

TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Ingeniería Química



Escola
Técnica
Superior
de Enxeñaría

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE VAINILLINA (4-HIDROXI-3-METOXIBENZALDEHÍDO) A PARTIR DE LIGNINA KRAFT

Escola Técnica Superior de Enxeñaría

Universidade de Santiago de Compostela

Martín Calvo Doce

Carlos Iglesias García

ÍNDICE GLOBAL

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**

DOCUMENTO II. PLANO

DOCUMENTO III. PLIEGO DE CONDICIONES**

DOCUMENTO IV. ESTUDIOS CON ENTIDAD PROPIA***

DOCUMENTO V. PRESUPUESTO

** Se incluye en este Anexo II el dimensionamiento básico de equipos.*

*** Las Fichas de Seguridad y el Pliego de Condiciones se adjuntan en el archivo II de este proyecto.*

**** Los Estudios con Entidad Propia relativos al estudio de Seguridad y Salud se adjuntan en el archivo II de este proyecto.*

DOCUMENTO I.
MEMORIA

ÍNDICE

1.	OBJETO Y ALCANCE	4
2.	JUSTIFICACIÓN DEL PROYECTO	4
3.	PRODUCTO: VAINILLINA (C ₈ H ₈ O ₃)	5
3.1.	CARACTERÍSTICAS	5
3.2.	PROPIEDADES FÍSICAS, QUÍMICAS Y TERMODINÁMICAS	5
3.3.	HISTORIA	6
3.4.	APLICACIONES	7
4.	MATERIA PRIMA	7
4.1.	LIGNINA	7
4.1.1.	Características	7
4.1.2.	Propiedades	8
5.	ESTUDIO DE MERCADO	9
5.1.	MERCADO DE LA VAINILLINA	10
5.1.1.	Producción y demanda global	10
5.1.2.	Distribución del mercado	11
5.1.3.	Producción en función del tipo, precios, exportadores e importadores.	13
5.2.	MERCADO DE LAS MATERIAS PRIMAS: LIGNINA	16
5.2.1.	Lignina Kraft	18
5.2.2.	Lignosulfonatos	18
6.	ESTUDIO DE ALTERNATIVAS	19
6.1.	OXIDACIÓN DE LIGNINA KRAFT EN MEDIO ÁCIDO	19
6.1.1.	Extracción empleando acetato de etilo como solvente	19
6.1.2.	Extracción empleando benceno como solvente	20
6.1.3.	Separación por medio de nanofiltración con solvente orgánico	21
6.1.4.	Separación mediante adsorción con zeolita	22
6.2.	OXIDACIÓN DE LIGNINA KRAFT EN MEDIO BÁSICO	23
6.2.1.	Extracción líquido-líquido con destilación	24
6.2.2.	Extracción líquido-líquido en dos etapas	26
6.2.3.	Destilación a vacío	27
6.3.	OXIDACIÓN EN MEDIO BÁSICO Y SEPARACIÓN CON ADSORCIÓN	27
6.4.	JUSTIFICACIÓN DE LA ALTERNATIVA SELECCIONADA	28
7.	EMPLAZAMIENTO	29
7.1.	DESCRIPCIÓN DEL EMPLAZAMIENTO	30
7.1.1.	Red de comunicaciones	33
7.1.2.	Servicios	35
7.1.3.	Disponibilidad de mano de obra	36
7.1.4.	Climatología	36
7.1.5.	Fenómenos Sísmicos	39
8.	ESTUDIO DE VIABILIDAD TÉCNICA	39

8.1.	VIABILIDAD TÉCNICA DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN ELEGIDO	40
8.2.	DISPONIBILIDAD DE MATERIAS PRIMAS Y MERCADO DEL PRODUCTO	40
8.3.	DISPONIBILIDAD DE EQUIPOS	41
8.4.	DISPONIBILIDAD DE UTILIDADES DE PROCESO	42
8.5.	DISPONIBILIDAD DE TERRENO Y MANO DE OBRA.....	43
8.6.	CONSIDERACIONES EN EL ÁMBITO DE LA SEGURIDAD	43
8.7.	RENTABILIDAD DEL PROYECTO.....	44
9.	DESCRIPCIÓN DEL PROCESO	44
9.1.	SUBPRODUCTOS FORMADOS EN EL PROCESO.....	44
9.1.1.	Siringaldehído.....	45
9.1.2.	Ácido vainillínico	45
9.1.3.	Compuestos equivalentes (X) y justificación.	46
9.2.	COMPUESTOS QUÍMICOS DEL PROCESO	48
9.2.1.	Hidróxido de Sodio (NaOH)	48
9.2.2.	Aire atmosférico	49
9.2.3.	Agua (H ₂ O).....	50
9.2.4.	Etanol (CH ₃ CH ₂ OH)	51
9.2.5.	Amoníaco (NH ₃).....	53
9.3.	DESCRIPCIÓN QUÍMICA DEL PROCESO	53
9.4.	DESCRIPCIÓN DETALLADA DEL PROCESO	54
9.4.1.	Sección 100: Acondicionamiento de materias primas y reacción	55
9.4.2.	Sección 200: Separación de productos de reacción.....	56
9.4.3.	Sección 300: Purificación.....	57
9.5.	DESCRIPCIÓN DETALLADA DE EQUIPOS.....	58
9.5.1.	Sección 100	58
9.5.2.	Sección 200	60
9.5.3.	Sección 300	63
10.	ESTRATEGIA DE CONTROL DEL PROCESO	64
10.1.	JUSTIFICACIÓN DE LA SELECCIÓN DE LA ESTRATEGIA DE CONTROL	64
10.1.1.	Algoritmo de control	66
10.2.	NOMENCLATURA Y SIMBOLOGÍA EMPLEADA	67
10.3.	VARIABLES DE CONTROL DEL PROCESO	68
10.3.1.	Sección 100	68
10.3.2.	Sección 200	71
10.3.3.	Sección 300	76
10.4.	VÁLVULAS DE ALIVIO.....	76
10.5.	ALARMAS E INDICADORES	77
11.	SEGURIDAD EN LA INSTALACIÓN	78
11.1.	INTRODUCCIÓN.....	78
11.2.	ÁMBITO JURÍDICO: NORMATIVA ACTUAL	79
11.3.	INVENTARIO DE SUSTANCIAS	80
11.4.	CLASIFICACIÓN DE ACUERDO CON EL REGLAMENTO CLP	81
11.5.	CLASIFICACIÓN DE LA INSTALACIÓN SEGÚN LA NORMATIVA SEVESO.....	83

11.6.	CLASIFICACIÓN NFPA DE LAS SUSTANCIAS.	85
11.7.	ESTUDIO DE REACTIVIDAD QUÍMICA DESCONTROLADA.	87
11.7.1.	Matriz de compatibilidad química.....	87
11.8.	DISTANCIAS DE SEGURIDAD EN LA PLANTA	89
11.9.	ÍNDICE DOW DE INCENDIO Y EXPLOSIÓN	92
11.9.1.	Selección de la unidad del proceso pertinente.....	93
11.9.2.	Factor del material (FM).....	93
11.9.3.	Factor de peligros generales del proceso (F ₁).....	94
11.9.4.	Factor de peligros especiales de proceso (F ₂).....	94
11.9.5.	Factor de peligro de la unidad de proceso (F ₃).....	96
11.9.6.	Determinación del índice DOW.	96
11.9.7.	Factor de daño	98
11.9.8.	Radio de exposición	98
12.	LEGISLACIÓN, NORMAS Y CÓDIGOS DE DISEÑO	99
12.1.	LEGISLACIÓN GENERAL	99
12.1.1.	Área comunitaria	99
12.1.2.	Área nacional	99
12.2.	LEGISLACIÓN ACERCA DE LA SEGURIDAD Y DE LA HIGIENE LABORAL	100
12.2.1.	Área comunitaria	100
12.2.2.	Área nacional	101
12.3.	LEGISLACIÓN ACERCA DEL MEDIO AMBIENTE	101
12.3.1.	Área comunitaria	101
12.3.2.	Área nacional	101
12.3.3.	Área autonómica.....	102
12.4.	NORMAS, GUÍAS Y CÓDIGOS DE DISEÑO	102
13.	BIBLIOGRAFÍA	103

1. Objeto y alcance

El desarrollo del presente proyecto tiene como objetivo el diseño de una planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft con una pureza del 98%. El diseño de la planta está pensado para que pueda albergar una capacidad de producción de 500 t/año, para lo cual se llevará a cabo un proceso en continuo durante 24 horas al día y 330 días al año.

Este documento se corresponde con el Trabajo de Fin de Grado a través del cual ambos alumnos optan al título universitario de Grado en Ingeniería Química por la Universidad de Santiago de Compostela.

Se trata de un proyecto ingenieril, el cual comprende una memoria descriptiva, incluida en el presente documento, en la que se realiza una descripción detallada del mismo, con sus respectivos anexos. En el proyecto también se incluyen los siguientes documentos: Planos, Estudios con entidad propia, Pliego de condiciones, y Presupuesto.

En referencia a los equipos, el alumno Martín Calvo Doce es el encargado del diseño del reactor de despolimerización de lignina R-101 en la Sección 100, mientras que el alumno Carlos Iglesias García desarrollará detalladamente el diseño de la columna de adsorción T-201/T-202, implementadas en la etapa de separación de productos, Sección 200.

2. Justificación del proyecto

Se ha decidido diseñar una planta de producción de vainillina de origen sintético en base a varios motivos:

Primeramente, satisfacer la creciente demanda de un producto de gran importancia en el sector alimentario y cosmético. La vainillina de origen natural no es capaz de cubrir dicha demanda ya que representa menos del 1% de la producción mundial, por lo que los procesos de obtención de vainillina sintética son los que sustentan la obtención de este producto a nivel mundial. [1]

La producción actual de vainillina sintética se centra en la obtención de este compuesto aromático a partir de hidrocarburos derivados del petróleo. En concreto, la mayor parte de la vainillina proviene del guayacol petroquímico, sintetizado en un proceso de dos etapas empleando ácido glioxílico. Sin embargo, es de vital importancia la búsqueda de otras vías de obtención de vainillina sintética más sostenibles con el medioambiente, a través de materias primas de origen renovable. [1]

Es en este punto donde este proyecto cobra sentido, ya que la obtención de un producto de alto valor añadido, vainillina al 98% de pureza, se realiza a partir de la valorización de un residuo de gran importancia y difícil tratamiento de la industria papelera, como lo es la lignina Kraft; usada como materia prima en el proceso. Este reaprovechamiento de un producto contaminante contribuye a la reducción de las emisiones al planeta.

Se retoma así el desarrollo de una alternativa a la obtención de vainillina a partir de guayacol, de origen petroquímico y no renovable, siendo la más empleada hoy en día.

Por último, cabe mencionar que el producto de alto valor añadido obtenido se logra a partir de un residuo con un coste inicial reducido, lo cual resulta muy interesante a nivel económico, ya que puede contribuir a obtener grandes beneficios a la vez que se contribuye a la sostenibilidad del planeta y la economía circular.

3. Producto: Vainillina (C₈H₈O₃)

3.1. Características

Vainillina es el nombre común del compuesto químico 4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído. En concreto se trata de un aldehído fenólico orgánico cuya fórmula molecular es C₈H₈O₃ y presenta un peso molecular de 152,2 g/mol. Sus grupos funcionales incluyen aldehído, fenol y éter.

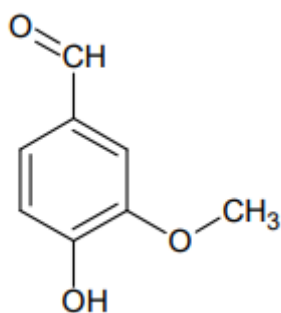


Figura 1: Molécula de 4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído, 1. Fuente: [2]

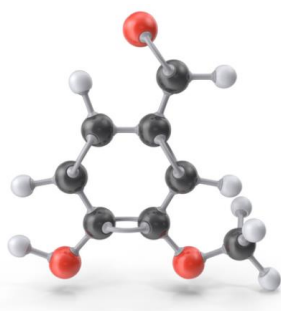


Figura 2: Molécula de 4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído, 2. Fuente: [3]

3.2. Propiedades físicas, químicas y termodinámicas

En la *Tabla 1* mostrada a continuación se presentan las propiedades físicas, químicas y termodinámicas del compuesto deseado:

Tabla 1: Propiedades físicas, químicas y termodinámicas del 4-Hidroxi-3-metoxibenzaldehído. Fuente: Elaboración propia a partir de [4]

Propiedad	Valor
Peso molecular (g/mol)	152,05
Densidad a 20°C (g/cm ³)	1,06
Presión de vapor a 25°C (hpa)	0,0029
Punto de fusión (°C)	81-83
Punto de ebullición a 1,013 hPa (°C)	285
Hidrosolubilidad a 25°C (g/L)	10
Punto de inflamación (°C) a 1.022 hPa (vaso cerrado)	159,8-160,8
Temperatura de autoignición (°C)	>400
Calor de combustión a 20 °C (kcal)	914,1

3.3. Historia

Hoy en día, la vainillina es uno de los compuestos de mayor importancia en la industria alimentaria y cosmética. Fue aislado por primera vez en el año 1858 por el químico y farmacólogo francés Theodore Nicolas Gobley. Se obtuvieron los primeros cristales de vainillina por evaporación de un extracto de la planta y una posterior recristalización de los sólidos resultantes. [5]

No fue hasta el año 1874 cuando se logró determinar la estructura química del compuesto, gracias a Ferdinand Tiemann y Wilhelm Haarmann. Ambos científicos alemanes, desarrollaron la primera síntesis para la obtención de vainillina, la cual consiste en la oxidación de la coniferina (sólido cristalino blanco, metabolito de las coníferas, pinos) con una disolución de bicromato de potasio y ácido sulfúrico. Se obtiene así glucovainillina, la cual tras un tratamiento ácido se divide en glucosa y vainillina. Años más tarde, Wilhelm Haarmann junto con otro estudiante, Karl Kudwig Reimer, desarrollaron otro método de síntesis de vainillina a partir de eugenol. Este compuesto se encontraba formando el aceite de clavo. [6]

A partir de los años 30, con la prohibición de la comercialización del clavo, se empezó a producir vainillina a través del proceso Kraft, empleado para la obtención de pulpa de papel y por el cual se genera un residuo denominado lignina. Hasta la década de los años setenta, la lignina fue la principal fuente de obtención de vainillina sintética. En ese momento se produjo un cambio en la producción industrial del compuesto, a partir del cual comenzó a descender el empleo de lignina como materia prima. Quedó en desuso debido al desarrollo en los desechos producidos por la industria de la pulpa de papel.

La obtención de la vainillina desde finales del siglo XX se basa en la síntesis en dos pasos, implantada por Rhodia a partir de guayacol de origen petroquímico. En menor medida (un 15% de la producción mundial) se sigue obteniendo partir de lignina, proveniente de la pasta de papel. [7]

3.4. Aplicaciones

La vainillina es uno de los saborizantes más populares a nivel mundial en la industria alimentaria. Alrededor de un 80% de la vainillina mundial está destinada a este sector. No solo se usa como condimento para proporcionar el propio sabor a vainilla en una gran variedad de alimentos y platos; sino que es un aditivo de gran utilidad en chocolates, helados, pastelería, etc. Es un elemento fundamental en sabores como chocolate, fresa, caramelo, etc. aportando cremosidad y proporcionándole cuerpo al sabor. [8] [9]

Otra de las industrias clave de este compuesto son los cosméticos. Su olor agradable y dulce la convierte en la base de numerosos perfumes. Esto es debido a los grupos funcionales que la componen. Tanto los aldehídos como los éteres que la conforman aportan un olor agradable al olfato. [10]

La vainillina y parte de los compuestos que se forman con ella presentan propiedades antimicrobianas, las cuales han sido estudiadas y se ha demostrado que ofrecen actividad antifúngica. En concreto, la fracción de aldehído de la vainillina es la que tiene el papel central en dicha actividad antifúngica. Ofrece protección frente a los alimentos gracias a sus propiedades antioxidantes debido a la actividad de eliminación de sus radicales libres. Esto permite proteger a ciertos alimentos frente a la oxidación. [11]

Por último, en cuanto a la aplicación farmacológica de la vainillina, se usa frecuentemente como tratamiento para la diabetes tipo 2, alteraciones cardiovasculares y obesidad. [9]

4. Materia prima

4.1. Lignina

4.1.1. Características

La lignina (del latín: *lignum*, madera) es una macromolécula tridimensional amorfa que conforma la pared celular de las plantas. Este compuesto, junto con la celulosa y la hemicelulosa, forman la lignocelulosa; principal componente estructural de las plantas. Aporta rigidez a la pared de la planta a la vez que le proporciona protección frente a agente microbianos. La lignina está formada por unidades de fenilpropano que se originan en la copolimerización de tres precursores primarios. Estos son el alcohol coniferílico, el alcohol sinapílico y alcohol p-cumarílico. [12] [13] [14]

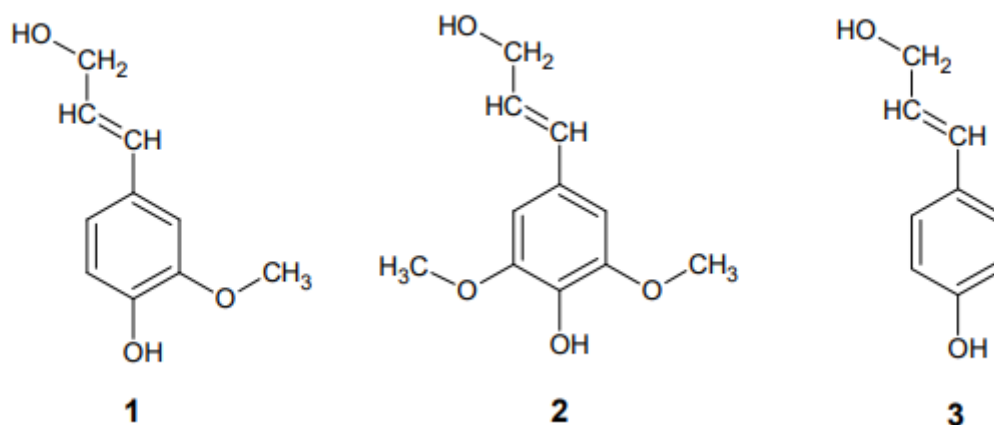


Figura 3: Principales monómeros que conforman la macromolécula de lignina: (1) Alcohol coniferílico, (2) Alcohol sinapílico, (3) Alcohol p-cumarílico. Fuente: [12].

