. Por otra parte, para el decantador se aplican los factores correspondientes a tanques verticales.

En cuanto a los materiales de construcción, se establece que para los equipos en contacto directo con compuestos corrosivos del proceso, se utilizará acero inoxidable AISI 304, debido a su resistencia a la corrosión. Para equipos o partes de equipos que no estén en contacto directo con ninguna corriente del proceso o lo estén solamente con compuestos poco agresivos, se empleará acero al carbono, con el fin de reducir costes.

Por último, en el procedimiento de cálculo de las bombas se considerará el coste tanto de la bomba como del motor de la bomba, mientras que en las columnas de destilación se supondrá como un tanque a presión vertical y se obtendrá también el coste de los platos perforados.

Se muestra en la Tabla 8 y Tabla 9 el resultado de los costes de cada equipo.

Tabla 8. Resultados del coste individual de los equipos. Fuente: Elaboración propia.

Equipo	S, uds	S	$C_e$ (\$)	$f_m$	$f_p$	$f_t$	$C_{e,f}$ (\$)	$C_{e,f,2024}$ (\$)	$C_{e,f,2024}$ (€)	$C_{e,isbl}$ (€)
Bomba P-101 A/B	Caudal, L/s	0,17	8.048,93	1,30	1,00	1,00	20.927,21	31.369,22	27.230,22	86.666,86
Motor P-101 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-102 A/B	Caudal, L/s	0,43	8.111,18	1,30	1,00	1,00	21.089,06	31.611,82	27.440,82	87.272,71
Motor P-102 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-103 A/B	Caudal, L/s	4,10	8.853,61	1,30	1,00	1,00	23.019,38	34.505,31	29.952,53	124.822,72
Motor P-103 A/B	Potencia, kW	5,35	4.641,39	1,00	1,00	1,00	9.282,77	13.914,58	12.078,63	
Bomba P-104 A/B	Caudal, L/s	3,47	8.735,48	1,30	1,30	1,00	29.525,94	44.258,44	38.418,78	118.855,48
Motor P-104 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-105 A/B	Caudal, L/s	0,06	8.018,05	1,30	1,30	1,00	27.101,00	40.623,53	35.263,48	109.777,92
Motor P-105 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-201 A/B	Caudal, L/s	0,68	8.169,34	1,30	1,30	1,60	44.179,81	66.224,12	57.486,22	173.711,03
Motor P-201 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-202 A/B	Caudal, L/s	0,38	8.100,58	1,30	1,00	1,00	21.061,50	31.570,51	27.404,95	87.169,54
Motor P-202 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-203 A/B	Caudal, L/s	0,91	8.219,49	1,30	1,00	1,00	21.370,67	32.033,95	27.807,25	88.326,92
Motor P-203 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-204 A/B	Caudal, L/s	1,67	8.379,99	1,00	1,00	1,00	18.759,99	28.120,62	24.410,26	78.112,83
Motor P-204 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00				

Tabla 8 (Continuación). Resultados del coste individual de los equipos. Fuente: Elaboración propia

Equipo	S, uds	S	C <sub>e</sub> (\$)	f <sub>m</sub>	f <sub>p</sub>	f <sub>t</sub>	C <sub>e,f</sub> (\$)	C <sub>e,f,2024</sub> (\$)	C <sub>e,f,2024</sub> (€)	C <sub>e,isbt</sub> (€)
Bomba P-301 A/B	Caudal, L/s	0,61	8.154,87	1,30	1,00	1,00	21.202,67	31.782,13	27.588,65	87.698,02
Motor P-301 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-302 A/B	Caudal, L/s	0,34	8.091,82	1,30	1,00	1,00	21.038,74	31.536,39	27.375,34	87.084,34
Motor P-302 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-303 A/B	Caudal, L/s	1,11	8.264,03	1,30	1,00	1,00	21.486,49	32.207,56	27.957,95	88.760,46
Motor P-303 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
Bomba P-304 A/B	Caudal, L/s	1,62	8.371,06	1,00	1,00	1,00	18.742,11	28.093,82	24.387,00	78.038,40
Motor P-304 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00				
Bomba P-305 A/B	Caudal, L/s	0,32	8.086,58	1,30	1,00	1,00	21.025,10	31.515,95	27.357,59	87.033,30
Motor P-305 A/B	Potencia, kW	1,00	1.000,00	1,00	1,00	1,00	2.000,00	2.997,94	2.602,37	
E-101	Área, m <sup>2</sup>	33,26	31.619,95	1,30	1,00	1,00	41.105,94	61.616,48	53.486,53	153.876,64
E-102	Área, m <sup>2</sup>	152,56	383.298,67	1,30	1,30	1,00	647.774,76	970.993,58	842.876,37	2.424.890,48
E-103	Área, m <sup>2</sup>	136,68	57.666,57	1,30	1,30	1,60	155.930,40	233.734,67	202.894,68	583.712,39
E-104	Área, m <sup>2</sup>	0,76	28.038,74	1,30	1,30	1,60	75.816,75	113.646,87	98.651,80	283.813,64
E-105	Área, m <sup>2</sup>	0,40	2.895,65	1,30	1,30	1,60	7.829,84	11.736,67	10.188,08	29.310,33
E-106	Área, m <sup>2</sup>	6,94	31.427,84	1,30	1,00	1,60	65.369,90	97.987,39	85.058,50	244.706,76
E-201	Área, m <sup>2</sup>	9,72	28.827,30	1,30	1,00	1,60	59.960,78	89.879,28	78.020,21	224.458,14
E-202	Área, m <sup>2</sup>	0,60	28.029,42	1,30	1,00	1,00	36.438,25	54.619,77	47.412,99	136.403,53
E-203	Área, m <sup>2</sup>	2,04	28.126,98	1,00	1,00	1,00	28.126,98	42.161,44	36.598,47	117.115,10

Tabla 8 (Continuación). Resultados del coste individual de los equipos. Fuente: Elaboración propia