La composición específica la lignina varía en función del origen, es decir, de la especie de árbol empleada. Principalmente, se diferencia entre lignina proveniente de maderas duras (angiospermas o árboles de hoja caduca: presentan una madera más densa y un crecimiento más lento) y maderas blandas (gimnospermas o árboles de hoja perenne). La contribución de la lignina expresada en masa/masa total de la madera seca se corresponde entre un 25-35% en madera blanda y entre un 18-25% para maderas duras. [12] [13] [14]

No obstante, al tratarse de un residuo proveniente de la pasta de celulosa, es ese proceso de obtención de papel de las industrias papeleras el que determina el tipo de lignina obtenido. Los tres principales tipos de lignina son la lignina tipo sulfito, lignina tipo soda y lignina tipo Kraft. [14]

El presente proyecto emplea lignina tipo Kraft (álcali) como materia prima para la obtención de vainillina.

4.1.2. Propiedades

La lignina es una macromolécula 3D para la cual no posible determinar muchas de sus propiedades físicas y químicas. En función de la clase de madera de la que provengan existen grandes variaciones. Para el tipo en concreto de lignina Kraft obtenida a partir de madera blanda (*softwood*), se presenta la *Tabla 2* en la que se recogen ciertas propiedades de esta materia prima.[12]

Tabla 2: Propiedades de la Lignina Kraft. Elaboración propia. Fuente: [12].

Propiedad	Valor
Color	Marrón oscuro
Estado físico	Sólido
Peso molecular (g/mol)	2000-3000*
C₉ FORMULA	C ₉ H _{7.759} O _{2.479} N _{0.006} S _{0.065} (OCH ₃) _{0.597}
Peso molecular en unidades de C₉	176,09
Densidad a 25°C (g/cm³) [15]	1,3
Densidad aparente (lb/cu.ft)	23 (suelta) 32 (empacada)
Temperatura de transición (°C)	188
Solubilidad	Soluble en álcali (pH>10.5), acetona, piridina, DMF (Dimetilformamida), metilcelosolve NaOH: 0.05% (caliente 5% acuoso) MEK: parcialmente soluble benceno: insoluble dioxano: soluble etilenglicol: soluble hexano: insoluble metanol: parcialmente soluble
pH (25 °C, 5%, disolución acuosa)	6,5
Poli dispersión	2-3

*En base a la bibliografía encontrada se decide estimar un peso molecular medio para la lignina Kraft de 2325 g/mol. [12]

5. Estudio de mercado

La vainillina es uno de los compuestos aromáticos más empleados a nivel mundial. Supone el principal saborizante usado en la industria alimentaria al mismo tiempo que, gracias a sus propiedades, tiene importantes aplicaciones en la industria cosmética y farmacéutica, entre otras. Debido a las diferentes formas de obtención y síntesis de este compuesto; tanto la cantidad producida al año como el mercado y el precio de venta presentan un amplio rango de valores.

5.1. Mercado de la vainillina

En este estudio de mercado referente al producto obtenido, se realizarán dos análisis paralelos en los que se analizarán la producción y consumo, exportaciones e importaciones y evolución de los precios de los dos grandes tipos de vainillina que se producen a nivel mundial: vainillina natural y vainillina de origen sintético. Los procesos de obtención serán explicados detalladamente en el apartado *6. Estudio de alternativas*.

5.1.1. Producción y demanda global

La producción mundial de vainillina, independientemente de su origen u obtención, se encuentra en una horquilla entre las 18.000 y 20.000 t/año a mediados de la década de los años diez del siglo XXI, dependiendo del año y de la información proporcionada por el artículo. Como ejemplo más concreto, la demanda/producción en el año 2016 fue de 18.653,9 t/año [16]. Por otro lado, de acuerdo con [23], la estimación de producción mundial de 15.000-16.000 t/año, algo más conservadora. No obstante, a comienzos de década, la demanda mundial se sitúa en 2.590 t/año de vainillina natural y 37.296 t/año de vainilla de origen sintético. [17]

Esto muestra la creciente demanda de un producto de gran valor, a causa en su mayor parte, al aumento del consumo de alimentos y bebidas en el mundo (uso de vainilla como saborizante). También son factores clave el incremento de la vainilla en industrias como la cosmética y farmacéutica o la producción de fragancias. [16]

Se espera que, a partir del año 2021, el mercado de la vainilla experimente un crecimiento estimado entre un 3-8,5% expresado como tasa compuesta anual (*CAGR*) para alcanzar así una producción que supere las 3000 toneladas de vainilla natural y las 60.000 t/año de la homóloga sintética. [17]

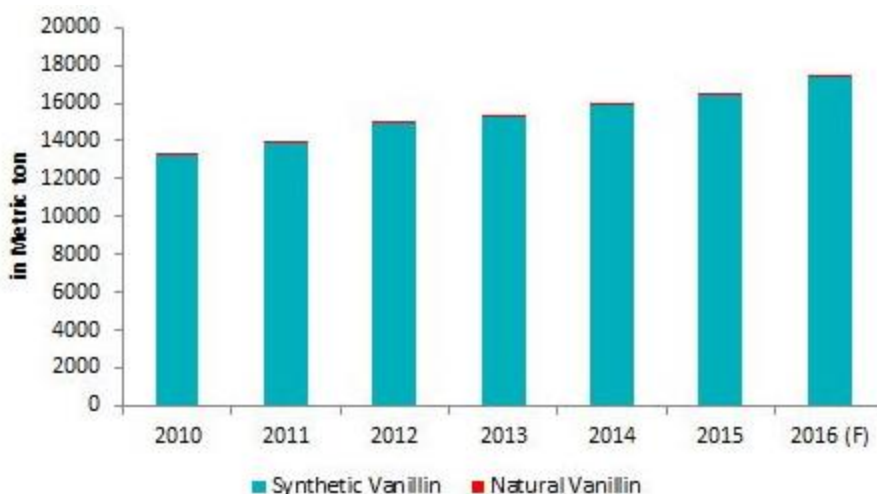


Figura 4: Evolución de la producción mundial de vainillina (ton/año). Fuente: [18]

En la *Figura 4* se muestra la evolución de la producción de vainillina en el periodo desde el 2010 al 2016. Se observa gráficamente la tendencia ascendente recogida en los párrafos anteriores, la cual se ha continuado cumpliendo desde el año 2016 hasta el presente. De acuerdo con los estudios de mercado realizados, la demanda continuará creciendo para los años venideros. [18]

En cuanto al volumen de mercado en términos económicos, el aumento de la producción de vainillina para cubrir la demanda mundial (creciente cada año) se ve reflejado en el beneficio anual mundial alcanzado.

El comercio de vainilla a nivel mundial representa un 0.008% del total mundial de acuerdo con el observatorio de complejidad económica [18]. El tamaño de mercado real fue de 395,2 millones de dólares estadounidenses para el año 2016 mientras que en el año 2019 este ya aumenta hasta los 971,3 millones. En la *Figura 5* se recoge la estimación para el año 2025 a un crecimiento anual de un 5,2%. [16] [19]



Figura 5: Volumen de mercado mundial de vainillina y estimación para el año 2025. Fuente: [19]

5.1.2. Distribución del mercado

5.1.2.1. Tipo de industria

La gran variedad de aplicaciones que posee la vainillina hace que el mercado mundial esté distribuido en tres grandes industrias: [18]

- Alimentación y bebidas (F&B)
- Cosméticos y perfumes (Cosmetics & perfume)
- Farmacéuticos (Pharmaceutical)

En la *Figura 6* mostrada a continuación se observa la distribución de la producción de vainillina hacia cada industria; el ámbito de la alimentación abarca aproximadamente la mitad de la producción (tanto bebidas como comida), por lo que se convierte en el principal mercado de este producto. [18]

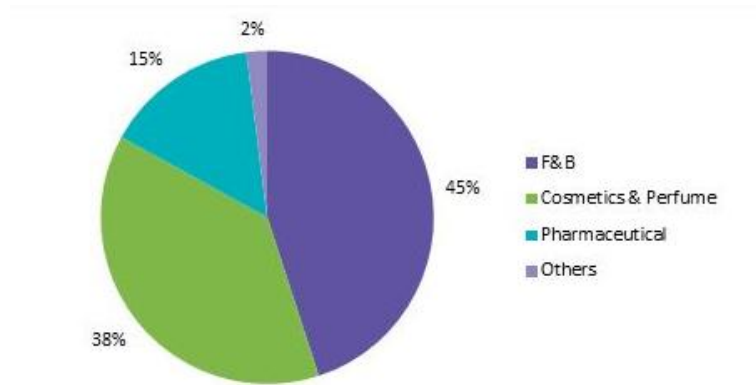


Figura 6: Distribución de la vainillina para cada tipo de mercado. Fuente: [18]

5.1.2.2. Distribución geográfica

El mercado de vainillina, tanto producción como consumo, está establecido en distintas regiones del planeta en función del tipo de vainillina que se produzca y del consumo de cada país. La *Figura 7* representa las regiones con mayor peso.



Figura 7. Distribución geográfica mundial del consumo de Vainillina. Fuente: [20]

Dentro de la zona con mayor peso, la región Asia-Pacífico está en el número 1 en cuanto al tamaño de mercado. Es el principal productor y consumidor de vainillina en el mundo y los estudios de previsión indican que ambos factores seguirán aumentando con el paso de los años. En el año 2016 esta región representó alrededor de un 40% de los ingresos totales en el mundo. En concreto, China es el principal productor y consumidor; país en el cual cada año hay entre 50 y 100 millones más de consumidores de vainillina y que en el 2018 representó el mayor exportador de vainillina. [16] [20]

En segundo lugar, se encuentra Europa, con unos ingresos superiores al 25% del total mundial para ese mismo año. El principal motivo por el que Europa ha experimentado un aumento en la producción es la conciencia de la población en consumir alimentos de origen natural y sostenible. Los países más destacados dentro del continente europeo son Reino Unido, Alemania y Francia. [16] [20]

Por último, hay que destacar América del norte, especialmente Estados Unidos donde la industria farmacéutica tiene gran peso y hace que la demanda de vainillina aumente. [16] [20]

5.1.3. Producción en función del tipo, precios, exportadores e importadores.

En la actualidad, las tres principales fuentes de obtención de vainillina que cubren la demanda mundial son: extracción natural a partir de vainas de vainilla, síntesis de vainillina sintética a partir de fuentes derivadas del petróleo (en concreto, guayacol) y vainillina producida a partir de lignina, un residuo derivado de la industria de pulpa de papel. También se han desarrollado métodos para obtener vainillina mediante fermentación (uso de microorganismos) para obtener un producto de origen más natural y sostenible que las fuentes fósiles; no se han desarrollado a nivel industrial y es pronto para tratar su posición en el mercado, en parte debido al alto coste del ácido ferúlico y eugenol, materias primas para dicho proceso. [21]

5.1.3.1. Vainillina/vainilla natural

La vainillina natural se obtiene a partir de un extracto de las vainas de la planta de vainilla, de la familia de las orquídeas. Existen tres principales variedades de plantas de vainilla que se cultivan en el mundo, aunque la más representativa es la *Vanilla planifolia*.

La producción anual de vainillina de origen natural representa un 0,1% sobre el total de demanda mundial. Esto se debe a: Para el año 2020, tal y como se indicó en el *Apartado 5.1.1 Producción y demanda global* se obtuvieron 2590 toneladas de vainas de vainilla de origen natural.

No obstante, de las vainas de vainilla curadas, obtenidas de la planta, únicamente el 2% en peso seco es vainillina (20 g V/kg vaina) [22]. Es por ello por lo que el contenido de vainillina es de solo 50 toneladas aproximadamente.

A mayores, para producir aproximadamente 500 kg de vainas de vainilla se necesita la polinización de aproximadamente 40.000 flores, lo que supone enormes extensiones de terreno para producir muy poca cantidad de vainillina. Se estima que la producción de vainillina natural genera cerca de 250 millones de dólares e involucra a más de 200.000 trabajadores. [23]

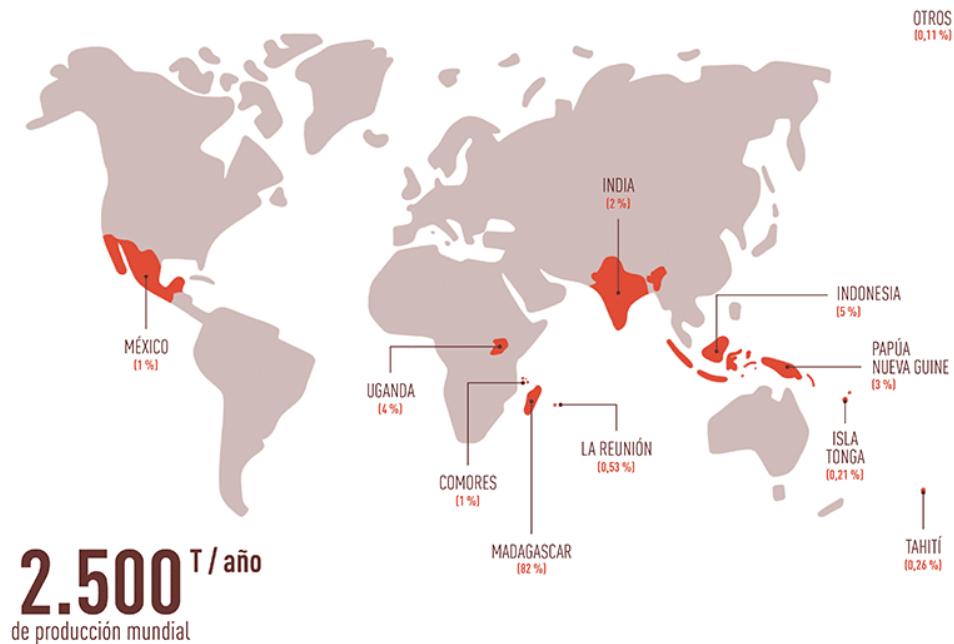


Figura 8: Producción de vainilla natural en el mundo. Fuente: [24]

Tal y como se observa en la *Figura 8*, el principal productor mundial de vainillina natural es la isla de Madagascar, la cual representa más de la mitad de la producción. El segundo en el ranking es Indonesia.

Estas condiciones provocan que el precio de la vainillina natural presente unos valores muy altos. A principios de siglo el precio de las vainas de vainilla se situaba en 25 \$/kg lo que supone un precio de 1.250 \$/kg. No obstante, otras fuentes indican que su precio oscila entre los 1.500-4.000 \$/kg. Hoy en día, su precio se ha disparado debido al aumento de la demanda por parte de las grandes empresas alimentarias (Nestlé) que pretenden producir alimentos más sostenibles. Actualmente el precio es de 500 \$/kg para las vainas de vainilla lo que supone 25.000 \$/kg de vainillina. [23] [25]

5.1.3.2. Vainillina sintética

Representa el 99,9% de la producción mundial de la cual un 85% se obtiene a partir del guayacol, un compuesto fenólico derivado de la industria petroquímica. El precio es mucho menor al de la vainillina de origen natural y se sitúa entre los 10 y los 20 \$/kg. [22] [25]. Se puede ver la evolución de su precio en la *Figura 9*, el cual ha experimentado un repunte desde mediados del año 2021.

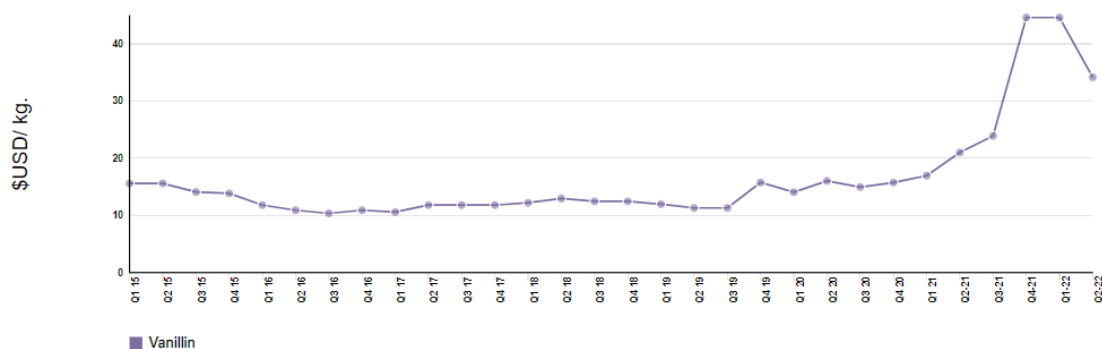


Figura 9: Evolución del precio de la vainillina sintética. Fuente: [26]

La producción de vainillina sintética de origen petroquímico se concentra en Estados Unidos, Francia, China y Japón. En referencia a empresas, el sector está dominado por la empresa Solvay, la cual supone más de la mitad de la producción mundial. Otras empresas importantes son *Apple Flavor & Fragrance Group Co Ltd.*, el *Grupo Merk*, *Lesaffre*, *Evolva Holding* [20] [22]

Por otro lado, el 15% restante es vainillina obtenida a partir de lignina, un residuo derivado de la industria de la pulpa de papel. Toda la producción se concentra en la empresa noruega *Boorregaard* que se encuentra en el 2º puesto en el ranking mundial de empresas productoras de vainillina. Esta empresa obtiene un producto de alta calidad que, a pesar de que técnicamente no es considerado natural, ante las principales empresas es muy valorado ya que se trata de un proceso al 90% sostenible. Además, la vainillina obtenida a partir de esta materia prima es altamente valorada debido a los matices adicionales que aportan la presencia de otros compuestos aromáticos presentes en la lignina [21]. Presenta un precio situado en un rango de 100-200 \$/kg. [22] [27]

5.1.3.3. Biovainillina

La creciente demanda en la última década de vainillina obtenida a partir de fuentes más sostenibles y, sobre todo, un producto más natural, ha dado pie a el desarrollo de numerosas investigaciones para desenvolver otro tipo de proceso de obtención.

Dicha demanda está representada por grandes empresas de la industria alimentaria como son *General Mills*, *Hershey's*, *Kellogg's*, y *Nestlé* que han decidido sustituir los sabores artificiales por otros más naturales, ante el cambio de modelo de producción hacia caminos más sostenibles que reclama la sociedad en los últimos años. [16] [21]

La empresa *Solvay* ha desarrollado un proceso de obtención de vainillina por fermentación de ácido ferúlico, obtenido a partir del salvado del arroz. Por otro lado, la empresa *Evolva* e *IFF* ha creado un proceso de características similares usando como materia prima azúcar con levadura de cerveza. El precio de venta de este tipo de vainillina es de 400-600 \$/kg. [25] [27]

5.2. Mercado de las materias primas: Lignina

El estudio de mercado de la lignina, materia prima seleccionada para este proyecto, es clave para desarrollar así un correcto análisis de mercado y evaluar la producción de vainillina a partir de esta fuente.