Equipo	S, uds	S	C <sub>e</sub> (\$)	f <sub>m</sub>	f <sub>p</sub>	f <sub>t</sub>	C <sub>e,f</sub> (\$)	C <sub>e,f,2024</sub> (\$)	C <sub>e,f,2024</sub> (€)	C <sub>e, isbt</sub> (€)
E-301	Área, m <sup>2</sup>	0,21	28.008,08	1,30	1,00	1,00	36.410,50	54.578,17	47.376,88	136.299,65
E-302	Área, m <sup>2</sup>	2,28	28.144,81	1,30	1,00	1,00	36.588,25	54.844,61	47.608,17	136.965,04
E-303	Área, m <sup>2</sup>	1,46	28.084,77	1,00	1,00	1,00	28.084,77	42.098,17	36.543,55	116.939,37
E-304	Área, m <sup>2</sup>	0,62	28.030,28	1,30	1,00	1,00	36.439,37	54.621,45	47.414,45	136.407,73
T-101 (Carcasa)	Masa carcasa, kg	2.457,04	77.583,50	1,00	1,30	1,00	100.858,55	151.183,73	131.235,87	484.305,11
T-101 (Platos)	Diámetro, m	1,50	10.171,76	1,30	1,30	1,00	17.190,27	25.767,66	22.367,76	193.460,28
T-102 (Carcasa)	Masa carcasa, kg	539,00	33.975,92	1,00	1,30	1,00	44.168,69	66.207,45	57.471,75	193.460,28
T-102 (Platos)	Diámetro, m	0,35	1.509,66	1,30	1,30	1,00	2.551,33	3.824,36	3.319,76	193.460,28
R-101 A/B	Masa carcasa, kg	2.245,38	73.147,21	1,00	1,00	1,00	146.294,41	219.290,63	190.356,45	609.140,63
R-201	Volumen, m <sup>3</sup>	6,86	213.185,01	1,30	1,00	1,00	277.140,51	415.424,73	360.611,74	1.037.452,25
R-301	Volumen, m <sup>3</sup>	2,44	127.906,14	1,30	1,00	1,00	166.277,99	249.245,37	216.358,83	622.447,70
TM-101 (Carcasa)	Masa carcasa, kg	545,30	34.140,37	1,00	1,00	1,00	68.280,74	102.350,64	88.846,04	592.171,65
TM-101 (Agitador)	potencia, kW	0,03	63.262,73	1,30	1,00	1,00	82.241,54	123.277,44	107.011,66	592.171,65
TM-301 (Carcasa)	Masa carcasa, kg	1.509,31	57.173,04	1,00	1,00	1,00	114.346,09	171.401,12	148.785,69	856.787,08
TM-301 (Agitador)	potencia, kW	0,44	78.224,08	1,30	1,00	1,00	101.691,30	152.432,00	132.319,44	856.787,08
D-201	Volumen, m <sup>3</sup>	0,21	6.336,58	1,30	1,00	1,00	8.237,55	12.347,83	10.718,60	30.836,59

Tabla 9. Resultados del coste ISBL de los equipos obtenidos por catálogo. Fuente: Elaboración propia.

Equipo	$f_m$	$C_e$ (€)	$C_{ISBL}$ (€)
VLV-101	1,3	524,16	1.507,97
VP-101 A/B	1,3	5.483,61	15.775,93
VP-102 A/B	1,3	5.483,61	15.775,93
Cintas transportadoras	1,3	5.180,10	14.902,75

### 3.1.2 OSBL (Límites de la Batería Externa)

Se definen como costos OSBL, u *offsite costs*, aquellos costes que abarcan los costes adicionales que se deben realizar en mejoras de infraestructura ya existente; sistemas eléctricos, generación de vapor, agua, aire, plantas auxiliares, laboratorios, oficinas, seguridad, logística y servicios generales. (1)

Estos costos se estiman inicialmente en un rango del 30-50% del costo ISBL, por lo que se tomará el valor mostrado en la Tabla 10.

### 3.1.3 Costos de ingeniería, construcción y por contingencias

A continuación, es necesario considerar los costes de una planta asociados al diseño riguroso y otros servicios relacionados llevados a cabo por ingenieros. Estos costes no son proporcionales al tamaño del proyecto, por lo que se lleva a cabo una estimación inicial, según se muestra en la Tabla 10. Los gastos por contingencias implican el presupuesto necesario para cubrir posibles inflaciones en los precios calculados, costes inesperados y otros tipos de variaciones. (1)

Por tanto, los factores que implican los costos de ingeniería y construcción, los OSBL y los costos por contingencias se muestran en la Tabla 10, en función del tipo de estado en el que se encuentren las corrientes de la planta.

Tabla 10. Parámetros para determinar el coste total. Fuente: (1)

Partida	Factor
Offsite (OS)	0,3
Ingeniería (D&E)	0,3
Contingencia (X)	0,1

### 3.1.4 Gastos iniciales de puesta en marcha

El capital necesario para adquirir los medios de producción se considera como un componente del capital inmovilizado, y suele suponer un 3-4% del coste del capital destinado al área de proceso. Se toma para este proyecto un valor inicial de un 3%. (7)

Tabla 11. Factor para obtener los gastos iniciales. Fuente: Elaboración propia.

Partida	Factor
Puesta en marcha	0,03

### 3.2 Fondo de maniobra

El *working capital*, fondo de maniobra o capital circulante, consiste en el dinero necesario por una empresa para operar diariamente, suponiendo entre un 10-20% del capital fijo. En este proyecto se estimará como un 15%. (1)

### 3.3 Coste total de capital

La inversión total de un proyecto se obtiene mediante la suma del coste fijo y del fondo de maniobra, según la siguiente ecuación [7], que se obtiene a partir de la ecuación [4].

$$C_{FC} = C_{ISBL} \cdot (1 + OS) \cdot (1 + D\&E + X) \quad [7]$$

Se muestra en la Tabla 12 el costo total de capital calculado a partir del costo fijo del proyecto, empleando los parámetros de la Tabla 10.

Tabla 12. Resultado del capital total. Fuente: Elaboración propia.

Coste	Importe (€)
$C_{ISBL}$	10.672.815 €
$C_{FC}$	19.744.708 €

Además, se decide optar por la compra de la parcela, por lo que dentro de la obtención de los gastos iniciales se debe tener en cuenta la contribución de dicho gasto

## 4 Partidas presupuestarias

Una vez obtenidos los costes fijos iniciales, se muestra en la Tabla 13 y Tabla 14 el desglose de las partidas asociadas tanto al capital inmovilizado como al circulante.

Tabla 13. Desglose de partidas del capital inmovilizado. Fuente: Elaboración propia.

Partida	Descripción	Medición	Importe (€)
Coste de equipos	Adquisición de equipos	Partida alzada	3.622.283
Instalación	Mano de obra, materiales y servicios	Partida alzada	889.866
Tuberías y válvulas	Adquisición e instalación	Partida alzada	2.897.826
Instrumentación y control	Sistemas y equipos para control de proceso	Partida alzada	889.866
Instalación eléctrica	Suministro e instalación del sistema eléctrico	Partida alzada	593.244
Obra civil	Preparación del terreno y tareas de construcción	Partida alzada	889.866
Infraestructura y edificios	Edificios auxiliares	Partida alzada	593.244
Aislamiento, recubrimiento o pintura	Acondicionamiento superficial de equipos	Partida alzada	296.622

Tabla 13 Continuación. Desglose de partidas del capital inmovilizado. Fuente: Elaboración propia

$C_{ISBL}=10.672.815€$		
Offsite	Costes adicionales de la infraestructura	3.201.845
Diseño e ingeniería	Servicios de ingeniería requeridos	4.162.398
Contingencia	Capital destinado a imprevistos	1.387.466
Parcela	Compra de parcela en el Polígono Norte de Tarragona	15.635.687
Gastos previos	Gastos previos a la puesta en marcha	320.184
$C_{fijo}=35.380.395,20$		

Tabla 14. Partida del capital circulante. Fuente: Elaboración propia.