La lignina es el segundo componente estructural mayoritario de la madera. El contenido de lignina presente oscila en un amplio rango en función del tipo de madera y de la especie de planta a la que esté referida. El proceso que sufren las denominadas ligninas naturales (presentes en las células de la biomasa) para ser aisladas del material lignocelulósico, provoca modificaciones en su organización estructural. Se originan lo que se conoce como ligninas comerciales o ligninas técnicas. [12]

La principal fuente de obtención de lignina es la industria del papel, de la cual se generan 300 billones de toneladas al año. 1,65 megatoneladas/año se corresponden con los dos principales tipos de ligninas técnicas: [28]

- Ligninas libres de sulfuros: Hay principalmente tres tipos entre los que destacan la lignina procedente del Proceso Organosolov y lignina del proceso “Soda Pulping”. [12]
- Ligninas con contenido en sulfuros: Los dos grandes tipos son la lignina Kraft (derivada del proceso Kraft el cual representa el 90% de la producción mundial de pulpa de papel) y los lignosulfonatos (sulphite lignin). Este último domina el mercado mundial de ligninas técnicas con un porcentaje de producción que supera el 80% del total. [12]

En la *Figura 10*, se observa el reparto de mercado mundial de lignina técnica en base a la producción en kilotoneladas.

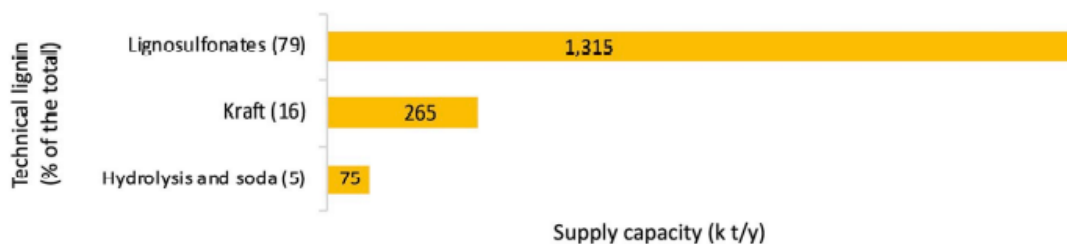


Figura 10: Producción mundial de ligninas técnicas en el año 2018. Fuente: [28]

La producción de lignina se destina en un 57,7% sobre los ingresos totales a las macromoléculas, enfocado a la obtención de fibras de carbono, biocombustibles, etc. Las estimaciones futuras prevén un crecimiento de la demanda de estos productos, sobre todo en el sector de la automoción y la construcción; debido al uso de materiales en los que están presentes derivados de la lignina. El restante 43,3% se destina a la obtención de compuestos aromáticos, la cual ha tenido una creciente inversión en base a la necesidad de reducción de emisiones de efecto invernadero y la obtención de materias primas de origen natural. En la *Figura 11* se muestra el reparto del mercado global de lignina para el año 2019.

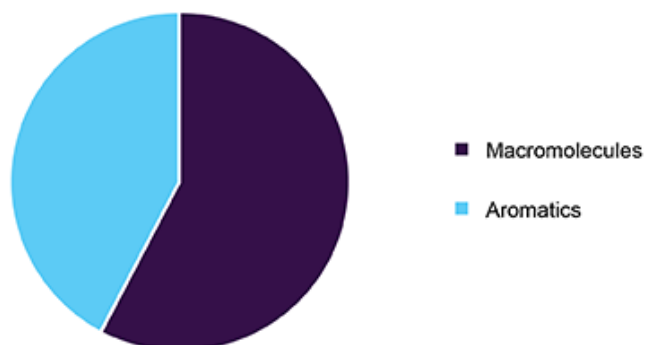


Figura 11: Aplicaciones del mercado global de lignina en el año 2019. Fuente: [29]

La clasificación de las mayores empresas y países productores de lignina está dominada por las plantas de producción de lignosulfonatos. La empresa más importante es *Borregaard LignoTech*, representando el 60% de la producción total de lignina técnica. Está situada tanto en Europa como en Estados Unidos, en la que se encuentra asociada con la empresa *Rayonier Advanced Materials Inc*. Le siguen la empresa *Tembec, Inc* y *Domsjö Fabriker* como las más importantes en el mundo. La mayor producción de lignina técnica se encuentra en los Estados Unidos, seguida de China con seis fábricas productoras de lignosulfonatos. La *Figura 12* muestra la distribución geográfica mundial de las zonas con mayor producción de lignina.

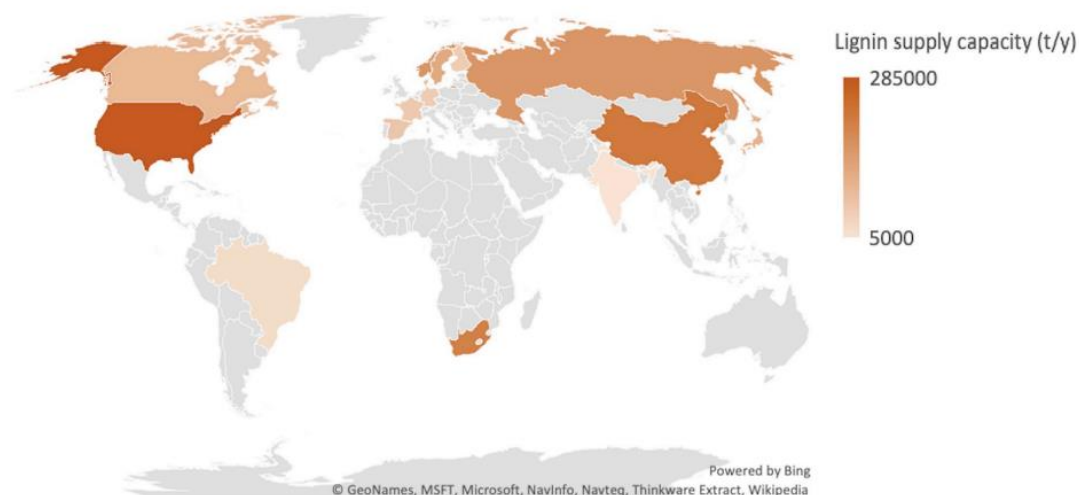


Figura 12: Países con mayor producción de lignina. Fuente: [28]

Actualmente la mayoría de la lignina obtenida de estos procesos es quemada para obtener energía o es destinada a tratamiento. No obstante, la creciente demanda de productos químicos procedentes de fuentes renovables ha reactivado el interés por el uso de la lignina como materia prima; como es el caso de la producción de vainillina. De esta manera se sustituiría a los procesos petroquímicos, que dominan la producción mundial de vainillina en la actualidad. [30]

5.2.1. Lignina Kraft

La producción mundial de lignina Kraft en el año 2018 se estimó en 265.000 t/año y se estima que para el año 2025 se alcancen las 2.500.00 t/año. Su precio oscila en función de la pureza que se quiera obtener, lo que influye en la aplicación final de la lignina. Parte de un precio de entre 70-150 \$/t cuando se destina a generación de energía, hasta precios superiores a los 1000 \$/t cuando se emplea para materiales y compuestos químicos. En función del tipo de tratamiento que se lleve a cabo el precio varía: Por ejemplo, la lignina derivada del método Kraft y posteriormente tratada con el proceso “LignoForce” presenta un precio de 600 \$/t. Se puede considerar que el precio de lignina Kraft sin modificación oscila entre los 260-500 \$/t, siendo la media 380\$/t. [28]

Las principales empresas productoras de este tipo de lignina son *Aditya Birla Domsjö* en Suecia, *Borregaard LignoTech* en Noruega, *Stora Enso* en Finlandia, *Ingevity* en los Estados Unidos, *WestRock Co.*, *Domtar corporation*, *MeadWestvaco Corporation*, etc. [28]

5.2.2. Lignosulfonatos

Representan el 80% del mercado global, destinado principalmente a la producción de concreto (hormigón) en el creciente sector de la construcción en países como China, EE. UU. o India.[29].

La producción mundial para el año 2018 es de 1.315 kilotoneladas y se estima que para el año 2025 aumente hasta las 2000 kilotoneladas. Su precio oscila en el rango de 180-500 \$/t.

Las principales empresas productoras son *Borregaard LignoTech* en los Estados Unidos, *Tembfibre*, *Fraser Paper*, etc. [12]

6. Estudio de alternativas

En este apartado se analizarán las distintas rutas que pueden ser seguidas para la obtención de vainillina. Posteriormente, se realizará la justificación de la alternativa seleccionada para llevar a cabo el proceso en base a las características analizadas de cada una de las alternativas.

6.1. Oxidación de lignina Kraft en medio ácido

En este primer grupo se analizarán las alternativas en las que, en la primera de las etapas, etapa de reacción, se lleva a cabo un proceso común de oxidación de la lignina Kraft en medio ácido, siendo el objetivo de dicha oxidación la despolimerización de dicha materia prima. Para llevar a cabo este proceso de oxidación se realiza una disolución de lignina Kraft, metanol, agua y ácido sulfúrico, la cual será introducida en el reactor. La adición de agua y metanol es necesaria para la realización de la mezcla ácida de la corriente de entrada al reactor. La mezcla ácida se alimenta al reactor, donde una corriente de aire proporcionará el oxígeno que actuará como oxidante en la reacción, la cual llevará a cabo a una temperatura de 210°C y a una presión de 48 bar. [31]

A continuación de la etapa de reacción, se encuentra la etapa de recuperación de reactivos. La corriente de salida del reactor se introduce ahora en un separador flash, donde se lleva a cabo la separación de los compuestos en fase gas (agua, metanol y aire) de la corriente líquida de productos. Esta corriente gaseosa será sometida a destilación para separar los mencionados compuestos, permitiendo de esta manera la recirculación del metanol.

La corriente líquida será sometida a un proceso de filtración y destilación, logrando separar lignina no despolimerizada y metanol respectivamente, siendo ambos recirculados a la entrada del proceso. [31]

La diferencia entre las distintas alternativas que llevan a cabo la oxidación en medio ácido reside en la siguiente etapa, separación de los productos. A continuación, se describirán los distintos procesos de separación que se pueden seguir para llevar a cabo la obtención de vainillina.

6.1.1. Extracción empleando acetato de etilo como solvente

La separación de los productos se realiza mediante una extracción líquido-líquido, empleando para ello acetato de etilo como disolvente para la separación de los mismos del ácido sulfúrico y el agua restante.

Esto hace posible que pueda recuperarse el ácido sulfúrico por medio de un proceso de destilación, separándolo del agua y de una pequeña parte de acetato de etilo arrastrado de la torre de extracción, y recirculándolo a la entrada del proceso. La corriente de productos que sale por colas de la mencionada columna de destilación pasa por una última etapa de destilación con el objetivo de recuperar el disolvente, que será recirculado de nuevo a la torre de extracción. Finalmente, se lleva a cabo una cristalización con el objetivo de purificar el producto de interés, la vainillina, en unas condiciones de temperatura y presión de 5°C y 1 bar, respectivamente. [31]

En la *Figura 13* puede observarse el diagrama de bloques correspondiente a un proceso de oxidación de lignina Kraft en medio ácido utilizando acetato de etilo como disolvente para la extracción.

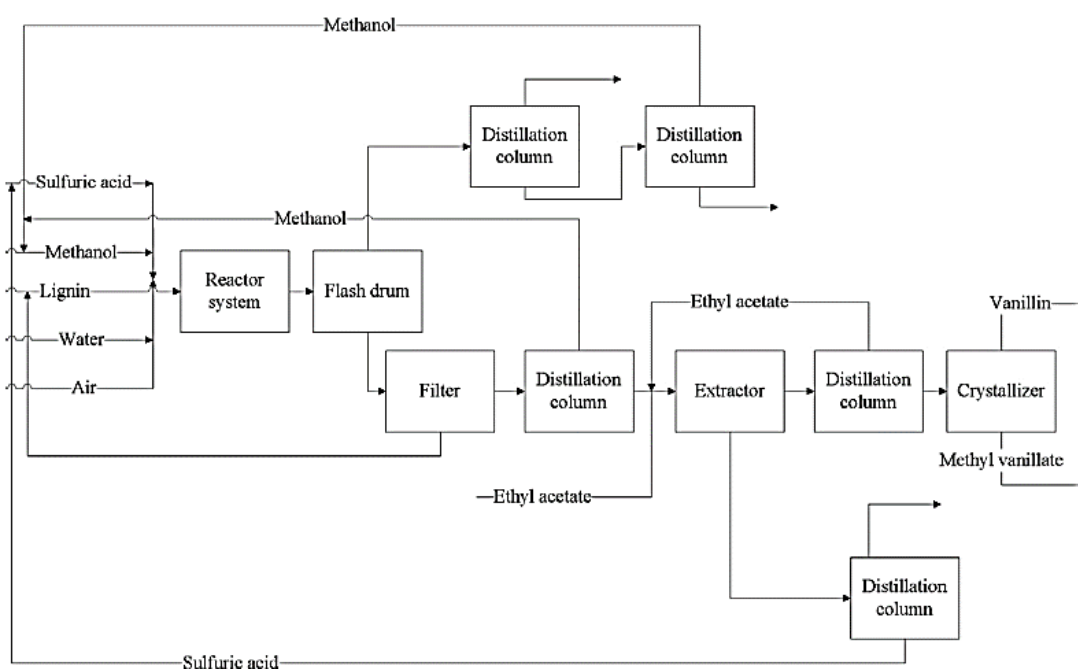


Figura 13: Diagrama de bloques de un proceso de oxidación de lignina Kraft en medio ácido empleando acetato de etilo como solvente. Fuente: [31]

6.1.2. Extracción empleando benceno como solvente

Las etapas de proceso que sigue esta alternativa son idénticas al del caso anterior, hallándose la única diferencia en el tipo de solvente utilizado en la torre de extracción para realizar la separación del ácido sulfúrico y agua del resto de productos, empleando en este caso benceno como compuesto para llevar a cabo dicha tarea. [31]

En la *Figura 14* puede observarse el diagrama de bloques correspondiente a un proceso de oxidación de lignina Kraft en medio ácido utilizando benceno como disolvente para la extracción.

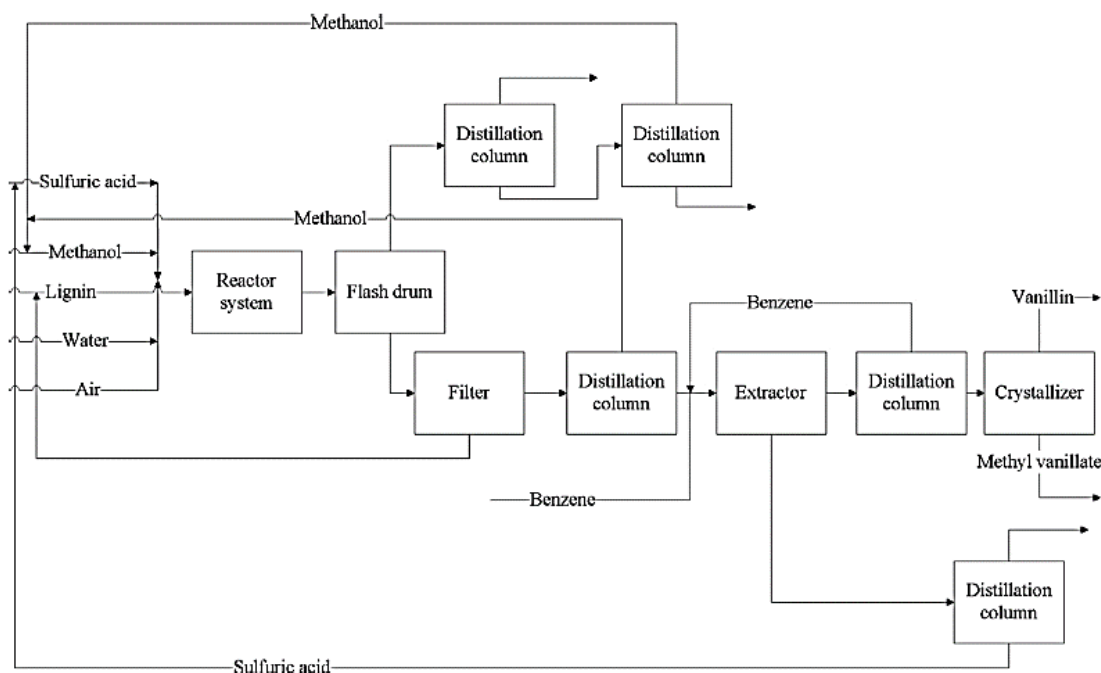


Figura 14: Diagrama de bloques de un proceso de oxidación de lignina Kraft en medio ácido empleando benceno como solvente. Fuente: [31]

6.1.3. Separación por medio de nanofiltración con solvente orgánico

En este caso, la corriente de colas procedente de la columna de destilación, que opera con el objetivo de recuperar el metanol, será sometida a una filtración para la separación del ácido sulfúrico y agua, junto con el acetato de etilo adicionado a la entrada de dicho filtro con el objetivo de preparar la corriente para el proceso de filtración de los productos de reacción. La corriente de salida del filtro que contiene el ácido sulfúrico, agua y acetato de etilo será sometida a un proceso de destilación llevada a cabo en dos columnas dispuestas en serie, lo cual permite la recuperación del acetato de etilo, que será recirculado a la entrada del filtro, y la recuperación del ácido sulfúrico, que será recirculado a la entrada del proceso. [31]

En cuanto a la corriente que contiene los productos se realiza un proceso de destilación con el objetivo de eliminar cualquier remanente de acetato de etilo, siendo enviada la corriente de productos al cristalizador, para que pueda ser llevada a cabo la última etapa, purificación de la vainillina. [31]

En la *Figura 15* puede observarse el diagrama de bloques correspondiente a un proceso de oxidación de lignina Kraft en medio ácido utilizando nanofiltración con acetato de etilo como solvente orgánico para llevar a cabo la separación.

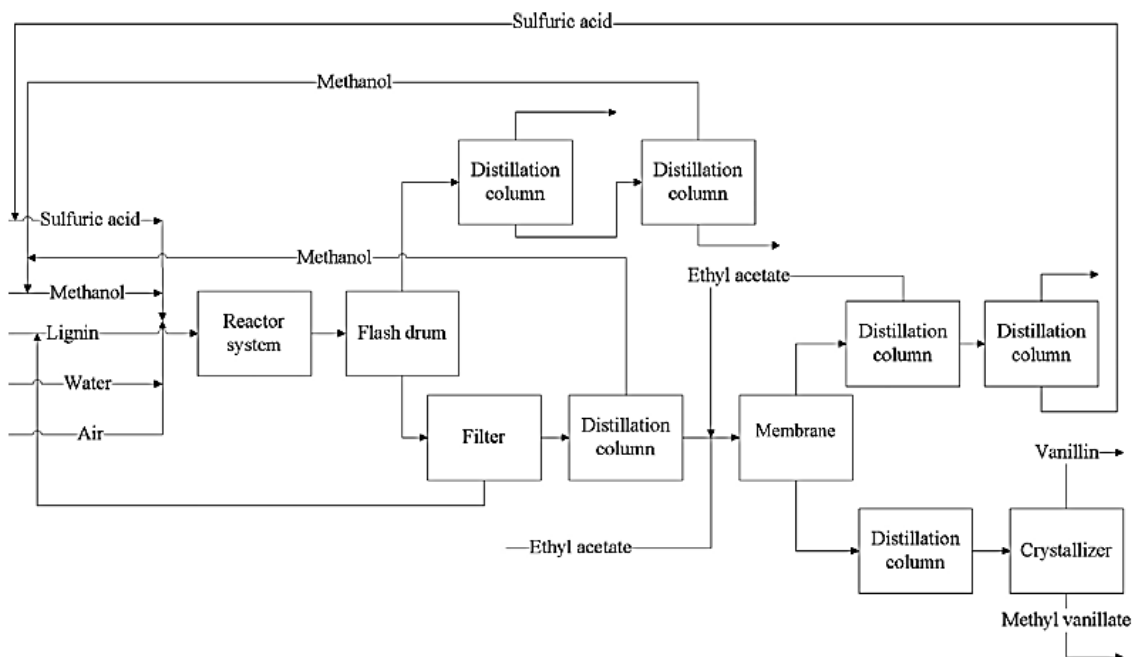


Figura 15: Diagrama de bloques de un proceso de oxidación de lignina Kraft en medio ácido empleando nanofiltración con solvente orgánico. Fuente: [31]

6.1.4. Separación mediante adsorción con zeolita

En este caso, la separación del ácido sulfúrico y agua del resto de productos se realiza mediante un proceso de adsorción llevado a cabo a una temperatura de 40°C, empleando zeolita como material adsorbente. En la torre de adsorción, los productos son adsorbidos por la zeolita, efluyendo por colas de dicha torre. La recuperación del adsorbente se realizará por medio de un separador centrífugo, lo que permite la recirculación de este. La corriente líquida que contiene los productos pasa ahora a la última etapa, purificación, que se llevará a cabo de la misma manera que en las alternativas explicadas anteriormente. [31]

El ácido sulfúrico y el agua no adsorbidos serán separados en una columna de destilación para la recirculación del primer compuesto a la entrada del proceso. [31]

En la *Figura 16* puede observarse el diagrama de bloques correspondiente a un proceso de oxidación de lignina Kraft en medio ácido utilizando un proceso de adsorción con zeolita como material adsorbente.

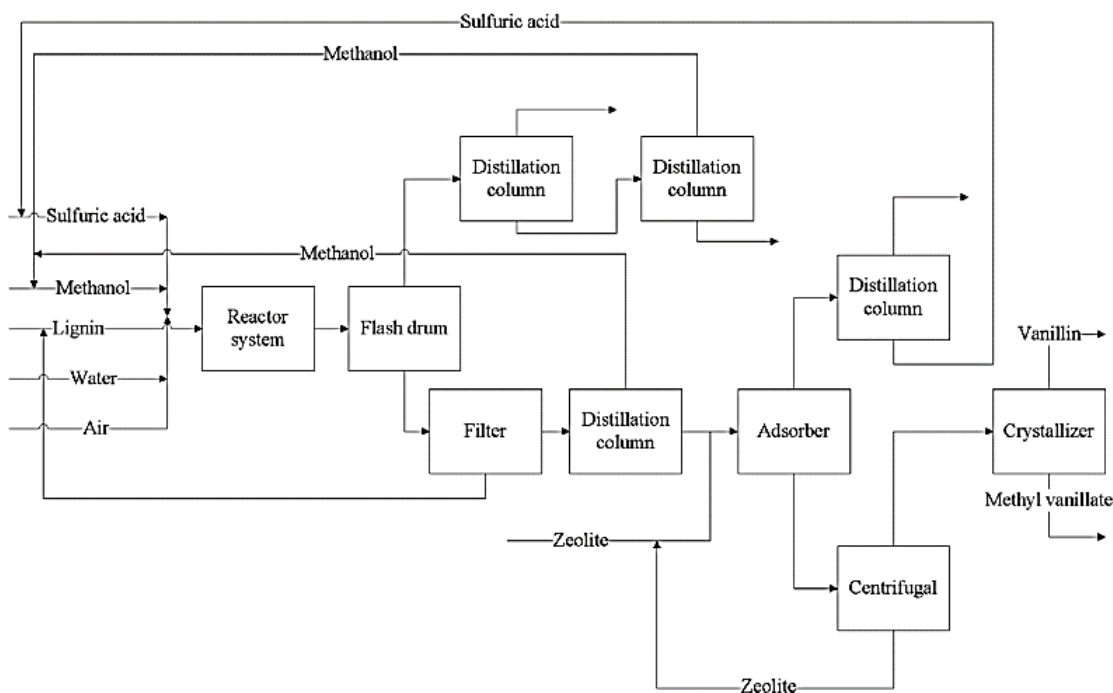


Figura 16: Diagrama de bloques de un proceso de oxidación de lignina Kraft en medio ácido empleando un proceso de adsorción con zeolita como material adsorbente. Fuente: [31]

6.2. Oxidación de lignina Kraft en medio básico

En este segundo grupo se analizarán las alternativas que siguen una primera etapa, etapa de reacción, común, diferenciándose entre ellas en los distintos procesos que se llevan a cabo en la etapa de separación.

La etapa de reacción se basa en la oxidación de lignina Kraft en medio básico ($\text{pH} > 11,5$), comenzando para ello con una disolución de lignina Kraft con hidróxido de sodio (NaOH) y agua. Dicha corriente se tratará en el reactor introduciendo una corriente de aire, donde se llevará a cabo la despolimerización de la lignina Kraft, en unas condiciones de presión absoluta y temperatura de 10 bar y $160\text{ }^{\circ}\text{C}$, respetivamente. Seguidamente, la corriente de salida del reactor se envía a un separador flash, previa disminución de presión y temperatura hasta alcanzar condiciones atmosféricas, donde se separará parte del agua de la corriente efluente del reactor. A continuación, la corriente que contiene los productos se someterá a un proceso de neutralización adicionando ácido sulfúrico en el reactor de neutralización, formándose sulfato de sodio (Na_2SO_4) como producto de la reacción de dicha neutralización. Posteriormente, la corriente efluente del reactor de neutralización se somete a un proceso de filtración para separar la lignina Kraft no despolimerizada del resto de productos, que será recirculada a la entrada del reactor. [32]

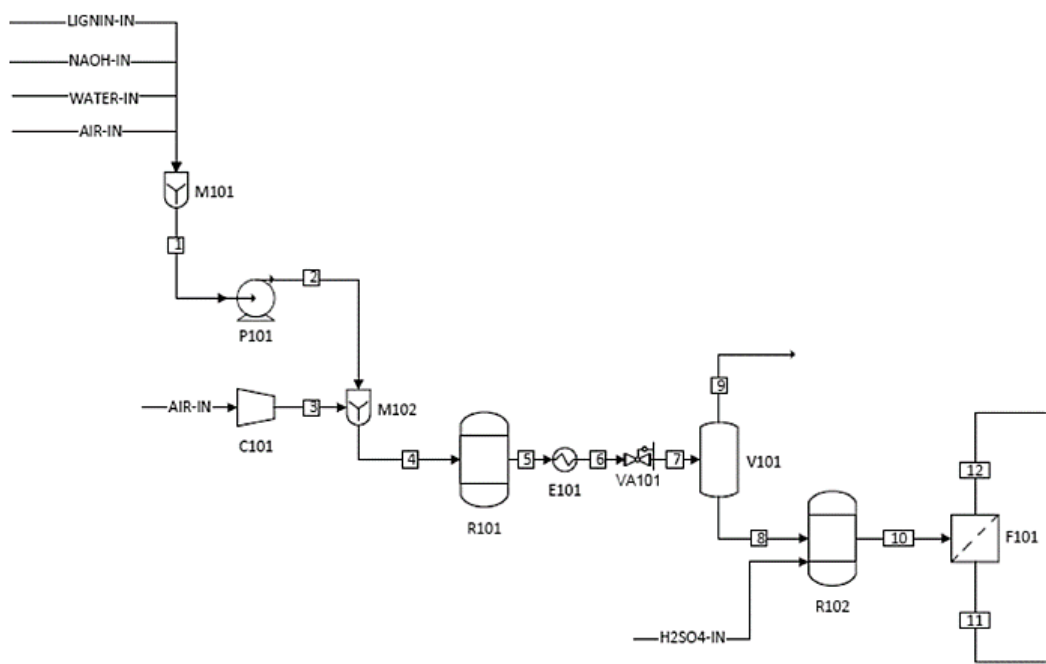


Figura 17: Diagrama de proceso perteneciente a la etapa de reacción para la producción de vainillina mediante oxidación de lignina Kraft en medio básico. Fuente: [32]

La diferencia entre las distintas alternativas que llevan a cabo la oxidación en medio básico reside en la etapa de separación de los productos. A continuación, se describirán los distintos procesos de separación que se pueden seguir para llevar a cabo obtener la vainillina.

6.2.1. Extracción líquido-líquido con destilación

La corriente de productos procedente del filtro para la separación de la lignina Kraft no despolimerizada se envía a una torre de extracción, en la cual se separará el sulfato sódico (Na_2SO_4) del resto de compuestos de la corriente, entre los que se encuentra la vainillina. Para ello, se empleará acetato de etilo como solvente, introduciéndolo por colas de la torre, el cual extraerá los compuestos fenólicos de la corriente de entrada. La corriente de salida por colas de la columna estará compuesta por el sulfato de sodio procedente de la corriente de entrada y una pequeña cantidad de acetato de etilo y agua. [32]

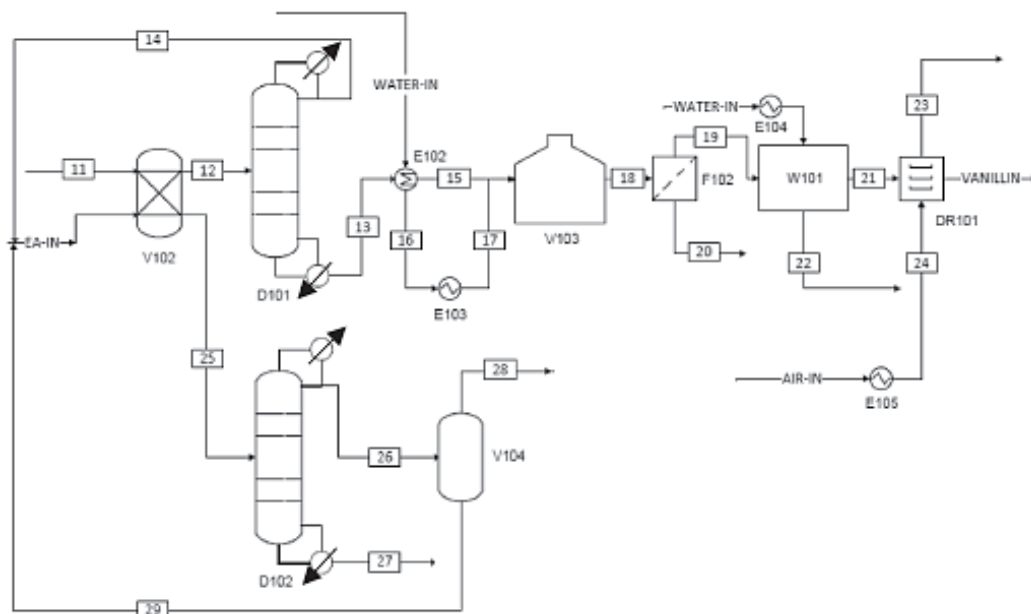


Figura 18: Proceso de separación y purificación de vainillina por extracción líquido-líquido y destilación obtenida mediante oxidación de lignina Kraft en medio básico. Fuente: [32]

La corriente de salida por cabezas de la torre, la cual contiene compuestos fenólicos y acetato de etilo, es enviada a una columna de destilación, donde se separará el solvente del resto de compuestos por cabezas de esta columna para ser recirculado a la torre de extracción. El proceso de separación de la vainillina continúa su camino, siendo la siguiente fase la de separación de esta del resto de compuestos fenólicos, operación que se lleva a cabo en un cristalizador. [32]

En él, se introduce una corriente de agua con el objetivo de saturar la mezcla y obtener, por medio de una filtración posterior, cristales de vainillina de la mayor pureza posible. Sin embargo, debido a que los cristales de vainillina albergan una pequeña cantidad de otros compuestos fenólicos, serán lavados con agua y posteriormente secados, obteniendo finalmente vainillina de muy alta pureza. [32]

La corriente de salida por colas de la torre de extracción será enviada a una columna de destilación, donde por cabezas se separarán el agua y acetato de etilo del sulfato de sodio, cuya salida será por colas de columna para el tratamiento pertinente. La recirculación del acetato de etilo a la torre de extracción se realizará previa separación del agua de dicho compuesto en un separador flash, evitando de esta manera la acumulación de agua en el sistema. [32]

6.2.2. Extracción líquido-líquido en dos etapas

En este caso, el proceso de separación comienza de la misma manera que en la alternativa descrita en el apartado 6.2.1. *Extracción líquido-líquido con destilación*, donde se realiza una primera extracción empleando como solvente el acetato de etilo y cuya corriente de colas es enviada a una columna de destilación y posteriormente a un separador flash con el objetivo de separar el acetato de etilo para su recirculación, una parte de agua para evitar su acumulación en el sistema y la retirada de una parte del sulfato de sodio, producto de la reacción de neutralización. [32]

Sin embargo, a diferencia de la alternativa anteriormente descrita, esta no requiere la separación del acetato de etilo de la corriente de salida por cabezas de la primera torre de extracción, ya que este será utilizado en el cristizador. A cambio, dicha corriente se introduce en una segunda torre de extracción, empleando en este caso agua como solvente, alimentada por la parte superior de la torre, para la extracción del sulfato de sodio. La corriente de salida por cabezas de esta segunda torre, la cual contiene compuestos fenólicos, entre los que se encuentra la vainillina y acetato de etilo, es introducida en el cristizador, operando a 5°C y a presión atmosférica. [32]

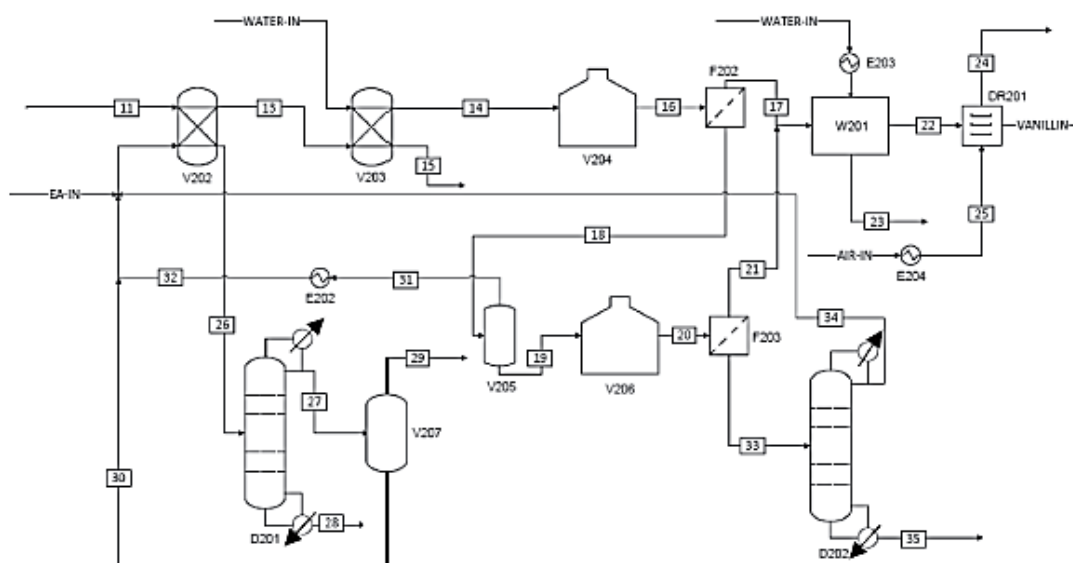


Figura 19: Proceso de separación y purificación de vainillina por extracción líquido-líquido en dos etapas obtenida mediante oxidación de lignina Kraft en medio básico. Fuente: [32]

La corriente líquida de salida del filtro posterior a la cristalización, la cual contiene acetato de etilo, vainillina y otros compuestos fenólicos, se envía a un separador flash para la recuperación de acetato de etilo. Posteriormente, se sigue un segundo proceso de cristalización y filtración, idéntico al descrito anteriormente.