Partida	Descripción	Medición	Importe (€)
Capital circulante	Capital destinado a operaciones diarias en planta	Partida alzada	5.307.059,28

## 5 Presupuesto total

Finalmente, se muestra en la Tabla 15 el presupuesto final para la construcción de la planta.

Tabla 15. Partida del presupuesto final del proyecto. Fuente: Elaboración propia.

Partida	Importe (€)
Capital total	40.687.454,48

El presupuesto total para la planta de producción de detergente tipo LABS a partir de benceno y dodeceno es de **CUARENTA MILLONES SEISCIENTOS OCHENTA Y SIETE MIL CUATROCIENTOS CINCUENTA Y CUATRO CON CUARENTA Y OCHO CÉNTIMOS (40.687.454,48€)**.

En Santiago de Compostela, a 20 de junio de 2025

Las autoras del proyecto,



Antía Gándara Vieito



Noelia López García



Lucía Pardilla Fraguas

## 6 Bibliografía

1. TOWLER, Gavin y SINNOTT, Ray. *Chemical Engineering Design: Principles, Practice And Economics Of Plant And Process Design*. 3.<sup>a</sup> ed. Amsterdam: Elsevier, 2022. ISBN 978-0-12-821470-4.
2. SMITH, Robin. *Chemical process design and integration*. Chichester: John Wiley & Sons, 2005. ISBN 0-471-48680-9.
3. TOWERING SKILLS. *Cost indices*. En línea. [s. l.]: Towering Skills, [s. f.]. Disponible en: <https://toweringskills.com/financial-analysis/cost-indices/> [consulta: 23-06-2025].
4. MARSHALL SCIENTIFIC. *Edwards RV3 vacuum pump*. En línea. [s. l.]: Marshall Scientific, [s. f.]. Disponible en: <https://www.marshallscientific.com/Edwards-RV3-Rotary-Vane-Vacuum-Pump-p/ed-rv3.htm> [consulta: 23-06-2025].
5. MERXTRADE. *Pressure reducing valves – Stainless steel – Thread*. En línea. [s. l.]: MerxTrade, [s. f.]. Disponible en: <https://merxtrade.com/en/pressure-reducing-valves-stainless-steel-thread.html> [consulta: 23-06-2025].
6. ALIBABA. *2023 nuevo transportador de cinta transportadora caliente para transporte de materiales industriales/a granel*. En línea. [s. l.]: Alibaba, 2023. Disponible en: [https://www.alibaba.com/product-detail/2023-New-HOT-Conveyor-Belt-Conveyor\\_1600237266274.html](https://www.alibaba.com/product-detail/2023-New-HOT-Conveyor-Belt-Conveyor_1600237266274.html) [consulta: 28-06-2025].
7. CALLEJA PARDO, Guillermo; GARCÍA HERRUZO, Francisco; IGLESIAS MORÁN, José; DE LUCAS MARTÍNEZ, Antonio y RODRÍGUEZ MAROTO, José M. *Nueva introducción a la ingeniería química*. Madrid: Ediciones Díaz de Santos, 2016. ISBN 978-84-9052-118-6.

ANEXO I.  
DIMENSIONAMIENTO  
BÁSICO DE LOS  
EQUIPOS

## Índice

1	Introducción.....	2
2	Bombas.....	2
3	Válvula .....	3
4	Intercambiadores de calor.....	4
5	Reactores .....	6
6	Columnas de destilación.....	9
7	Tanques de mezcla.....	9
8	Decantador.....	11
9	Tuberías .....	13
10	Bibliografía.....	16

## 1 Introducción

En este anexo se llevará a cabo un dimensionamiento básico de los equipos que no han sido diseñados en el *Anexo II. Cálculos Justificativos*. Es decir, se dimensionarán todos los equipos del proceso, salvo los reactores R-101 A/B, R-201 y la columna de destilación T-201.

Se realizará con el objetivo de tener una base de cálculo para poder estimar el coste de los equipos de la planta. A partir de los parámetros característicos obtenidos de los equipos, se podrá realizar el presupuesto del proyecto.

## 2 Bombas

Las bombas son equipos mecánicos ampliamente utilizados en procesos industriales para impulsar corrientes líquidas. Estos dispositivos añaden energía a los fluidos a través de la energía cinética. (1)

En primer lugar, se calcula la energía que transmite la bomba a la corriente de entrada, para impulsarla a las condiciones de salida, empleando la ecuación de Bernoulli simplificada, que se muestra en la ecuación [1]. Para ello, primero se obtiene el caudal empleando la ecuación [2]. (1)

$$W = \frac{P_{salida} - P_{entrada}}{\rho} \quad [1]$$

Donde:

- W: Energía transmite la bomba, J/kg
- P: Presión, Pa=N/m<sup>2</sup>
- $\rho$ : Densidad de la corriente, kg/m<sup>3</sup>

$$Q = \frac{\dot{m}}{\rho} \quad [2]$$

Donde:

- Q: Caudal volumétrico (m<sup>3</sup>/s)
- $\dot{m}$ : Flujo másico (kg/s)
- $\rho$ : Densidad (kg/m<sup>3</sup>)

Se define la potencia como la rapidez a la que se transfiere la energía, y se obtiene utilizando el flujo másico que debe impulsar dicha bomba, según la ecuación [3].

$$P_t = W \cdot \dot{m} \quad [3]$$

Donde:

- $P_t$  : Potencia teórica requerida, W
- W: Energía que transmite la bomba, J/kg
- $\dot{m}$  : Flujo másico, kg/h

Por último, habiendo obtenido la potencia teórica necesaria para impulsar el fluido, se emplea el término de eficiencia según la ecuación [4], que tiene en cuenta diversas pérdidas de energía que sufren las bombas. Se determina así la potencia real necesaria de cada bomba. (1)

$$e_M = \frac{P_t}{P_{real}} \quad [4]$$

Se muestran los resultados obtenidos en la Tabla 1, y se determina que todas las bombas serán de tipo rotatorio, de acuerdo con el valor de los caudales, siguiendo lo recomendado en heurísticas. Este tipo de bombas alcanza eficiencias entre el 50-80%, por lo que se toma un valor del 75%. (2)

Cabe destacar que, las bombas deben proporcionar una mayor presión al fluido de la que se desea que tenga a la entrada del siguiente equipo. Esto se debe a que el fluido experimenta pérdidas de carga a lo largo del trayecto debidas a diversas razones como la fricción en tuberías, aumento de cotas, pérdidas en accesorios y otros equipos, etc.

Tabla 1. Resultados obtenidos del dimensionamiento de las bombas. Fuente: Elaboración propia.

Equipo	$\dot{m}$ (kg/s)	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	Q, (m <sup>3</sup> /s)	P <sub>1</sub> (kPa)	P <sub>2</sub> (kPa)	P <sub>t</sub> (W)	P <sub>real</sub> (W)
P-101 A/B	0,15	872,16	0,00017	101,00	350,00	42,54	56,72
P-102 A/B	0,32	755,2	0,00043	101,00	250,00	63,37	84,49
P-103 A/B	3,50	854,22	0,0041	101,00	1080,00	4009,19	5345,59
P-104 A/B	2,99	860,92	0,0035	19,00	200,00	624,71	832,94
P-105 A/B	0,04	711,21	0,000056	10,00	350,00	19,18	25,57
P-201 A/B	0,47	692,66	0,00068	11,00	200,00	112,11	149,48
P-202 A/B	0,70	1842,93	0,00038	101,00	300,00	75,71	100,95
P-203 A/B	1,17	1293,57	0,00091	101,00	200,00	89,65	119,53
P-204 A/B	1,67	1000	0,0017	101,00	200,00	164,96	219,94
P-301 A/B	0,63	1040,67	0,00061	101,00	180,00	48,56	64,74
P-302 A/B	0,51	1353	0,00038	101,00	250,00	51,23	68,31
P-303 A/B	1,14	1025,78	0,0011	101,00	150,00	54,48	72,64
P-304 A/B	1,62	995,962	0,0016	120,00	200,00	52,76	70,34
P-305 A/B	0,32	980,00	0,00032	101,00	240,00	44,77	59,70

### 3 Válvula

La válvula VLV-101 se emplea para mantener una presión de vacío en las columnas de destilación T-101 y T-102. La corriente de entrada a la válvula presenta una temperatura de 147,17°C y una presión de 9,9 bar, mientras que la salida se encuentra a 36,47°C y 0,2 bar.

En el caso de la válvula, no se realizará un dimensionamiento, sino que se seleccionará un modelo comercial que se ajuste a las condiciones del proceso. Se seleccionará una válvula de globo de Bvalve, Concretamente el modelo BV205060 PN16, construida en hierro fundido. Este modelo

soporta una temperatura máxima de 200°C y mínima de -10°C. Además, puede trabajar con presiones de hasta 16 bar. Esta tendrá un diámetro nominal de 88,90 mm. (3)

#### 4 Intercambiadores de calor

Los intercambiadores de calor son dispositivos esenciales en el proceso y que permiten la transferencia de energía entre corrientes, siendo el tipo más empleado el intercambiador de carcasa y tubos. En el dimensionamiento básico de los intercambiadores de calor se desea obtener el área necesaria para dicho intercambio. (4)

Por tanto, se emplea la ecuación básica de transferencia de calor a través de una superficie según la ecuación [5]:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_m \quad [5]$$

Donde:

- Q: Calor intercambiado, W
- U: Coeficiente global de transferencia de calor, W/(m<sup>2</sup> · °C)
- A: Área de intercambio de calor, m<sup>2</sup>

Siendo el presente un diseño preliminar básico, se asume que todos los intercambiadores presentan flujo contracorriente, de acuerdo con maximizar la transferencia de calor. Por tanto, la temperatura media se calcula mediante la ecuación [6]. (4)

$$\Delta T_m = F \cdot \Delta T_{mL} \quad [6]$$

El factor F es un factor de corrección para intercambiadores con flujo contracorriente, mientras que  $\Delta T_{mL}$  es la temperatura media logarítmica, que se obtiene con la ecuación [7].

$$\Delta T_{lm} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \left( \frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1} \right)} \quad [7]$$

Donde:

- $T_1$ : Temperatura de entrada del fluido caliente, °C
- $T_2$ : Temperatura de salida del fluido caliente, °C
- $t_1$ : Temperatura de entrada del fluido frío, °C
- $t_2$ : Temperatura de salida del fluido frío, °C

El factor de corrección F se toma igual a 1, ya que no influirá prácticamente en el presupuesto.

Por otra parte, es necesario estimar un valor para el coeficiente global de transmisión de calor, que representa la suma de las resistencias individuales a la transmisión de calor. Este valor depende de diferentes factores del proceso, por lo que se toma de la Figura 1 los valores adecuados al sistema.

Shell and tube exchangers			Heaters		
Hot fluid	Cold fluid	U (W/m <sup>2</sup> °C)	Steam	Water	1500–4000
<b>Heat exchangers</b>			Steam	Organic solvents	500–1000
Water	Water	800–1500	Steam	Light oils	300–900
Organic solvents	Organic solvents	100–300	Steam	Heavy oils	60–450
Light oils	Light oils	100–400	Steam	Gases	30–300
Heavy oils	Heavy oils	50–300	Dowtherm	Heavy oils	50–300
Gases	Gases	10–50	Dowtherm	Gases	20–200
<b>Coolers</b>			Flue gases	Steam	30–100
Organic solvents	Water	250–750	Flue	Hydrocarbon vapors	30–100
Light oils	Water	350–900	<b>Condensers</b>		
Heavy oils	Water	60–300	Aqueous vapors	Water	1000–1500
Gases	Water	20–300	Organic vapors	Water	700–1000
Organic solvents	Brine	150–500	Organics (some noncondensables)	Water	500–700
Water	Brine	600–1200	Vacuum condensers	Water	200–500
Gases	Brine	15–250	<b>Vaporizers</b>		
			Steam	Aqueous solutions	1000–1500
			Steam	Light organics	900–1200
			Steam	Heavy organics	600–900

Figura 1. Coeficiente global de transmisión de calor. Fuente: (4)

Se calcula previamente en el Anexo I. *Balances de materia y energía* el calor transferido por unidad de tiempo en cada intercambiador, por lo que asumiendo un valor de U y conociendo el valor de la temperatura de las corrientes implicadas, se puede realizar el dimensionamiento de los equipos. (4)

Se debe tener en cuenta que la temperatura de salida de la utilidad se estimará dentro del rango de temperaturas de las utilidades empleadas, con el objetivo de facilitar los cálculos. Para un cálculo más preciso se debe calcular la cantidad de utilidad necesaria y, en función de dicho valor, obtener la temperatura de salida real de la utilidad.

Finalmente, se muestran en la Tabla 2 los resultados obtenidos del dimensionamiento básico de los intercambiadores de calor, y se indica la utilidad empleada en cada uno.

Tabla 2. Resultados del dimensionamiento de los intercambiadores. Fuente: Elaboración propia.

Equipo	Utilidad	Q (W)	U ( $\frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}$ )	$\Delta T_m (^\circ C)$	A (m <sup>2</sup> )
E-101	lps	690.046,41	600,00	34,58	33,26
E-102	cw	743.734,14	300,00	9,46	262,07
E-103	hps	132.549,73	600,00	0,65	337,37
E-104	cw	57.127,10	400,00	188,36	0,76
E-105	cw	23.590,52	400,00	148,08	0,40
E-106	hps	45.993,47	600,00	11,04	6,94
E-201	cw	260.878,43	400,00	67,09	9,72
E-202	lps	31.573,82	600,00	87,29	0,60
E-203	lps	100.905,94	600,00	82,47	2,04
E-301	lps	8.907,74	600,00	72,32	0,21
E-302	lps	111.749,11	600,00	81,86	2,28

Tabla 2. Continuación. Resultados del dimensionamiento de los intercambiadores. Fuente: Elaboración propia.