En este segundo filtro, la corriente líquida se envía a una torre de destilación para la recuperación de la parte restante de acetato de etilo, mientras que la corriente que contiene la vainillina es enviada, junto con la corriente de cristales de vainillina procedente del primer filtro, a purificación, obteniendo un producto de muy alta pureza mediante un proceso de lavado con agua y posterior secado. [32]

6.2.3. Destilación a vacío

La separación de sulfato de sodio (Na_2SO_4) se realiza en este caso en una sola etapa, introduciendo la corriente proveniente de la etapa de reacción en una columna de destilación operando a vacío. Esta destilación permite separar el sulfato de sodio por colas del resto de productos. La corriente de salida por cabezas, la cual contiene los compuestos fenólicos entre los que se encuentra la vainillina, se envía a un separador flash, tras haber elevado previamente a presión atmosférica dicha corriente por medio de una bomba. En dicho separador flash, se eliminará la mayor parte del agua de la corriente, manteniéndose una cierta cantidad en la corriente de productos, que será utilizada para el proceso de cristalización, evitando la necesidad de tener que introducir una corriente de agua al cristalizador. El resto del proceso de separación y purificación sigue idénticos pasos como los descritos en el apartado 6.2.1 *Extracción líquido-líquido con destilación*, obteniéndose como producto final vainillina de muy alta pureza. [32]

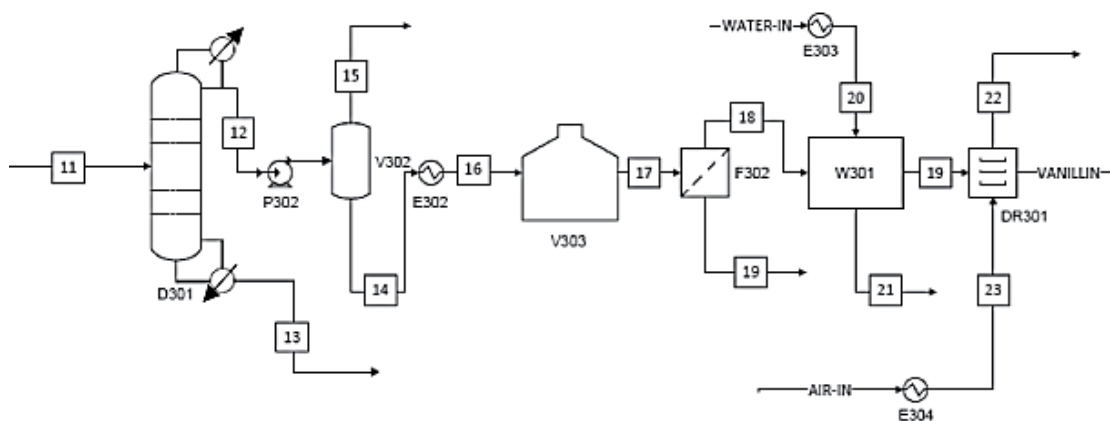


Figura 20: Proceso de separación y purificación de vainillina por destilación a vacío obtenida mediante oxidación de lignina Kraft en medio básico. Fuente: [32]

6.3. Oxidación en medio básico y separación con adsorción

Esta alternativa es similar a las explicadas dentro del grupo de alternativas que realizan la despolimerización de lignina en medio básico, siendo el acondicionamiento de los compuestos y corrientes iguales que las descritas anteriormente. Sin embargo, esta difiere en varios aspectos.

En este proceso, la oxidación de lignina se lleva a cabo en medio básico un reactor isotérmico a 160°C y 10 bar, en el que se utiliza aire enriquecido en O₂ como oxidante. Los productos de reacción pasan a continuación por un conjunto de filtros de ultrafiltración y nanofiltración, operando a 10 y 30 bar, respectivamente, con el objetivo de separar la lignina no despolimerizada, que será recirculada al reactor. La corriente efluente de los filtros se someterá a un proceso de adsorción, llevada a cabo en 2 columnas idénticas que operan en paralelo, de manera cíclica, a 25°C y 2,4 bar. El objetivo será la separación de los compuestos fenólicos, vainillina y siringaldehído, del resto de compuestos de la corriente de alimentación.

La desorción se lleva a cabo empleando 2 eluyentes: agua desionizada, para la desorción de los compuestos fenólicos, y una disolución de etanol al 96%, para la desorción de otros compuestos adsorbidos en el proceso y que no son de interés, logrando de esta manera la regeneración del lecho adsorbente. La corriente que sale de las torres de adsorción será tratada en un precipitador a temperatura de 25°C adicionando una disolución de NH₃ al 20%, con lo que se consigue la separación del siringaldehído, por medio de su precipitación. La purificación de la vainillina será llevada a cabo en un *spray dryer*, en el que una corriente de aire caliente provocará la separación de agua y NH₃, lográndose obtener un polvo blanco de alta pureza, la vainillina.

6.4. Justificación de la alternativa seleccionada

Una vez analizadas todas las alternativas de proceso descritas es posible elaborar una conclusión sobre la alternativa del proceso más adecuada. Además, es necesario tener en cuenta distintas consideraciones tales como la seguridad y simplicidad del proceso, los costes de materias primas y operación, entre otros.

Finalmente, se concluye que el proceso llevado a cabo en medio básico, empleando aire enriquecido como agente oxidante, y cuya separación de compuestos se realiza mediante un tren de tratamiento que incluye filtración, adsorción, precipitación y purificación final, descrito en el punto 6.3 *Oxidación en medio básico y separación con adsorción*, es el más adecuado para llevar a cabo el proceso de este proyecto.

En primer lugar, la oxidación de lignina en medio básico garantiza que exista una menor degradación de la vainillina como producto de reacción, haciendo que el proceso sea más eficiente. El uso de aire enriquecido en O₂ en vez de aire atmosférico contribuye a un mayor rendimiento de la reacción, no siendo estrictamente necesario el uso de catalizador para llevar a cabo la oxidación de lignina Kraft.

Por otra parte, la separación de compuestos fenólicos mediante un proceso de adsorción es una alternativa más simple que las propuestas que aportan el resto de las alternativas, consiguiéndose una buena separación de los compuestos de interés con menor número de equipos y utilidades.

Por último, cabe destacar que una de las mayores dificultades que se encuentran en el proceso de obtención de vainillina a partir de lignina Kraft es la separación de los compuestos vainillina y siringaldehído de entre sí. Las alternativas propuestas emplean un sistema de cristalización en múltiples etapas para conseguir dicho cometido.

Sin embargo, esta opción resulta muy costosa y a menudo no se logra una alta pureza de vainillina. Sin embargo, el proceso de separación de siringaldehído y vainillina, con posterior purificación de esta última, (propuesta en la alternativa seleccionada) se postula a ser una mejor opción ya que, no solo se consigue simplificar el proceso de separación y purificación, sino que se logra obtener vainillina en polvo de alta pureza.

7. Emplazamiento

El desarrollo de una actividad industrial como la aquí propuesta implica la búsqueda de un emplazamiento estratégico para la planta. Este será determinante para que dicha actividad pueda llevarse a cabo de manera exitosa. La elección de una situación óptima para la planta depende de múltiples factores, que servirán de guía para acotar las posibles opciones de emplazamiento, así como para realizar la elección final del emplazamiento.

Los primeros factores determinantes a tener en cuenta son el mercado donde se le da salida al producto y el lugar de procedencia de las materias primas necesarias para el proceso; los cuales tienen un claro impacto sobre los costes y beneficios de la planta. Es por ello que se buscará una localización lo más cercana posible tanto a los proveedores de materia prima como a los potenciales compradores del producto.

La red de comunicaciones es el segundo de los factores determinantes para la elección del emplazamiento. Juega un papel clave en este sentido, por lo que se debe buscar siempre la localización que ofrezca las mejores conexiones y vías de transporte más rápidas, tanto para mercancías como para los servicios y mano de obra que se necesiten para llevar a cabo la actividad industrial; de manera que garanticen la óptima logística de las materias primas y productos. De esta forma, se logra así la rápida introducción de dichos productos en el mercado, suponiendo una clara ventaja sobre los posibles competidores, tercer factor crítico a tener en cuenta.

El análisis de los competidores y su localización resulta crítico para la elección del emplazamiento de una planta industrial. Con respecto a este factor, el objetivo será situar la planta en un área lo más alejada de posibles competidores, procurando abarcar el mayor mercado posible, sin que se llegue a generar una competencia que pueda afectar al rendimiento económico de la planta.

Por otra parte, las características, disponibilidad y coste del terreno serán factores básicos a tener en cuenta para la elección del área de situación, así como los recursos existentes que puedan ser empleados como servicios auxiliares (agua, energía eléctrica, etc.) en la planta. Además, se requiere un análisis de la situación política y las leyes a las que está sujeta el área de interés, principalmente en materia laboral y ambiental.

Por último, el factor ambiental juega un papel fundamental. Desde un punto de vista, se deben tener en cuenta los impactos que puedan generar las actividades de la planta en el medio y que puedan afectar a los núcleos de población cercanos, tales como la emisión de gases o la gestión de residuos. Por otra parte, resulta muy importante el análisis de la climatología y actividad sísmica de la zona con el objetivo de evitar zonas donde se puedan dar con cierta frecuencia fenómenos adversos; exponiendo a los equipos e infraestructura de la planta a un estrés que pueda comprometer la seguridad en las operaciones y la de los trabajadores. Cabe destacar además el impacto económico que puede tener el factor climatológico en el coste del seguro para la planta. [33]

7.1. Descripción del emplazamiento

Teniendo en cuenta todos los factores descritos anteriormente, se ha realizado la búsqueda de una parcela que cumpla con los requerimientos necesarios para la operación de la planta de producción de vainillina. Se ha tomado la decisión de situar la planta de producción de vainillina a partir de lignina Kraft en el polígono industrial de “A Reigosa”, situado en el municipio de Ponte Caldelas, provincia de Pontevedra.

Se trata de un municipio de 5.548 habitantes y una extensión de 87 km² [34] [35]. La actividad empresarial de dicho municipio ha ido aumentando progresivamente con los años, alcanzando, según el último dato registrado en el año 2020, las 363 empresas en activo. [36]

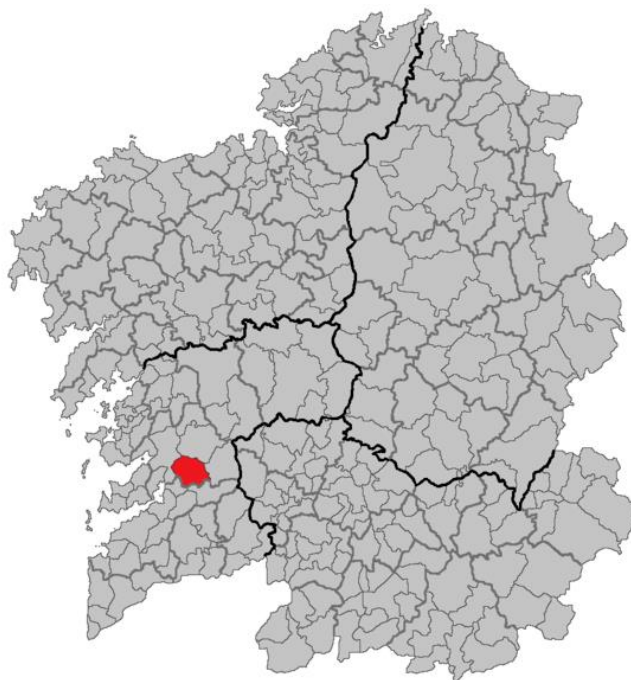


Figura 21: Situación geográfica de Ponte Caldelas, en la Comunidad Autónoma de Galicia. Fuente: [37]

La principal actividad industrial del municipio se desarrolla en el polígono industrial de “A Reigosa”, el cual es gestionado por XESTUR (Xestión do Solo de Galicia). Dicho polígono consta de 52 parcelas industriales, cuya superficie total asciende a 284.247,22m² [38] y se encuentra próximo a otro de los polígonos industriales de la zona: el polígono industrial de “O Campiño”.

Para el emplazamiento de la planta se han seleccionado dos parcelas colindantes dentro de este polígono, la parcela P-07 y P-08, cuyos datos se muestran en la *Tabla 3*, haciendo una superficie total para el emplazamiento de la planta de 41.522,60 m². [38]

Tabla 3: Datos de las parcelas seleccionadas para el emplazamiento en el polígono industrial. Fuente: [38] [39]

Parcela	Superficie (m ²)	Coordenadas
P-07	19.993,37	42° 24' 4,025" N 8° 35' 2,234" W
P-08	21.529,23	42° 24' 4,317" N 8° 34' 56,479" W



Figura 22: Vista aérea del polígono industrial "A Reigosa". Fuente: [38]

Tal y como se describirá a continuación en los siguientes puntos, el emplazamiento seleccionado se encuentra en un lugar estratégico para la actividad de la planta, principalmente, desde el punto de vista de las comunicaciones y servicios disponibles.

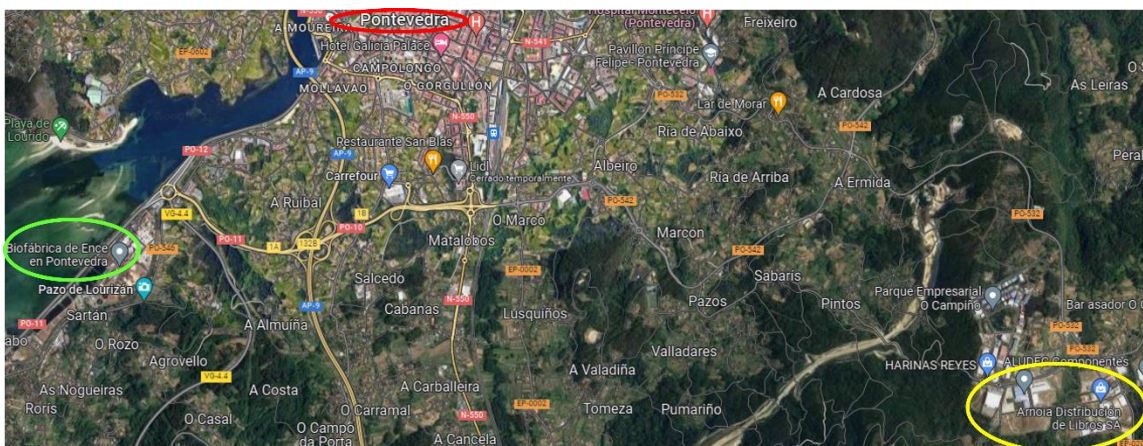


Figura 23: Situación del polígono de "A Reigosa" (amarillo) con respecto a ENCE Pontevedra (verde) y la ciudad de Pontevedra (rojo). Fuente: [39]

Una de las principales razones por las que esta localización ha sido seleccionada es debido a que las parcelas se sitúan a tan solo 15,6 km de distancia del principal proveedor de la materia prima (lignina Kraft) para el proceso de producción de vainillina, *ENCE Pontevedra*. [39] Además, no existen empresas competidoras, a corta o larga distancia, para el mismo nicho de mercado, lo cual hace que el producto pueda ser ampliamente suministrado en el territorio autonómico y nacional a empresas como, por ejemplo, de alimentación o farmacéuticas, y a nivel internacional, gracias a las comunicaciones que ofrece la localización, tal y como se analiza en el apartado 7.1.1 *Red de comunicaciones*.



Figura 24: Mapa satélite del emplazamiento, señalado con el área en rojo. Fuente: [Adaptado de 38]

Finalmente, cabe destacar que en el año 2020 el ayuntamiento de Ponte Caldelas aplicó una rebaja al precio por metro cuadrado de las parcelas libres en el polígono industrial de “A Reigosa”, entre las que se encuentran las parcelas seleccionadas para el emplazamiento de la planta, pasando de tener el terreno un coste medio de 94,47 €/m² a 66,12 €/m². Esta acción a nivel político se enmarca dentro del intento de potenciar la industria de la zona. [40]

7.1.1. Red de comunicaciones

- **Red de carreteras**

El polígono de A Reigosa (Ponte Caldelas), y en concreto las parcelas seleccionadas para la instalación de la planta, cuentan con una gran accesibilidad por carretera. El acceso se realiza a través de la carretera autonómica PO-532, cuyo enlace con la carretera autonómica PO-542 proporciona un enlace directo con la Autopista del Atlántico AP-9/E-1 y con la carretera nacional N-550, principales vías de comunicación por carretera de la provincia de Pontevedra, encontrándose aproximadamente ambas a 9 y 7 km, respectivamente, del emplazamiento de la planta. A través de estas vías se establece la comunicación entre las principales ciudades de Galicia, como son Pontevedra (situada a 10 km del emplazamiento), Vigo (situada a 33 km del emplazamiento), Santiago de Compostela (situada a 79 km del emplazamiento), Ourense (situada a 95 km del emplazamiento), A Coruña (situada a 144 km del emplazamiento), Ferrol (situada a 162 km del emplazamiento) y Lugo (situada a 204 km del emplazamiento). [41]

Además, estas vías permiten establecer la comunicación con otras vías tales como la autopista A-52, la cual conduce al nudo de vías situado en Benavente y que permite el enlace con las autovías hacia Madrid (A-6) y el norte de la Península (A-66) o la autopista A-8, que recorre todo el norte de la península, desde Galicia hasta el País Vasco. Finalmente, cabe destacar que la autopista AP-9 establece comunicación con el país vecino Portugal, mediante la autovía A-3.

- **Red ferroviaria**

La estación ferroviaria más próxima se encuentra en la ciudad de Pontevedra, concretamente a una distancia de 7 km. La red ferroviaria de Galicia permite una amplia comunicación con las principales ciudades de Galicia descritas anteriormente, así como con otras Comunidades Autónomas y con el país vecino Portugal. Mediante la red viaria se podrá realizar el transporte de mercancías gracias al servicio que ofrece el Grupo Renfe, dedicado al transporte ferroviario.



Figura 25: Red ferroviaria de Galicia. Fuente: [42]

Es importante destacar la comunicación que el ferrocarril establece entre los principales puertos marítimos de Galicia, como son el puerto de Vigo, Marín, Vilagarcía de Arousa, A Coruña y Ferrol, que forman parte de la red de comunicaciones y que será analizada a continuación. [42]

- **Transporte Marítimo**

El puerto de mercancías más cercano al polígono industrial de “A Reigosa” es Puerto de Marín. Se trata de un puerto mercante que dispone de 245 m de longitud y 12 m de calado para el atraque de grandes buques de mercancía. Además, posee una terminal de contenedores con una longitud para el atraque de 490 m y una superficie de 70.000 m² para el almacenamiento de contenedores. Sin embargo, la característica más destacable de este puerto es la disponibilidad de una terminal cubierta, que posibilita la carga y descarga de materias primas o productos ante cualquier situación climática, especialmente aquellos que cuyas características puedan verse afectadas por la humedad. [43] [44]

El Puerto de Marín se encuentra a tan solo 13,6 km del emplazamiento de la planta y está excelentemente comunicado tanto por vía terrestre, con conexión directa a la AP-9 y A-52, como por vía ferroviaria, con conexión a la red ferroviaria nacional. Además, se encuentra próximo a los aeropuertos de Vigo y Santiago de Compostela. [43] [44]

El Polígono de “A Reigosa” se encuentra también próximo al Puerto de Vigo, situado a 37,7 km de distancia y comunicado a través de la AP-9. Se trata de uno de los puertos más importantes del país, gracias al gran volumen de mercancía que gestiona.

Otros puertos de relevancia con buena comunicación son el Puerto de Vilagarcía de Arousa, a 44 km de distancia, y el Puerto de A Coruña, situado a 144 km, ambos con conexión directa con la AP-9. [39]

- **Transporte Aéreo**

En cuanto al transporte aéreo, el aeropuerto de Peinador (Vigo), es el que más cercano se encuentra a la localización de la planta de producción de vainillina. Concretamente, se encuentra a 34 km. Otros aeropuertos cercanos al polígono de “A Reigosa” son el aeropuerto Rosalía de Castro (Santiago de Compostela) y el aeropuerto de Alvedro (A Coruña), situado a 85 y 137 km, respectivamente, del polígono de “A Reigosa”. Todos ellos se encuentran conectados por medio de la autopista AP-9.