E-303	lps	65.431,02	600,00	74,89	1,46
E-304	lps	30.334,60	600,00	81,86	0,62

Siendo las utilidades empleadas en la Tabla 2 identificadas de la siguiente manera:

- lps (*low pressure steam*): Vapor de baja presión, 15-30 psig, con un rango de utilización de temperaturas entre 250-275°F. (5)
- cw (*cooling water*): Agua de refrigeración, entrada entre 80-90°F y salida entre 115-125°F. (5)
- hps (*high pressure steam*): Vapor de alta presión, con un rango de utilización de temperaturas entre 250-275°F. (5)

## 5 Reactores

Los reactores R-101 A/B y R-201 están diseñados detalladamente en el *Anexo II. Cálculos Justificativos*.

El R-301 es el reactor de neutralización del ácido dodecibencensulfónico (LABSA) y del ácido sulfúrico con hidróxido de sodio al 20%. Ambas son reacciones ácido-base fuertes, exotérmicas y de cinética no limitante. Por lo que el enfoque del diseño se basa en una agitación eficaz y control de las condiciones de operación. Para un reactor continuo de tanque agitado (RCTA), en el que se lleva a cabo esta neutralización, el tiempo de residencia se puede asumir de 30 minutos. (6)

Para el dimensionamiento básico del reactor R-301 conocido el tiempo de residencia se obtiene el volumen del reactor con el caudal volumétrico con la ecuación [8].

$$V = Q \cdot \tau \quad [8]$$

Donde:

- V: Volumen del reactor R-301, m<sup>3</sup>
- Q: Caudal volumétrico de entrada al reactor R-301, m<sup>3</sup>/s
- $\tau$ : Tiempo de residencia del reactor R-301, s

Tabla 3. Parámetros para la obtención del volumen del reactor R-301. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
Q (m <sup>3</sup> /h)	3,99
$\tau$ (min)	30
V (m <sup>3</sup> )	1,99

Un reactor continuo de tanque agitado consiste en un recipiente que cuenta con un sistema de agitación. Para poder estimar las dimensiones se asume que la relación entre el diámetro y la

altura del líquido es de 1,5, siendo el rango de valores típicos de la relación L/D entre 1-1,5. Cabe destacar que la altura total del tanque es la ocupada por el líquido más un porcentaje libre que depende del sistema de agitación pero que a fines de estimación se toma del 20%. El espesor de la pared del reactor se obtiene siguiendo el código ASME BPV Sec. VIII División 1, seleccionando en base al diámetro del reactor el espesor mínimo recomendado. El material de construcción es el acero inoxidable 304, en base a la selección que se hace para el resto de los equipos. (4, 7)

Para realizar un cálculo preliminar, el peso aproximado de un recipiente cilíndrico con terminaciones abombadas y espesor de pared uniforme se puede emplear la ecuación [9].

$$W = C_w \cdot \pi \cdot \rho \cdot D_m \cdot (L_t + 0,8 \cdot D_m) \cdot t \quad [9]$$

Donde:

- W: Peso total de la carcasa, N
- $C_w$ : Factor que incorpora el peso de las boquillas, agujeros, soportes internos... (1,08 para pocos accesorios y 1,15 para numerosos accesorios internos)
- $\rho$ : Densidad del material o recipiente,  $\text{kg/m}^3$
- $D_m$ : Diámetro medio del recipiente, m
- $L_t$ : Longitud de la sección cilíndrica, m
- t: Espesor de la pared, m

El factor que incluye a los internos toma un valor de 1,15 debido al sistema de agitación, además de así plantear un diseño más conservador. Los resultados se pueden observar en la Tabla 4.

Tabla 4. Resultados obtenidos del dimensionamiento del reactor R-301. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
L/D	1,5
D (m)	1,20
L líquido (m)	1,80
$C_w$	1,15
$\rho$ ( $\text{kg/m}^3$ )	7900
$D_m$ (m)	1,21
$L_t$ (m)	2,16
t (mm)	7,00
W (kg)	753,73
V total ( $\text{m}^3$ )	2,44

Una vez determinado el peso del recipiente es necesario obtener la potencia del sistema de agitación. La elección del tipo de agitador más adecuado depende de las condiciones de operación del proceso, principalmente en la viscosidad de la corriente. En base a la bibliografía y analizando las principales características se selecciona una turbina de palas inclinadas de  $45^\circ$ . Se emplea la siguiente ecuación para determinar la potencia requerida por el sistema agitador en un tanque de mezcla. (4)

$$P = N_p \rho N^3 D^5 \quad [10]$$

Donde:

- P: Potencia del eje, W
- $N_p$ : Número de potencia
- $\rho$ : Densidad de la mezcla,  $\text{kg/m}^3$

- N: Velocidad rotacional de agitación, 1/s
- d: Diámetro del agitador, m

El número de potencia toma un valor de 1,27 para una configuración típica de un sistema de agitación de turbina de palas inclinadas. El diámetro del agitador se calcula como el 30% del diámetro del reactor y para el valor de la velocidad se selecciona 125 rpm. (5, 8)

Tabla 5. Resultados obtenidos del dimensionamiento del sistema de agitación del R-301. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Valor
Densidad de la mezcla (kg/ m <sup>3</sup> )	1035,06
Velocidad rotacional del agitador (rpm)	125
Diámetro del agitador (m)	0,36
Número de potencia	1,27
Potencia (W)	71,87
Potencia específica (kW/ m <sup>3</sup> )	0,04

Según la Figura 2 para procesos de mezcla líquida-líquida y transferencia de calor sin formación de emulsiones, se recomienda una potencia específica en el rango de 0,03 a 1,0 kW/m<sup>3</sup>. Por lo tanto, se comprueba que la potencia obtenida tiene un valor correcto. (4)

Agitation	Applications	Power, kW/m <sup>3</sup>
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid–liquid mixing	1.0–15
Severe	Slurry suspension	1.5–2.0
	Gas absorption	1.5–2.0
	Emulsions	1.5–2.0
Violent	Fine slurry suspension	>2.0

Figura 2. Requerimiento de potencia en sistemas líquido-líquido. Fuente: Elaboración propia.

A continuación, se muestra en la Tabla 6 el resumen del dimensionamiento de los tres reactores del proceso.

Tabla 6. Dimensionamiento de los reactores.

Equipo	Volumen (m <sup>3</sup> )	Masa de la carcasa (kg)
R-101 A/B	5,28	2.245,38
R-201	6,86	3.527,52
R-301	2,44	753,73

## 6 Columnas de destilación

El dimensionamiento de la columna T-102 se lleva a cabo de forma detallada en *el Anexo II. Cálculos justificativos*, y se muestran los datos obtenidos en la Tabla 7. Por tanto, para dimensionar correctamente la columna T-101 se sigue el código de diseño ASME BPV Sección VII División 1, que considera dichos equipos como recipientes a presión.

Al igual que la columna T-102, la columna T-101 se trata de una columna que opera a vacío y, por tanto, se encuentra sometida a presión externa. Se sigue el procedimiento explicado en *Anexo II. Cálculos justificativos: Parte C* y se obtiene una estimación del número de platos y del diámetro óptimo de la columna del simulador de datos Aspen HYSYS.

El material de construcción de la primera columna será el mismo que el de la columna T-102, ya que los compuestos son los mismos. Se emplea por tanto acero inoxidable 304 y se obtiene la masa de la carcasa con la ecuación [11].

$$m_{carcasa} = \rho_{acero\ 304} \cdot V_{carcasa} \quad [11]$$

A continuación, se emplea la ecuación [12] para obtener el volumen correspondiente a la carcasa.

$$V_{carcasa} = \pi \cdot d_i \cdot L \cdot t \quad [12]$$

Donde  $d_i$  es el diámetro interno de la columna, L la longitud sin cabezales de la columna y t es el espesor de la carcasa. La densidad del acero inoxidable se toma como  $7900\text{ kg/m}^3$ .

Tabla 7. Resultados obtenidos del dimensionamiento de las columnas. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Equipo	
	Columna T-101	Columna T-102
P diseño ( $P_{ext} - P_{int}$ )	1,013	1,013
$d_i$ (m)	1,50	0,348
L (m)	6,6	9,44
t (m)	0,01	0,006
$V_{carcasa}$ ( $m^3$ )	0,31	0,06
$m_{carcasa}$ (kg)	2457	484,3
Espaciado entre platos (m)	0,60	0,40
Número de platos	11	21

## 7 Tanques de mezcla

Las operaciones de mezclado son esenciales a nivel industrial, desde el acondicionamiento de las corrientes de entrada hasta la homogeneización del producto final. En el presente diseño se dispone de dos tanques de mezcla, el de acondicionamiento de la corriente de entrada a los reactores R-101 A/B y el de preparación del producto final.

El volumen del tanque de mezcla se obtiene mediante el caudal volumétrico y el tiempo de residencia. El tiempo de residencia depende de las propiedades de los fluidos y del grado de homogeneidad requerido, siendo el rango de 1 a 5 minutos para mezclas únicamente de líquidos y puede llegar hasta los 60 minutos en casos de que se involucren sólidos o polvos. (9)

El tanque de mezcla TM-101 homogeniza las corrientes de entrada a los reactores de alquilación R-101 A/B, tanto las corrientes frescas como las recirculadas a diferentes temperaturas. El equipo debe asegurar una alimentación al reactor con composición uniforme y condiciones estables. Siguiendo las recomendaciones de diseño para el mezclado de corrientes líquidas se selecciona como opción conservadora un tiempo de residencia de 5 minutos para el tanque de mezcla TM-101. (9)

El tanque de mezcla TM-301 de preparación del producto final recibe corrientes de aditivos en polvo. Para asegurar una buena formulación comercial es necesario lograr una mezcla completamente homogénea, con disolución y dispersión adecuada de todos los sólidos añadidos. Las recomendaciones para tiempos de residencia en estos casos son de 20 a 30 minutos. Por ello, se opta por un tiempo de 25 minutos para el dimensionamiento de este tanque. (9)

El volumen del tanque se obtiene empleando la ecuación [8]. Los volúmenes se muestran en la Tabla 8.

*Tabla 8. Obtención del volumen de los tanques de mezcla. Fuente: Elaboración propia.*

Parámetro	Equipo	
	TM-101	TM-301
Q (m <sup>3</sup> /h)	14,85	13,77
$\tau$ (min)	5,00	25,00
V (m <sup>3</sup> )	1,24	5,74

El tipo de tanque de mezcla más utilizado en la industria consiste en un recipiente que incluye un mecanismo de agitación. Al igual que en el dimensionamiento del reactor R-301, se asume para los cálculos una relación de 1,5 y se le añade una altura libre para el sistema de agitación del 20%. En función del diámetro del tanque se selecciona el espesor mínimo recomendado de la *Tabla 6 del Anexo II. Cálculos Justificativos Parte A* en base al código ASME BPV Sec. VIII D1. El material de construcción es el acero inoxidable 304. Con estos datos se calcula el peso de la carcasa del tanque de mezcla siguiendo la ecuación [9]. En la Tabla 9 se muestran los resultados. (4, 7)

Tabla 9. Resultados del dimensionamiento de los tanques de mezcla. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Equipo	
	TM-101	TM-301
L/D	1,5	1,5
D (m)	1,02	1,7
L líquido (m)	1,53	2,55
$C_w$	1,15	1,15
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	7900	7900
$D_m$ (m)	1,03	1,71
$L_t$ (m)	1,84	3,06
t (mm)	7,00	7,00
W (kg)	545,30	1509,31
V total (m <sup>3</sup> )	1,50	6,95

Para obtener la potencia del sistema de agitación es necesario seleccionar el tipo de agitador, que es una turbina de palas inclinadas de 45°. Esta turbina presenta un número de potencia de 1,27 para un arreglo con 4 deflectores, un diámetro de agitador del 30% del diámetro del tanque y una velocidad de 125 rpm. Se emplea la ecuación [10] para determinar la potencia requerida por el sistema agitador en un tanque de mezcla. Los resultados se muestran en la Tabla 10.

Tabla 10. Resultados del dimensionamiento del sistema de agitación de los tanques de mezcla. Fuente: Elaboración propia.

Parámetro	Equipo	
	TM-101	TM-301
Densidad de la mezcla (kg/ m <sup>3</sup> )	849,55	1100
Velocidad rotacional del agitador (rpm)	125	125
Diámetro del agitador (m)	0,31	0,51
Número de potencia	1,27	1,27
Potencia (W)	26,17	435,84
Potencia específica (kW/ m <sup>3</sup> )	0,02	0,08

## 8 Decantador

Los decantadores basan su funcionamiento en la diferencia de densidad entre las corrientes, de manera que la existen dos fases diferenciadas, la continua y la discontinua. (4)

El dimensionamiento preliminar de un decantador consiste en determinar el volumen requerido, basándose en el hecho de que la velocidad de la fase continua debe ser menor que la velocidad de sedimentación de las gotas de la fase dispersa. (4)

Para el cálculo de la velocidad de la fase continua,  $u_c$ , se asume flujo tipo pistón, empleando la ecuación [13], donde  $A_i$  es el área de la interfase.

$$u_c = \frac{L_c}{A_i} \leq u_d \quad [13]$$

Para calcular la velocidad de la fase dispersa,  $u_d$ , que debe ser mayor o igual a la continua, se emplea la ecuación [14]. Esta ecuación consiste en la Ley de Stokes, empleada normalmente en sistemas donde una partícula sólida se mueve a través de un fluido. Sin embargo, con el fin de obtener una aproximación, se asume como válido el valor obtenido para el presente sistema líquido-líquido. (4)

$$u_d = \frac{d_d^2 \cdot g \cdot (\rho_d - \rho_c)}{18 \cdot \mu_c} \quad [14]$$