7.1.2. Servicios

Las parcelas seleccionadas en el polígono de “A Reigosa” cuentan con una serie de servicios clave para el desarrollo de la actividad de la planta.

Próxima a las parcelas existe una subestación eléctrica, la cual permite dotar de corriente alterna, de baja tensión (igual o inferior a 1kV) o media tensión (1-36 kV), a la planta. [38]. En cuanto al suministro de gas natural, el polígono de “A Reigosa” cuenta con una red de distribución al servicio de las industrias, siendo la empresa “Nedgia Galicia” dicha distribuidora. [45] El parque empresarial cuenta además con el servicio de abastecimiento y saneamiento de aguas, así como la recogida de pluviales, ofrecido por la empresa de gestión de procesos relacionados con el ciclo integral del agua “Viaqua Pontevedra”. [46] La red de telecomunicaciones posibilita la conexión de red de la planta por medio de fibra óptica, además de la existencia de un repetidor de telecomunicaciones a escasa distancia del polígono, lo cual garantiza una excelente cobertura de telefonía.

7.1.3. Disponibilidad de mano de obra

Uno de los factores determinantes comentado en el inicio de este apartado es la disponibilidad de mano de obra que permita desarrollar que la operación de la planta se desarrolle de manera normal. Para ello dicho cometido, será necesario disponer de mano de obra cualificada y no cualificada.

El municipio de Ponte Caldelas, ubicación donde se encuentra el polígono de “A Reigosa”, registró una población de 5.548 habitantes en el año 2021, cuya gran mayoría se encuentra dentro del rango de población activa. Sin embargo, el hecho de que el polígono se encuentre a poca distancia de núcleos de población tan importantes como Vigo o Pontevedra, con una alta tasa de población activa, es una clara ventaja a la hora de la elección de este emplazamiento.

El factor de la disponibilidad de mano de obra se tratará en profundidad en el apartado *8.5 Disponibilidad de terreno y mano de obra*. [47]

7.1.4. Climatología

Se trata de uno de los factores determinantes a la hora de la elección de un emplazamiento, ya que se deben tener en cuenta los factores climatológicos a los que se va a exponer la planta. El área geográfica donde irá ubicada la planta presenta un clima oceánico húmedo, caracterizado principalmente por veranos suaves e inviernos frescos, con temperaturas de entre los 4°C y los 25°C, siendo la media de 22°C en la época templada y 14°C en la época fresca. [48]

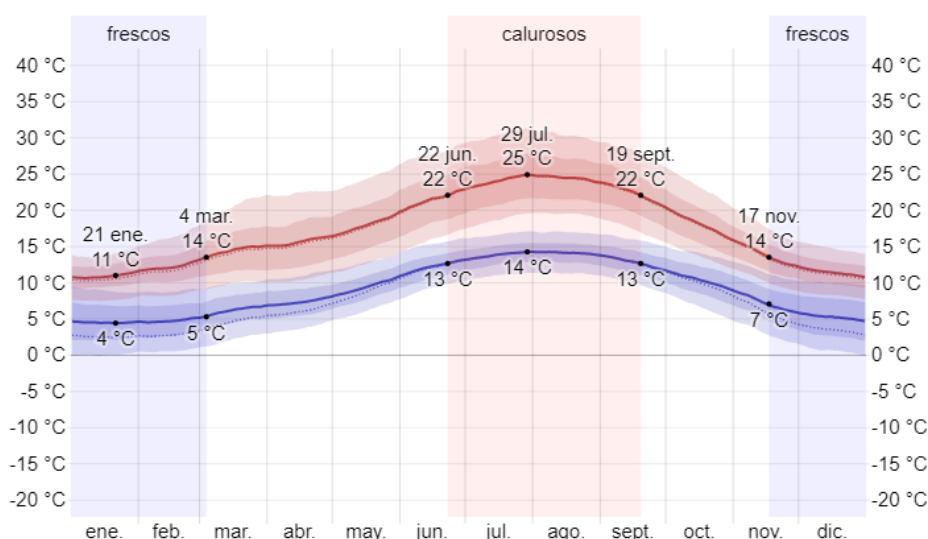


Figura 26: Temperaturas máximas (línea roja) y mínimas (línea azul) medias en Ponte Caldelas a lo largo del año. Fuente: [48]

En lo que a precipitaciones se refiere, el municipio de Ponte Caldelas presenta una variación muy importante en el volumen de precipitaciones dependiendo de la estación del año, variando desde los 148 mm de precipitación en el mes más lluvioso, diciembre, hasta los 21 mm de precipitación en el mes más seco, julio. [48]

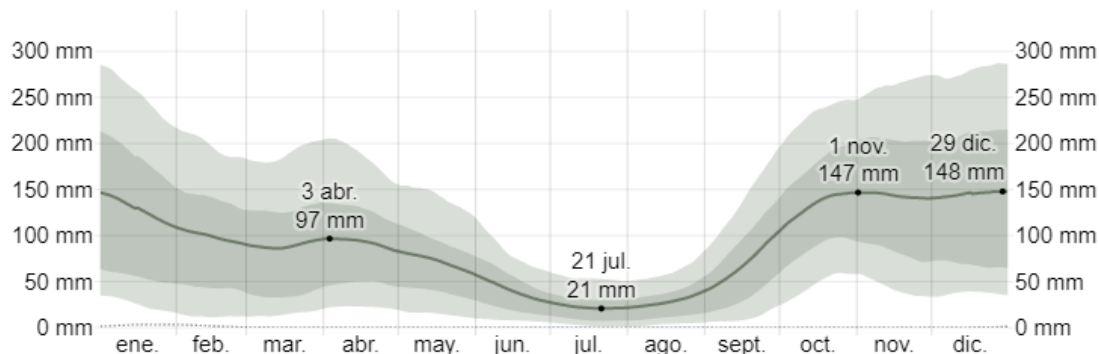


Figura 27: Datos de precipitación media mensual a lo largo del año en el municipio de Ponte Caldelas en el año 2021. Fuente: [48]

Otro de los parámetros climatológicos relevantes es el viento, cuya velocidad varía a lo largo del año dependiendo de la estación. Concretamente, en el área de Ponte Caldelas la velocidad del viento tiene leves fluctuaciones a lo largo del año, con una velocidad media en los meses más ventosos (octubre-mayo) de 9 km/h y en los meses menos ventosos (mayo-octubre) de 8,1 km/h. En el año 2021, la media de velocidad del viento más alta registrada fue de 10 km/h. [48]

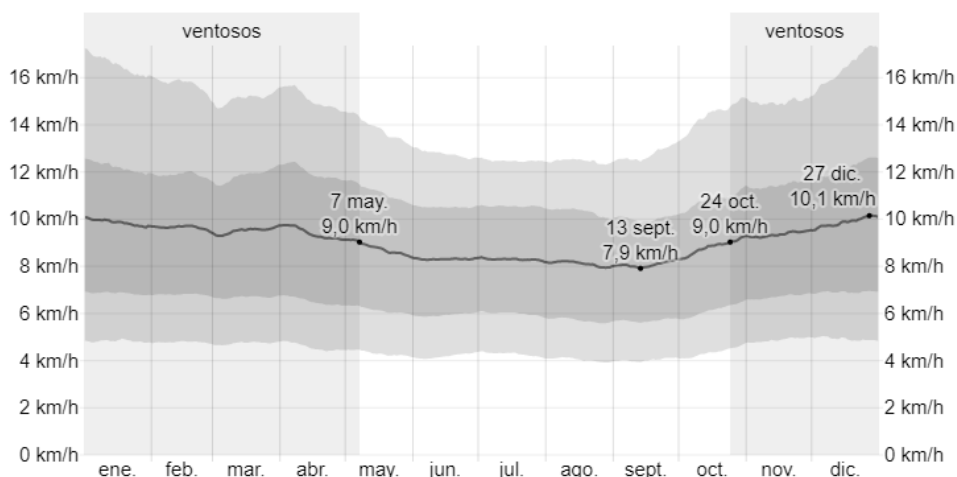


Figura 28: Velocidad media del viento mensual en Ponte Caldelas en el año 2021. Fuente: [48]

Se debe tener en consideración la dirección del viento, ya que el emplazamiento de la planta debe realizarse de manera que se evite que las corrientes de viento predominantes puedan arrastrar gases procedentes de la planta hacia núcleos de población.

La ubicación de la planta presenta vientos predominantes del norte durante la mayor parte del año, principalmente durante los meses de la época estival. Sin embargo, en los últimos meses del año la dirección puede soplar hacia el sur y sureste, tal y como se aprecia en la *Figura 29*. [48]

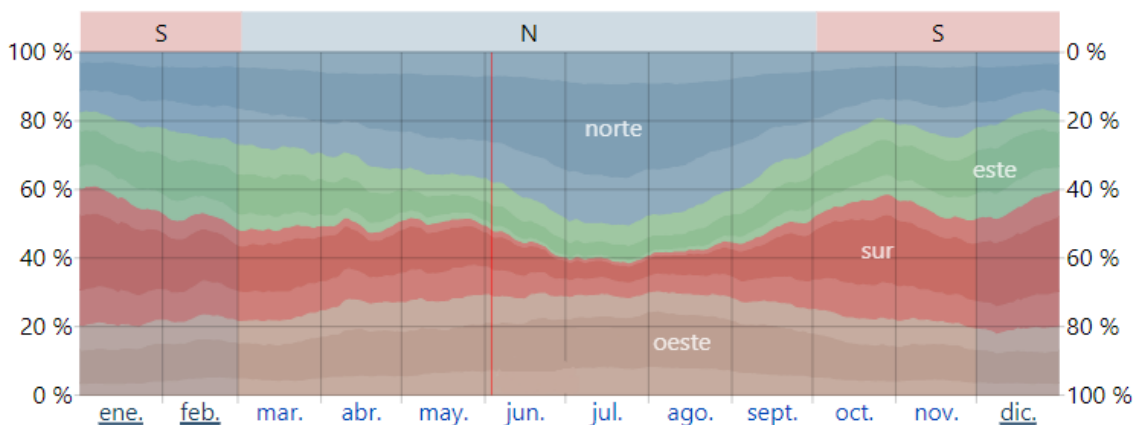


Figura 29: Evolución en la dirección del viento a lo largo del año en Ponte Caldelas. Fuente: [48]

Resulta interesante investigar el nivel de energía solar incidente a lo largo del año en el municipio de Ponte Caldelas, una información que puede resultar de gran utilidad a la hora de estudiar la posibilidad de realizar una instalación de paneles fotovoltaicos o térmicos en la planta. [48]

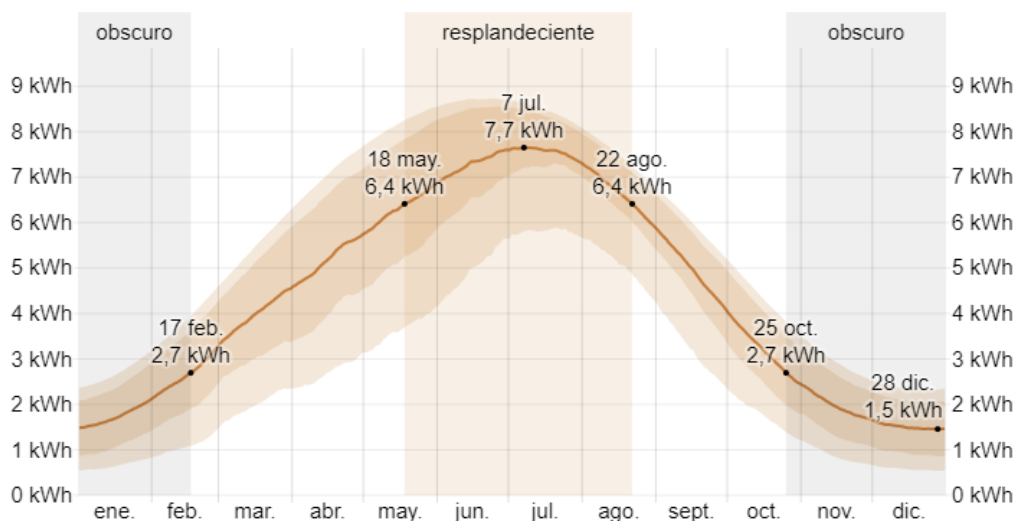


Figura 30: Niveles medios mensuales de energía solar en el municipio de Ponte Candelas en el año 2021. Fuente: [48]

7.1.5. Fenómenos Sísmicos

El estudio de riesgo sísmico resulta fundamental para el análisis de los riesgos a los que puede estar sometida la planta. En la *Figura 31* se detalla un mapa de la comunidad gallega, donde se analiza el riesgo sísmico en base a la escala macrosísmica europea. Tal y como puede observarse en dicha figura, el riesgo sísmico aumenta en Galicia hacia el interior.

El riesgo que se muestra en la provincia de Pontevedra y, en concreto en el área de Ponte Candelas se encuentra en el rango V-VI (fuerte-levemente dañino), el más bajo dentro de la comunidad autónoma.

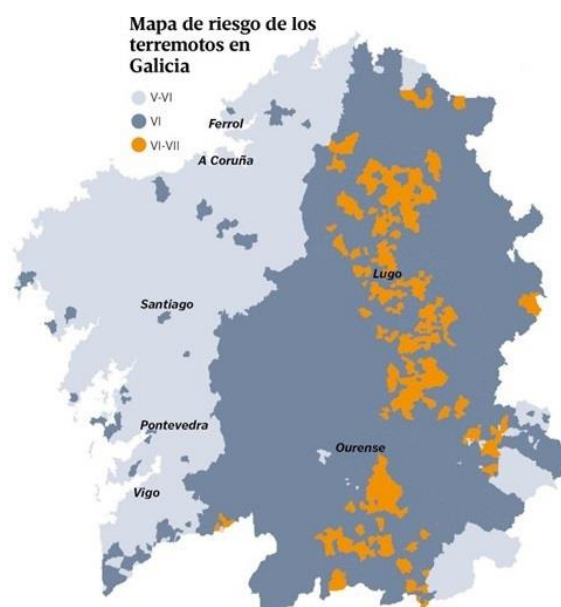


Figura 31: Riesgo sísmico en Galicia en la escala macrosísmica europea. V-VI fuerte-levemente dañino; VI levemente dañino; VI-VII levemente dañino-dañino. Fuente: [49]

Queda patente que la climatología de la localización escogida para el emplazamiento de la planta es óptima, gracias a que todas las condiciones climatológicas de la zona analizada son de carácter suave y moderado, no suponiendo un peligro este un peligro potencial para la operación de la planta y sus trabajadores.

8. Estudio de viabilidad técnica

En este apartado se analizarán los distintos aspectos técnicos que dictaminarán si es posible o no la realización del presente proyecto. El análisis constará de diversos puntos, los cuales abarcarán desde la viabilidad técnica del proceso de producción elegido, así como los recursos de terreno, mano de obra, disponibilidad de equipos y utilidades de proceso, hasta las consideraciones en el ámbito de la seguridad y la rentabilidad del proyecto.

8.1. Viabilidad técnica del proceso de producción elegido

El proceso de obtención de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) por medio de la oxidación de lignina Kraft en medio básico con una posterior separación de los productos ha sido analizado durante años por diversos equipos de investigación.

A pesar de que el proceso de oxidación de lignina es conocido desde hace décadas, tal y como se muestra en [50] este ha ido evolucionando, empleando nuevos catalizadores y agentes oxidantes, tales como el nitrobenzeno u oxígeno, entre otros. Sin embargo, la principal problemática de este proceso reside en la separación de los productos, en la cual se ha investigado intensamente.

La alternativa seleccionada en este proyecto consta de la separación de la vainillina y siringaldehído de resto de compuestos por medio de un proceso adsorción y desorción, empleando como eluyentes agua desionizada y disolución de etanol, en dos etapas. La separación entre estos dos compuestos se realiza mediante precipitación y posterior deshidratación, con lo que se consigue además el producto, vainillina, de alta pureza.

Tal y como se mencionó en el apartado 6.4 *Justificación de la alternativa seleccionada*, este proceso surge de la unión de varias propuestas técnicas planteadas en [13] [51] [52] para las distintas operaciones. El resultado es el proceso seleccionado para llevar a cabo este proyecto. Este se caracteriza por ser un proceso técnicamente más simple y seguro, en el que además los compuestos utilizados, como el oxígeno, para llevar a cabo la oxidación de lignina Kraft, como el agua desionizada y etanol para la separación de productos de reacción son menos peligrosos en comparación con otras alternativas y compatibles con el grado alimentario.

El uso de aire enriquecido en O₂ implica la no necesidad de utilización de catalizador en el reactor, lo cual simplifica nuevamente el proceso y brinda una mayor fiabilidad, obteniéndose igualmente un alto rendimiento en la reacción.

Por otra parte, las condiciones de operación del proceso son posibles de alcanzar con relativa facilidad, siendo el reactor de despolimerización R-101 el equipo que por requerimiento del proceso opera a mayor temperatura, 160°C y el equipo de nanofiltración F-202 A/B el que opera a mayor presión, 30 bar.

8.2. Disponibilidad de materias primas y mercado del producto

La disponibilidad de las materias primas es un factor clave y condicionante para la actividad productiva de la planta, por lo que su disponibilidad debe estar asegurada. La materia prima principal, lignina Kraft, será suministrada por la empresa *ENCE Pontevedra*, localizándose a tan solo 15,6 km de la localización del emplazamiento seleccionado para la planta de producción de vainillina.

Los compuestos necesarios para llevar a cabo el proceso, como son, hidróxido sódico (NaOH), disolución de etanol (C₂H₅OH) al 96% y disolución de amoníaco (NH₃) al 20%, serán suministrados por proveedores externos. Estos compuestos son altamente utilizados en la industria, siguiendo un patrón de demanda no estacional, por lo que existe una amplia oferta, que hace que la disponibilidad esté asegurada.

El agua (H₂O) se obtendrá de la red de abastecimiento y para la obtención del agua desionizada, se aplicará un tratamiento in situ de dicha agua fuera de los límites de batería.

En cuanto al mercado del producto, este ha sido analizado en el apartado *5.1 Mercado de la vainillina*, donde se observa la alta demanda que tiene la vainillina en sectores tan importantes como el alimentario, farmacéutico y de cosmética.

La alta demanda de vainillina hace que su obtención por medio de la extracción natural no sea suficiente para cumplir dicha demanda del mercado. Por ello, la necesidad de obtener vainillina sintética se encuentra en auge.

La alternativa de producción de vainillina a partir de lignina Kraft seleccionada para este proyecto no solo logra obtener un producto de alta pureza y alto valor añadido que satisfaga las necesidades del mercado, sino que lo hace mediante la valorización de un residuo de difícil gestión como lo es la lignina Kraft, proveniente de la industria maderera y papelera. Este hecho convierte la planta de producción descrita para este proyecto en pionera, ya que no solo es la única en el territorio español, sino que también es la única planta de producción en Europa que utiliza esta alternativa de producción para obtener vainillina.

8.3. Disponibilidad de equipos

Unos de los requisitos fundamentales para poder llevar a cabo el proceso es la disponibilidad de los equipos necesarios.

Gracias a la alternativa de proceso planteada en este proyecto, los principales equipos a emplear son un reactor de burbujeo con camisa de refrigeración para llevar a cabo la despolimerización de lignina, sistema de filtros para ultrafiltración y nanofiltración, 2 columnas de adsorción idénticas entre sí, un precipitador, un spray dryer y tanques de almacenamiento de compuestos, así como otros equipos necesarios para el proceso como son bombas centrífugas, compresores e intercambiadores de calor. Además, debido a que en este proceso no se requieren alcanzar unas condiciones de operación extremas de temperatura y presión, a excepción de las condiciones de alcalinidad, cuyo factor debe tenerse en cuenta en el material del que están hechos los equipos, todos ellos son equipos fácilmente accesibles, debido a su uso tan extendido dentro del mundo de la industria química.

8.4. Disponibilidad de utilidades de proceso

Se trata de otro de los aspectos fundamentales a analizar, ya que las utilidades serán imprescindibles para llevar a cabo el correcto desarrollo de la actividad de la planta.

En el apartado 7.1.2. *Servicios* dentro del análisis del emplazamiento, se mencionó que el polígono dispone de una serie de servicios, a saber:

- Subestación eléctrica que garantiza el suministro de corriente alterna monofásica y trifásica, de baja (igual o inferior a 1 kV) y media tensión (1-36 kV).

Típicamente, se utilizará corriente trifásica de 415 V para equipos de proceso y corriente monofásica de 240 V para otros sistemas que requieran baja tensión, como por ejemplo el alumbrado. Además, tal y como se analizó en el apartado 7.1.4 *Climatología*, existe la posibilidad de realizar una instalación de paneles fotovoltaicos que, aunque es posible que no pueda suministrar suficiente electricidad para el desarrollo del proceso, sí puede contribuir a la reducción del consumo de electricidad proveniente de la subestación eléctrica en oficinas y otros edificios de la planta. [33]

- El gas natural empleado para calentar agua y producir el vapor de baja y media presión se suministra a la planta por medio del polígono, el cual está gestionado por la empresa *Nedgia Galicia*. Se trata de un combustible cuyo coste no es elevado y que produce una menor emisión de carbono en comparación con otros combustibles.
- Suministro de agua. Este será de vital importancia ya que dicho suministro proveerá el agua de refrigeración del proceso o *cooling water*, así como el agua que será desionizada en la planta, cuya obtención se realiza fuera de los límites de batería para su uso como eluyente en las columnas de adsorción y el agua para usos generales de la planta, tales como en el sistema contraincendios o para servicios en otros edificios de la planta. [33]
- Gestión de residuos industriales. En la provincia de Pontevedra existen numerosas empresas dedicadas a la gestión de los residuos industriales de carácter peligroso y no peligroso, entre las que destacan *Sertego Galicia*, una de las principales empresas de gestión de residuos y productos industriales, y *Ambiteco*, una empresa con más de 15 años de experiencia en la gestión de residuos y productos industriales peligrosos y no peligrosos. Ambas empresas garantizan la correcta gestión de dichos residuos en cumplimiento de las leyes ambientales. [53] [54]

Por otra parte, dentro de la planta se generarán otras utilidades necesarias para el desarrollo de la actividad productiva, tales como:

- Vapor de media presión. Este será generado en la propia planta, a través de intercambiadores de calor o haciendo uso de *boilers*, que obtendrán el vapor por medio de la combustión de combustibles, como puede ser el gas natural. El vapor de media presión se encuentra a 8 bar y 185°C.
- Aire comprimido. Se trata de una utilidad básica, empleado principalmente en el sistema de control, cuando se utilizan válvulas cuyos actuadores sean de tipo neumático. El suministro de aire comprimido se logra mediante el uso de compresores de una o dos etapas. [53]

8.5. Disponibilidad de terreno y mano de obra

En el apartado 7. *Emplazamiento* se ha analizado la localización de la planta, así como el terreno disponible para su implantación. Las parcelas escogidas son colindantes, y cuya superficie asciende a un total de 41.522,60 m². Esta superficie garantiza la correcta disposición de las infraestructuras y equipos respetando las distancias mínimas de seguridad y a la vez permite que se puedan realizar diversas ampliaciones de la planta en un futuro. Además, la parcela cuenta con un buen acceso por carretera tanto para particulares como para el transporte pesado, y se encuentra a poca distancia de otras vías de comunicación.

Otro aspecto fundamental analizado en el apartado 7.1.3 *Disponibilidad de mano de obra* es el de la disponibilidad de trabajadores. El municipio de Ponte Caldelas cuenta con 5.548 habitantes, encontrándose la gran mayoría en el rango de población activa. [47] Además, la localización de la planta se encuentra próxima a núcleos de población importantes, como son Vigo (293.837 habitantes en el año 2021) [55] y Pontevedra (83.114 habitantes en el año 2021) [56], con una alta tasa de población activa y los cuales cuentan con numerosos centros educativos, como centros de formación profesional y universidades, de donde puede llegar personal cualificado.

8.6. Consideraciones en el ámbito de la seguridad

La seguridad es uno de los aspectos más importantes a la hora de desarrollar una actividad industrial, ya que esta debe ceñirse a unas estrictas leyes en materia de seguridad y prevención de riesgo. La seguridad constituye hoy en día una de las consideraciones críticas a la hora de analizar si un proyecto es técnicamente viable o no.

La alternativa de proceso seleccionada en este proyecto se caracteriza por tener unas condiciones de operación, tales como presión y temperatura, no extremas, siendo la máxima temperatura la alcanzada en la corriente de salida del compresor C-102 A/B (239,06°C) y la máxima presión en el equipo de nanofiltración F-202 A/B (30 bar).

Sin embargo, se debe tener en consideración que el proceso se realiza en unas condiciones alcalinas, aspecto que será analizado en mayor profundidad en el apartado *11. Seguridad en la instalación*, donde se estudiarán las medidas de seguridad que se deberán adoptar y cumplir de manera estricta para minimizar los riesgos en el desarrollo de la actividad industrial, tanto de trabajadores como de los equipos.

8.7. Rentabilidad del proyecto

La viabilidad de un proyecto desde el punto de vista técnico pasa por el análisis de su rentabilidad. Para que un proyecto se considere técnicamente viable, este ha de reportar, como condición fundamental, una relación mínima entre los beneficios obtenidos de la actividad industrial y la inversión, tanto económica como humana, que se realiza para poner en marcha y, posteriormente, llevar a cabo dicha actividad industrial. Los beneficios se obtienen principalmente con la venta del producto principal, vainillina, y la del subproducto, Siringaldehído. El análisis de rentabilidad del proyecto se abordará con más detalle en el *ANEXO III. Análisis de viabilidad económica*, donde se analizará con detalle todos los aspectos de costes, ingresos y beneficios del proceso.

Finalmente, teniendo en cuenta todos los factores descritos, como el suministro asegurado de materias primas y de utilidades de proceso, la viabilidad técnica de la alternativa de producción seleccionada, siendo esta una alternativa simple, y la disponibilidad de equipos, gracias a las condiciones de operación requeridas para el proceso, así como la implantación en una localización estratégica con buenas comunicaciones y acceso a servicios, disponibilidad de mano de obra cualificada, un estudio de seguridad que garantice dicha seguridad en la operación de la planta tanto para trabajadores como para equipos y el análisis económico, se concluye que el proyecto es técnicamente viable.

9. Descripción del proceso

En este proyecto se lleva a cabo el diseño de una planta de producción de vainillina a partir de lignina Kraft con el objetivo de producir 500 toneladas/año. La planta opera 330 días al año de manera ininterrumpida mientras que los días restantes hasta completar el año están destinados a labores de mantenimiento, limpieza y revisión del funcionamiento de la instalación.

9.1. Subproductos formados en el proceso

Tanto la principal materia prima del proceso como el producto principal han sido descritos detalladamente en los apartados *Producto: Vainillina (C₈H₈O₃)* y *Materia prima*. No obstante, durante la producción de vainillina se forman otros productos secundarios.

Este proyecto se centra en la producción de vainillina, aunque sería objeto de estudio en proyectos futuros el análisis de operaciones de separación para aislar dichos subproductos y permitir su posterior aprovechamiento o venta.

9.1.1. Siringaldehído

El 3,5-dimetoxi-4-hidroxibenzaldehído es un aldehído aromático conocido comúnmente como siringaldehído. De color amarillento o marrón, este compuesto presenta una estructura muy similar a la de la vainillina y una gran cantidad de características bioactivas, propias de los aldehídos.

Es un compuesto muy abundante ya que es obtenido a partir de lignina, el segundo biopolímero más abundante en la madera solo por detrás de la celulosa. Sus propiedades químicas y físicas más destacadas se recogen en la *Tabla 4*. [57]

Tabla 4: Propiedades físicas, químicas y termodinámicas del siringaldehído. Fuente: Elaboración propia a partir de [57] [58]

Propiedad	Valor
Peso molecular (g/mol)	182,18
Densidad (g/cm ³)	1,013
Presión de vapor a 25°C (mm Hg)	0,000151
Punto de fusión (°C) (lit.)	110-113
Punto de ebullición a 14 mm Hg (°C)	192-193

[58] [Ficha de seguridad del siringaldehído,(Archivo II)]

En cuanto a sus aplicaciones, este compuesto es usado en numerosas industrias como son la farmacéutica, alimenticia, cosmética, textil, etc. Posee propiedades antioxidantes, puede actuar como agente antifúngico y antimicrobiano e incluso presenta propiedades anti oncológicas. [57]

En el proceso de obtención de vainilla, el siringaldehído se origina en una reacción secundaria derivada de la despolimerización de la lignina. Este un subproducto debe ser separado para purificar la vainillina. El siringaldehído obtenido como subproducto en este proceso en la Sección 200 presenta una pureza suficiente como para considerar su venta debido a su amplio uso en distintos sectores industriales, destacando el farmacéutico.

9.1.2. Ácido vainillínico

El ácido vainillínico o ácido 4-hydroxy-3-methoxy benzoico, es un ácido fenólico presente en algunas formas de vainillina y en muchos otros extractos de plantas. Se origina como producto intermedio en la transformación del ácido ferúlico a vainillina.

Presenta un color amarillo claro y se encuentra en forma de polvo. En la *Tabla 5* se recogen algunas de las propiedades del ácido vainillínico. [59] [60]

Tabla 5. Propiedades físicas y químicas del Ácido vainillínico. Fuente: Elaboración propia a partir de: [59] [61] [Ficha de seguridad ácido vainillínico (Archivo II)]

Propiedad	Valor
Peso molecular (g/mol)	168,15
Solubilidad en agua	Soluble
Densidad (g/cm ³)	1,3037
Punto de fusión (°C) (lit.)	208-210
Punto de ebullición (°C)	257,07

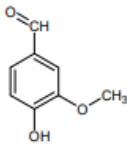
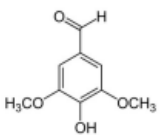
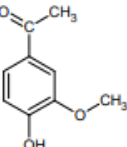
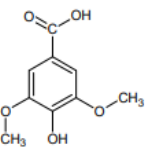
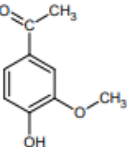
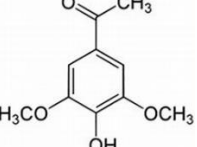
Este compuesto se forma como subproducto derivado de la degradación de la vainillina debido a la presencia de un medio oxidante en el reactor.

Es decir, se trata de un producto indeseado y se trata de obtener la menor cantidad posible para así evitar la pérdida de una mayor cantidad de vainillina formada. El ácido vainillínico es eliminado de la corriente de producto en el proceso de adsorción.

9.1.3. Compuestos equivalentes (X) y justificación.

La oxidación alcalina de la macromolécula de lignina, a causa de su estructura heterogénea, no produce únicamente vainillina. Da lugar a una compleja mezcla compuestos químicos formada por compuestos fenólicos, no fenólicos y oligómeros. En la *Tabla 6* se recogen los que se encuentran en mayor proporción.

Tabla 6. Principales compuestos formados por la oxidación de lignina. Fuente: Elaboración propia a partir de [12] [27]

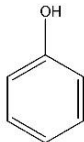
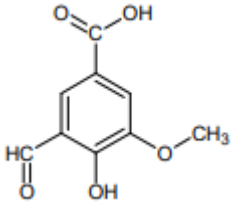
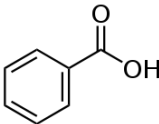
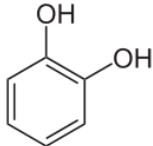
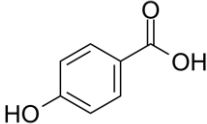
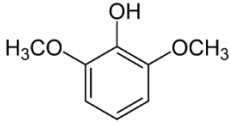
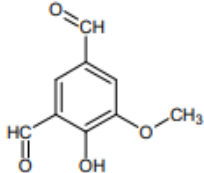
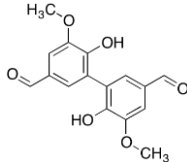
Compuesto	Estructura química	Compuesto	Estructura química
Vainillina		Siringaldehído	
Ácido vainillínico		Ácido Siríngico	
Acetovainillona		Acetosiringona	

Tal y como se puede observar, están presentes la vainillina, el siringaldehído y ácido vainillínico; productos que indica en mapa de reacciones descrito en el *Apartado 9. Descripción del proceso*. El resto de los productos de cada uno de los tres principales grupos de compuestos se describen a continuación.

9.1.3.1. Compuestos fenólicos.

En su mayoría representados por ácidos y cetonas, son los compuestos de mayor interés originados en la oxidación de lignina, entre los que se encuentra la vainillina o el siringaldehído, aunque la variedad de especies químicas es mucho mayor. En [27] se recogen más de quince especies formadas. En la *Tabla 7* se han recogido algunas de ellas. [27]

Tabla 7. Compuestos fenólicos formados en la oxidación de lignina. Fuente: Elaboración propia. a partir de [12] [27]

Compuesto	Estructura química	Compuesto	Estructura química
Fenol [62]		Ácido formilvanilínico	
Ácido benzoico [63]		Catecol [65]	
Ácido p-hidroxibenzoico [64]		Syringol [66]	
Formilvainilina		Dehidrovainillina [67]	

9.1.3.2. Compuestos no fenólicos.

Dentro de los compuestos formados en la oxidación, los compuestos no fenólicos no se consideran de gran importancia por lo que los estudios determinando las especies halladas de este tipo son menores.

9.1.3.3. Oligómeros.

Fragmentos de lignina no reaccionada o derivados de reacciones de condensación. La cantidad presente presenta grandes variaciones en función del tipo de lignina. Algunos de los compuestos son el 1,2,3-Trimetoxibenceno, 2-Hidroxi-3-metil-2-ciclopentanona, ácido maleico, ácido fumarílico, ácido succínico, ácido fórmico, etc. [27]

9.1.3.4. Justificación

En base a la gran cantidad de compuestos formados reflejados en los apartados anteriores; se toma la siguiente consideración: Todos los productos mencionados se engloban en una misma variable denominada “X”, tal y como se recoge en bibliografía [12] y reflejada en las reacciones consideradas para el proceso. (apartado 9.3 *Descripción química del proceso*)

Esto permite desarrollar un diseño asequible a nivel académico con un mapa de reacciones simplificado; al mismo tiempo que se elabora un diseño riguroso y de amplio alcance en el que se engloban todos los productos formados. De esta manera se verá reflejado cómo afectan dichos productos al proceso, tanto a nivel mecánico, como químico y termodinámico.

Los *Compuestos X* presentan una estructura química y propiedades similares a las del producto deseado, por lo que necesitan ser sometidas al tratamiento de separación para conseguir la pureza de vainillina necesaria para su comercialización. Esta parte del proceso será clave para conseguir la viabilidad económica del proceso. [12]

9.2. Compuestos químicos del proceso

Durante el proceso se emplean otros compuestos químicos necesarios para alcanzar las condiciones de operación necesarias. También actúan como solventes en el proceso de adsorción, o son reactivos en las reacciones que tienen lugar en el reactor.

9.2.1. Hidróxido de Sodio (NaOH)

El hidróxido de Sodio es de uno de los compuestos de mayor producción a gran escala en el planeta. En el presente proyecto, se emplea una disolución al 50% de NaOH en la alimentación. A la entrada del reactor R-101 está en concentración de 2N, con el objetivo de alcanzar un pH muy básico ($\text{pH} \approx 14$), necesario llevar a cabo la reacción y que, además, contribuye a una mejor solubilidad de la lignina. [68]

Aproximadamente el 50% de su producción se trata de hidróxido de sodio en disolución (más común), mientras que el NaOH restante se encuentra en estado sólido y se le denomina sosa caustica. Sus principales usos están en el ámbito de la química inorgánica como alcalino o compuesto digestor en la producción de sales de sodio.

En la química orgánica se emplea en las reacciones de saponificación, para neutralizar aguas residuales. También tiene un amplio uso en la industria papelera, en la que el NaOH es un digestor (licor blanco) para el cocido de la madera en la operación eliminación de lignina. [68] [69] Su precio de mercado es variable en función del estado en el que se encuentre (sólido, en disolución) y de la concentración de la disolución que se desee. Para este proyecto se ha seleccionado un precio de 514,02 €/t. [70]

El NaOH a temperatura ambiente es un sólido cristalino de color blanco e inodoro, el cual presenta gran afinidad por el agua en estado puro. Es por esto por lo que resulta de gran dificultad determinar exactamente sus propiedades. A mayores, en las disoluciones de NaOH, las propiedades físicas son distintas en función de la [NaOH] en la disolución y de su pureza. En la *Tabla 8* se recogen algunas de las propiedades físicas, químicas y termodinámicas más importantes. [68]

*Tabla 8. Propiedades físicas, químicas y termodinámicas del hidróxido de sodio. Elaboración propia.
Fuente: [68] [Ficha de seguridad NaOH (Archivo II)]*

Propiedad	Valor
Peso molecular (g/mol)	40,00
Solubilidad en agua a 20°C (g/l)	1,090
Densidad a 20°C (g/cm³)	2,13
Presión de vapor a 20°C (hpa)	< 24
Punto de fusión (°C)	318
Punto de ebullición a 1,013 hPa (°C)	1.390
Capacidad calorífica específica a 20°C (J/kg·K)	3,24

Se trata de un compuesto producido por el hombre por lo que no está presente en la naturaleza en forma de NaOH. Al disolverse en agua libera gran cantidad de calor y forma seis hidratos distintos y es corrosivo al reaccionar con metales. Cabe destacar su función como buen agente secante.