Donde  $d_d$  es el diámetro de las partículas, y los subíndices d y c representan la corriente dispersa y continua respectivamente. Para un decantador vertical y cilíndrico el área se calcula según la ecuación [15], por lo que sabiendo el caudal y la velocidad se puede despejar el diámetro del decantador.

$$A_i = \pi \cdot r^2 \quad [15]$$

Una vez determinado el diámetro, se toma la altura del decantador vertical como el doble de dicho valor, y se comprueba que el tiempo de residencia de las partículas se encuentra en el rango recomendado entre 2 y 5 minutos, según la ecuación [16]. (4)

$$t = \frac{10\% \cdot H_d}{u_d} \quad [16]$$

Siendo  $H_d$  la altura del decantador y t el tiempo de residencia de las partículas de la fase dispersa. Por último, se obtiene el volumen necesario según la ecuación [17].

$$V = \dot{Q}_d \cdot t \quad [17]$$

A continuación, se muestran en la Tabla 11 tanto los datos necesarios como los resultados obtenidos de realizar el dimensionamiento del decantador.

Tabla 11. Resultado del dimensionamiento del decantador D-301. Fuente: Elaboración propia.

	Datos	
	Fase acuosa	Fase orgánica
m (kg/h)	2121,33	4105,92
$\rho \left(\frac{kg}{m^3}\right)$	1769,66	1040,67
$\mu \left(\frac{mN s}{m^2}\right)$	5,14	1,60
$u \left(\frac{m}{s}\right)$	$7,73 \cdot 10^{-4}$	$-7,73 \cdot 10^{-4} *$

Tabla 11. Continuación. Resultado del dimensionamiento del decantador D-301. Fuente: Elaboración propia

Dimensiones	
$D_i$ (m)	0,74
$H_d$ (m)	1,48
$V$ ( $m^3$ )	0,21
$d_d$ (m)	$100 \cdot 10^{-6}$
t (min)	3,19

\*El signo negativo de la velocidad de la fase dispersa indica que las gotas ascienden dentro del decantador, es decir, se desplazan hacia la parte superior al ser menos densas que la fase continua.

## 9 Tuberías

Las tuberías se definen comercialmente según su diámetro nominal (DN), el cual está estandarizado de acuerdo con normas ISO, DIN o ASME, definiéndose por su Schedule, que especifica el espesor de la pared de la tubería. En este diseño se sigue el código de diseño ASME B31.3. El objetivo del dimensionamiento básico de las tuberías consiste en determinar el diámetro nominal de cada tubería del proceso. (4)

Para determinar el diámetro de las tuberías se calculará el área de la sección transversal necesaria de forma que, con el flujo volumétrico de cada corriente, la velocidad del fluido se mantenga dentro del rango típico recomendado. Las velocidades típicas seleccionadas se muestran en la Tabla 12.

Tabla 12. Velocidades típicas de las tuberías. Fuente: (4)

Fluido	Velocidad, m/s
Líquidos	1
Gases	15

Para realizar ese cálculo se usarán las ecuaciones [18],[19]y [20].

$$Q = \frac{\dot{m}}{\rho} \quad [18]$$

$$A_{transversal} = \frac{Q}{v} \quad [19]$$

$$d_{i,\text{óptimo}} = \sqrt{\frac{4 \cdot A_{transversal}}{\pi}} \quad [20]$$

Donde:

- Q: Caudal volumétrico de la corriente,  $m^3/s$
- $\dot{m}$ : Flujo másico de la corriente,  $kg/s$

- $\rho$ : Densidad de la corriente,  $\text{kg/m}^3$
- $A_{\text{transversal}}$ : Área de la sección transversal,  $\text{m}^2$
- $v$ : Velocidad típica según la Tabla 12,  $\text{m/s}$
- $d_{i,\text{óptimo}}$ : Diámetro óptimo de la tubería,  $\text{m}$

Una vez se dispone de los diámetros de las conducciones calculados, será necesario emplear dimensiones estandarizadas de tuberías, mostradas en la Figura 3. Por tanto, se seleccionará el valor que corresponda con el obtenido mediante los cálculos, y de no coincidir con el comercializado, se cogerá el valor inmediatamente superior.

Asimismo, es necesario seleccionar un espesor para las tuberías, el cual depende del tipo de fluido transportado y de sus condiciones de temperatura y presión del fluido. Como no hay ninguna corriente con temperatura superior a los  $250^\circ\text{C}$ , se escogerá el Schedule 40 de acero inoxidable. Conociendo el Schedule y el diámetro de las tuberías, se determinará también su espesor mediante la Figura 3. (10)

Nom size	OD	Schedule vs (Wall thickness in mm)													Std. Wall	Extra Strong.
		Sched 5s	Sched 10 s= 10s	Sched 20	Sched 30	Sched 40	Sched 60	Sched 80	Sched 100	Sched 120	Sched 140	Sched 160				
1/8	10,3		s=1,24			1,73		2,41						1,73	2,41	
1/4	13,7		s=1,65			2,24		3,02						2,24	3,02	
3/8	17,1		s=1,65			2,31		3,2						2,31	3,2	
1/2	21,3	1,65	s=2,11			2,77		3,73				4,78	2,77	3,73		
3/4	26,7	1,65	s=2,11			2,87		3,91				5,56	2,87	3,91		
1	33,4	1,65	s=2,77			3,38		4,55				6,35	3,38	4,55		
1 1/4	42,2	1,65	s=2,77			3,56		4,85				6,35	3,56	4,85		
1 1/2	48,3	1,65	s=2,77			3,68		5,08				7,14	3,68	5,08		
2	60,3	1,65	s=2,77			3,91		5,54				8,74	3,91	5,54		
2 1/2	73,0	2,11	s=3,05			5,16		7,01				9,53	5,16	7,01		
3	88,9	2,11	s=3,05			5,49		7,62				11,13	5,49	7,62		
3 1/2	101,6	2,11	s=3,05			5,74		8,08					5,74	8,08		
4	114,3	2,11	s=3,05			6,02		8,56		11,13		13,49	6,02	8,56		
5	141,3	2,77	s=3,4			6,55		9,53		12,70		15,88	6,55	9,53		
6	168,3	2,77	s=3,4			7,11		10,97		14,27		18,26	7,11	10,97		
8	219,1	2,77	s=3,76	6,35	7,04	8,18	10,31	12,7	15,09	18,26	20,62	23,01	8,18	12,7		
10	273,0	3,40	s=4,19	6,35	7,8	9,27	12,70	15,09	18,26	21,44	25,40	28,58	9,27	12,7		
12	323,8	3,96	s=4,57	6,35	8,38	10,31	14,27	17,48	21,44	25,4	28,58	33,32	9,53	12,7		
14	355,6	3,96	s= 4,78 6,35	7,92	9,53	11,13	15,09	19,05	23,83	27,79	31,75	35,71	9,53	12,7		
16	406,4	4,19	s= 4,78 6,35	7,92	9,53	12,7	16,66	21,44	26,19	30,96	36,53	40,49	9,53	12,7		
18	457	4,19	s= 4,78 6,35	7,92	11,13	14,27	19,05	23,83	29,36	34,93	39,67	45,24	9,53	12,7		
20	508	4,78	s= 5,54 6,35	9,53	12,70	15,09	20,62	26,19	32,54	38,10	44,45	50,01	9,53	12,7		
22	559	4,78	s= 5,54 6,35	9,53	12,70	-	22,23	28,58	34,93	41,28	47,63	53,98	9,53	12,7		
24	610	5,54	s= 6,35 6,35	9,53	14,27	17,48	24,61	30,96	38,89	46,02	52,37	59,54	9,53	12,7		
26	660		7,92	12,7									9,53	12,7		
28	711		7,92	12,7	15,88								9,53	12,7		
30	762	6,35	s= 7,92 7,92	12,70	15,88								9,53	12,7		
32	813		7,92	12,70	15,88	17,48							9,53	12,7		

Figura 3. Dimensiones estándar de tuberías según norma ANSI B36.10. Fuente:(11)

Se muestra en la Tabla 13 las dimensiones de las tuberías del proceso. Cabe mencionar que no aparecen las corrientes 44, 45 y 46, puesto que no se tratan de tuberías, sino de cintas transportadoras.

Tabla 13. Dimensionamiento de las tuberías. Fuente: Elaboración propia.

Corriente	$\rho$	$\dot{m}$	Q	$d_{i,\text{óptimo}}$	$d_{i,\text{óptimo,nominal}}$	Schedule	t
	kg/m <sup>3</sup>	kg/s	m <sup>3</sup> /s	mm	mm		mm
1	872,16	0,15	0,00017	14,75	17,10	40	2,31
2	872,16	0,15	0,00017	14,75	17,10	40	2,31
3	755,21	0,32	0,00043	23,27	26,70	40	2,87
4	755,21	0,32	0,00043	23,27	26,70	40	2,87
5	854,22	3,50	0,0041	72,21	73,00	40	5,16
6	854,22	3,50	0,0041	72,21	73,00	40	5,16
7	752,91	3,50	0,0046	76,91	88,90	40	5,49
8	737,21	3,50	0,0047	77,73	88,90	40	5,49
9	1,21	3,50	2,89	495,11	508,00	40	15,09
10	860,92	2,99	0,0035	66,47	73,00	40	5,16
11	860,92	2,99	0,0035	66,47	73,00	40	5,16
12	679,21	0,51	0,00075	30,93	33,40	40	3,38
13	55,78	0,51	0,0091	107,93	114,30	40	6,02
14	0,50	0,04	0,081	82,85	88,90	40	5,49
15	711,21	0,04	0,000056	8,47	10,30	40	1,73
16	711,21	0,04	0,000056	8,47	10,30	40	1,73
17	692,66	0,47	0,00068	29,40	33,40	40	3,38
18	692,66	0,47	0,00068	29,40	33,40	40	3,38
19	840,41	0,47	0,00056	26,69	26,70	40	2,87
20	1842,93	0,70	0,00038	22,01	26,70	40	2,87
21	1842,93	0,70	0,00038	22,01	26,70	40	2,87
22	1830,00	0,70	0,00038	22,09	26,70	40	2,87
23	1293,57	1,17	0,00091	33,95	42,20	40	3,56
24	1293,57	1,17	0,00091	33,95	42,20	40	3,56
25	1000,00	1,67	0,0017	46,06	48,30	40	3,68
26	1000,00	1,67	0,0017	46,06	48,30	40	3,68
27	995,96	1,67	0,0017	46,15	48,30	40	3,68
28	995,96	0,05	0,000050	8,00	10,30	40	1,73
29	1832,31	0,59	0,00032	20,24	26,70	40	2,87
30	1040,67	0,63	0,00061	27,81	33,40	40	3,38
31	1040,67	0,63	0,00061	27,81	33,40	40	3,38
32	1035,06	0,63	0,00061	27,89	33,40	40	3,38
33	1353,00	0,51	0,00038	21,87	21,30	40	2,77
34	1353,00	0,51	0,00038	21,87	21,30	40	2,77
35	1039,16	0,51	0,00049	24,96	26,70	40	2,87
36	1025,78	1,14	0,0011	37,63	42,20	40	3,56
37	1025,78	1,14	0,0011	37,63	42,20	40	3,56
38	995,96	1,62	0,0016	45,46	48,30	40	3,68
39	995,96	1,62	0,0016	45,46	48,30	40	3,68
40	988,25	1,62	0,0016	45,63	48,30	40	3,68
41	980,00	0,32	0,00032	20,25	21,30	40	2,77
42	980,00	0,32	0,00032	20,25	21,30	40	2,77
43	980,00	0,32	0,00032	20,25	21,30	40	2,77
47	1100,00	4,21	0,0038	69,80	73,00	40	5,16

## 10 Bibliografía

1. MOTT, Robert L. *Mecánica de fluidos*. 6ª edición. Pearson educación, 2006.
2. TURTON, Richard, Shaeiwitz, Joseph A., BHATTACHARYYA, Debangsu y WHITING. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 5ª ed. 2018.
3. BVALVE. *Globe valve*. En línea. Disponible en: <https://bvalveglobal.com/products/globe-valve/> [consulta: 28-06-2025].
4. TOWLER, Gavin e SINNOTT, Ray. *Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*. 3ª ed. 2022.
5. WALAS, Stanley M. *Chemical Process Equipment: Selection and Design*. 1990.
6. ZOLLER, Uri y SOSIS, Paul. *Handbook of detergents, Part F Production*. RC Press-Taylor & Francis Group, 2009.
7. THE AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS. *ASME Boiler and Pressure Vessel Code. Section VIII, Division I. Nueva York: ASME, 2023*.
8. SINNOTT, Ray e TOWLER, Gavin. Design Information and Data. En: *Chemical Engineering Design*. 2ª ed. Oxford: Elsevier, 2020, p. 399–450.
9. PERRY, Robert H., GREEN, Don W. e MALONEY, James O. *Manual del ingeniero químico Perry*. 6ª ed. México: McGraw-Hill, 2001.
10. TUSPIPE. *Tubería Schedule 40 – Una guía completa*. En línea. Disponible en: <https://tuspipe.es/blog/schedule-40-pipe-a-comprehensive-guide/> [consulta: 28-06-2025]
11. SCRIBD. *BS 1600 | Pipe (Fluid Conveyance) | Building Materials*. En línea. Disponible en: <https://es.scribd.com/document/226132435/BS-1600> [consulta: 28-06-2025].