9.2.2. Aire atmosférico

Se usa aire atmosférico que contiene el oxígeno necesario para llevar a cabo la oxidación de la lignina en el reactor R-101. Éste deberá ser acondicionado previamente mediante un proceso de enriquecimiento en O₂ para garantizar las condiciones necesarias de la fase gas en la reacción. Debido a que el nitrógeno actúa como inerte y por lo tanto no afecta a la reacción; únicamente será necesario tener en cuenta las propiedades del oxígeno gas. Dichas propiedades serán empleadas en el diseño riguroso del reactor y se recogen en la *Tabla 9*.

Tabla 9: Propiedades físicas, químicas y termodinámicas del Oxígeno diatómico (O_2). Elaboración propia. Fuente [71] [Ficha de seguridad O_2 (Archivo II)]

Propiedad	Valor
Peso molecular (g/mol)	31,9999
Solubilidad en agua a 20°C (g/l)	0,039
Densidad a 21°C, vapor (g/cm ³)	0,0013
Presión de vapor a 20°C (hpa)	< 24
Punto de fusión (°C)	-218,4
Punto de ebullición a 1,013 hPa (°C)	-183
Capacidad calorífica específica a 20°C (J/kg·K)	3,24

9.2.3. Agua (H_2O)

Se trata de una molécula de bajo peso molecular formada por dos átomos de hidrógeno y un átomo de oxígeno, H_2O . Está presente en los tres estados de la materia (sólido, líquido, gas) nunca en estado puro, es decir, debido al contacto con el ambiente el agua adquiere gases (nitrógeno o el dióxido de carbono), minerales, etc. El agua es la biomolécula más abundante en la Tierra de la cual dependen todos los organismos vivos. Es por ello por lo que se le considera el elemento clave para la vida en nuestro planeta. [72]

En condiciones normales ($P=1$ atm y $T= 298$ K) el agua es un líquido transparente, incoloro, inodoro, insípido y no tóxico. Gracias al carácter bipolar de la molécula del agua y a la capacidad de formar puentes de hidrógeno hacen de este elemento un gran disolvente. La solubilidad en agua de cualquier compuesto se denomina técnicamente como sustancias hidrofílicas. De hecho, es considerar el disolvente universal. Presenta un gran calor específico lo que permite hacer frente a aumentos de temperatura. Esto hace que se pueda emplear como refrigerante y aislante térmico. [72] [73]

El agua es usada en el proceso como disolvente del principal reactivo presente en la reacción, la lignina; y también del hidróxido de sodio, que debe estar presente en la corriente de entrada a una concentración concreta para alcanzar el pH adecuado en el que se desarrolla la oxidación. Forma parte de la corriente de entrada al reactor, pero no interviene en la reacción.

En la *Tabla 10* se presentan las propiedades químicas, físicas y termodinámicas más importantes del H_2O .

Tabla 10. Propiedades físicas, químicas y termodinámicas del H₂O. Fuente: Elaboración propia a partir de: [74] [75]

Propiedad	Valor
Peso molecular (g/mol)	18,0151
Estado físico	Líquido
Densidad a 25°C (g/cm ³)	0,99701
Presión de vapor a 25°C (Pa)	3.166,406
Punto de fusión (°C)	0,00
Punto de ebullición a 760 mm Hg (°C)	100,00
Viscosidad (Pa·s)	8,9·10 ⁻⁴
Calor de vaporización a 100°C (kJ/mol)	40,65

9.2.3.1. Agua desionizada

El agua desionizada, también denominada agua desmineralizada, se define como agua libre de iones disueltos. Es decir, agua a la cual se le han eliminado tanto los aniones (carbonato, fluoruro, cloruro, etc.) como cationes (sodio, calcio, hierro, cobre, magnesio, etc.) presentes en la disolución. [76]

Esto se consigue mediante un proceso de intercambio iónico denominada “desionización”. Se hace uso de resinas de intercambio iónico de fabricación especial cuya función es eliminar las sales ionizadas del agua. El agua circula a través de una columna rellena de dicha resina en la que se produce la sustitución de los iones presentes en el agua por grupos cargados (H⁺) presentes en la resina. Durante el proceso no se eliminan otros compuestos presentes en el agua como microorganismos, materia orgánica, etc. [76] [77]

Los estándares de calidad para el Agua Purificada están fijados por distintas asociaciones internacionales de estandarización y normalización como son ASTM, ISO o BSI. La norma (ASTM) D1193-91 Sociedad Americana de Pruebas y Materiales Especificaciones estándar para el Agua de calidad de reactivo establece cuatro tipos de calidades en función de varios parámetros. La conductividad oscila entre 0,056 hasta 5 µS/cm. Por otro lado, la norma internacional ISO 3696:1996 para especificaciones de estandarización del agua para uso de laboratorio divide las calidades del agua purificada en tres grados. [78]

9.2.4. Etanol (CH₃CH₂OH)

El etanol, conocido comúnmente como alcohol etílico, es un alcohol primario con fórmula química CH₃CH₂OH. Se trata de un compuesto orgánico volátil caracterizado por ser a temperatura ambiente (25°C y 1 atm) un líquido incoloro, con olor a vino y sabor acre. [79]

Su producción a través de fermentación es conocida desde hace miles de años, referida a la producción de bebidas alcohólicas como vino o cerveza. La principal ruta sintética de obtención de etanol a nivel industrial fue desarrollada a mediados del siglo XX por Shell Chemical Company. En la actualidad, se producen un total de $58,3 \cdot 10^6$ toneladas de etanol (2009) de las cuales la mayor cantidad se producen en Estados Unidos. En la *Figura 32* se presenta la evolución del precio durante el segundo trimestre del 2022.

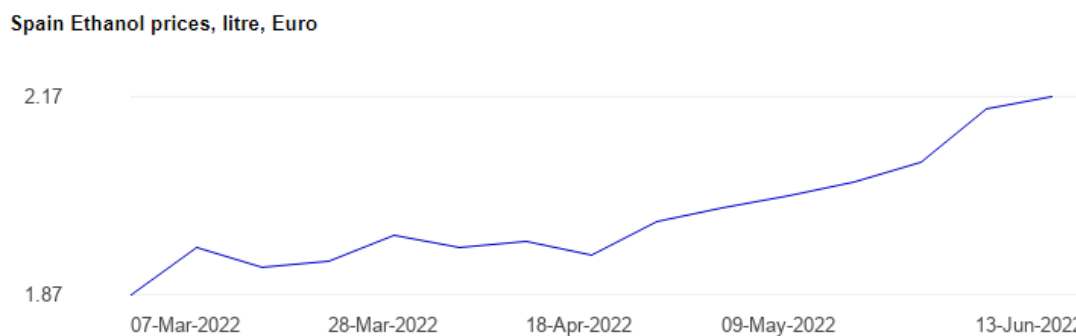


Figura 32. Evolución del precio del etanol. Fuente: [80]

En la actualidad existen varias rutas para la producción de etanol sintético. La más importante es la hidratación catalítica de etileno a etanol, la cual se puede desarrollar de forma directa (en desuso) o de forma indirecta, mediante absorción de etileno en ácido sulfúrico concentrado. También existen otros procesos desarrollados recientemente para la producción de etanol. Parten de derivados del petróleo como es el caso de la conversión de gas de síntesis o la carbonilación de metanol a ácido acético y la posterior hidrogenación a etanol. [79]

El etanol se emplea en el proceso en las columnas de adsorción T-201/T-202 como desorbente de otros compuestos minoritarios que hayan podido quedar adsorbidos en el adsorbente y que no han sido desorbidos en el proceso con agua desionizada debido a una mayor fuerza de enlace, logrando la regeneración del lecho adsorbente. Para el presente proyecto, se determina un precio de 654,21 €/t para etanol al 96% necesario, de acuerdo con [82].

Entre las numerosas características, algunas de las cuales se recogen en la *Tabla 11*, el etanol es miscible en todas sus proporciones en agua, éter, acetona y ciertos disolventes orgánicos y se caracteriza por ser un compuesto altamente inflamable por lo que hay que tener en cuenta su peligrosidad a la hora del almacenaje y manejo.

Gracias a su reactividad es usado como materia prima para la obtención de compuestos como acetaldehído, ácido acético, etc. El etanol se emplea como disolvente, siendo el segundo más importante después del agua. No obstante, este producto tiene como su principal aplicación la de combustible, como aditivo para la gasolina.

Tabla 11. Propiedades físicas, químicas y termodinámicas del $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$. Elaboración propia. Fuente: [79] [81]

Propiedad	Valor
Peso molecular (g/mol)	46,07
Estado físico	Líquido
Densidad a 20°C (g/cm ³)	0,79425
Presión de vapor a 25°C (Pa)	3.166,406
Punto de fusión (°C)	-114,15
Punto de ebullición a 760 mm Hg (°C)	78,39
Viscosidad (Pa·s)	1,19·10 ⁻³
C _p entre 16-21°C (J/g·K)	2,415
Calor de vaporización a 100°C (kJ/kg)	799,05

9.2.5. Amoníaco (NH₃)

El amoníaco (NH₃) es un gas incoloro a nivel atmosférico reconocido por un penetrante y característico olor. Actualmente es de los compuestos químicos más usados a nivel industrial gracias a la facilidad con la que se produce. Esto fue posible gracias Haber-Bosh, quien descubrió y desarrolló la primera síntesis química del amoníaco mediante la reacción entre oxígeno y nitrógeno gaseoso lo que permitió su producción a gran escala.

En el proceso actual el amoníaco se introduce en una disolución al 20% en volumen en el precipitador. Permite la precipitación del siringaldehído gracias a un cambio en el pH de la disolución para así ser separado de la corriente de vainillina.

En la *Tabla 12*, se recogen las características más importantes.

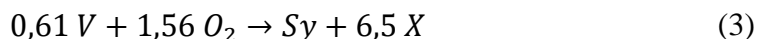
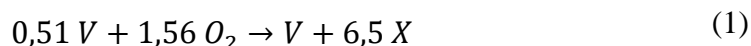
Tabla 12. Propiedades físicas, químicas y termodinámicas del NH₃ y de la disolución. Fuente: Elaboración propia. a partir de [83] [Ficha de seguridad NH₃ (Archivo II)]

Propiedad	Valor
Peso molecular NH ₃ puro (g/mol)	17,03
Estado físico	Líquido
Densidad a 0°C (g/cm ³)	0,6386
Densidad relativa disolución	0,920
C _p (J/g·K)	4700
Calor de vaporización a 100°C (kJ/kg)	1370

9.3. Descripción química del proceso

De acuerdo con la alternativa seleccionada para este proceso en el 6.4 *Justificación de la alternativa seleccionada* se produce la oxidación de lignina con aire enriquecido en O₂. Se producen dos reacciones en paralelo originando vainillina (V) y siringaldehído (Sy) (*Ecuaciones (1) y (3)*). Como consecuencia de la atmósfera oxidante presente en la reacción, parte de la vainillina se degrada originándose una reacción en serie y se forma ácido vainillínico (VA). (*Ecuación (2)*).

En las dos reacciones de oxidación de lignina se forman compuestos X. [12] [84] [85]



El oxígeno que reacciona es el disuelto en el líquido, es decir, la reacción tiene lugar únicamente en la fase líquida. Es por ello por lo que se debe tener en cuenta la solubilidad del oxígeno en la disolución de entrada al reactor; clave para obtener una alta conversión de lignina en los productos deseados. [86]

Las condiciones de operación seleccionadas para optimizar la conversión y la selectividad hacia la reacción de obtención de lignina son de 10 bar de presión total y 160°C, con una presión parcial de oxígeno de 5 bar. Se explicarán detalladamente las condiciones de operación y todas las consideraciones tomadas en la etapa de reacción en el *Anexo II. Cálculos justificativos. Parte A.*

La conversión obtenida, tanto para la oxidación de lignina como para la de vainillina se muestra en la *Tabla 13*. Las selectividades para cada reacción están expresadas en base a la cantidad de lignina inicial que entra al reactor.

Tabla 13. Conversiones y selectividades obtenidas en el reactor R-101. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Conversión lignina (%)	76,72
Conversión Vainillina (%)	31,10
Selectividad L-V (%), S1	60,10
Selectividad L-VA (%), S2	27,12
Selectividad L-Sy (%), S3	12,78

9.4. Descripción detallada del proceso

En el presente apartado se realizará la descripción detallada de las secciones y de los equipos que forman parte de cada una de ellas. Se empleará para ello la nomenclatura de equipos y corrientes seguida en el PFD (diagramas 3 y 4) contenido en el *Documento II. Planos* de este proyecto.



Figura 33: Esquema de secciones del proceso. Fuente: [Elaboración propia]

9.4.1. Sección 100: Acondicionamiento de materias primas y reacción

El proceso comienza con la entrada de las materias primas, lignina Kraft, solución de hidróxido sódico al 50% y agua, a una temperatura de 25°C a través de la corriente 1, corriente 2 y corriente 3, respectivamente. Cada una de estas corrientes es enviada al tanque de mezcla TM-101 con el objetivo de preparar la disolución alimentada al reactor. A la salida del tanque de mezcla, corriente 4, se eleva su presión hasta los 10 bar (presión de operación del reactor R-101) gracias a la bomba P-101 A/B.

A su salida, la corriente 5, en condiciones de 25°C y 10 bar se junta con la corriente 26, procedente de los equipos de ultra y nano filtración presentes en la Sección 200 y que cuya corriente tiene como objetivo la recirculación de lignina no despolimerizada, a una temperatura de 25°C y 10 bar. La corriente 6, es enviada a los intercambiadores de calor E-101 y E-102 con el objetivo de adecuar su temperatura a la de reacción, concretamente a 160°C. La primera etapa de calentamiento se realiza en el intercambiador de calor E-101, en el cual se reaprovecha la energía térmica del fluido refrigerante, DowTherm, proveniente de la camisa de refrigeración del reactor, haciendo que la corriente 7 se caliente hasta los 115,42°C.

La corriente 7 es sometida a la segunda etapa de calentamiento en el intercambiador de calor E-102, el cual utiliza vapor de media presión. La corriente 8, de alimentación al reactor, entra al reactor teniendo una concentración de 80 g/L y 60 g/L de NaOH y lignina respectivamente, a unas condiciones de 10 bar y 160°C.

La reacción de despolimerización de la lignina Kraft es llevada a cabo en el reactor R-101, que opera en condiciones isotérmicas gracias a la extracción de calor mediante la camisa de refrigeración que lo envuelve, la cual utiliza DowTherm como fluido refrigerante. Dicha reacción se lleva a cabo empleando aire enriquecido como oxidante, cuya presión parcial de oxígeno asciende a 5 bar.

La corriente de aire fresca se comprime por medio del compresor C-101 A/B, en donde se eleva la presión hasta los 3 bar. Este se somete a una filtración por membrana, F-101 A/B, que consigue elevar el porcentaje de oxígeno en la corriente gaseosa, desechando el nitrógeno restante por la corriente 11. El aire enriquecido eleva su presión hasta los 10 bar mediante el compresor multietapa C-102 A/B.

Su siguiente destino será el intercambiador de calor E-103, donde se enfría, por medio agua de refrigeración o “cooling water”, hasta los 160°C, correspondiente a la corriente 14.

A esta corriente se une la corriente de recirculación de gases procedentes del reactor, corriente 18, formada por el oxígeno no reaccionado en la oxidación; previa purga de una fracción de la corriente de salida de gases del reactor con el objetivo de eliminar el inerte (corriente 17). La unión de ambas corrientes, corriente 15, conforma la de entrada al reactor y se caracteriza por presentar unas condiciones de 10 bar y 160°C, con una concentración de oxígeno del 50%.

9.4.2. Sección 200: Separación de productos de reacción

La Sección 200 comienza con la corriente de salida del reactor de despolimerización R-101, corriente 19, que contiene los productos de reacción (vainillina, siringaldehído, ácido vainillínico y compuestos X). Dicha corriente se encuentra a 10 bar y 160°C, por lo que para la primera etapa de separación será necesario adecuar sus condiciones. Para ello, la corriente 19 se introduce en el intercambiador de calor E-201, que emplea agua enfriada o “chilled water” como fluido refrigerante. Este consigue disminuir la temperatura de la corriente hasta los 25 °C.

La primera etapa de separación consiste en una filtración. Para ello se utiliza un sistema de dos filtros, un equipo de ultrafiltración (F-201 A/B) y un equipo de nanofiltración (F-202 A/B), con el objetivo de separar la lignina no despolimerizada del resto de compuestos. Para ello, la corriente 20 a 25°C y 10 bar es introducida a la primera unidad de filtración, F-201 A/B, teniendo un alto impacto en la separación de lignina. A continuación, la corriente 22, se somete a un aumento de presión hasta los 30 bar para ser introducida en la segunda unidad de filtración, F-202 A/B, donde se retiene la lignina no despolimerizada restante.

Las corrientes acuosas con lignina no despolimerizada procedentes de los equipos de filtración, corriente 21 y corriente 24, (2,4 bar y 25°C) se unifican en una sola corriente, corriente 25, siendo esta la corriente principal de recirculación. Para adecuar la corriente a las condiciones de presión de operación del reactor, la presión de la corriente es aumentada por medio de la bomba centrífuga P-202 A/B hasta los 10 bar. La corriente 26 retorna a la Sección 100, enlazándose con la corriente 5 previamente descrita.

La corriente 27 o el efluente del equipo de nanofiltración F-202 A/B, (2,4 bar y 25°C) contiene el producto de interés, junto con otros compuestos fenólicos y ácidos. Dicha se almacena en el tanque V-201 con el objetivo de garantizar un flujo estable a la siguiente etapa y, con ello, la continuidad del proceso. A la salida de dicho tanque, esta es sometida a un proceso de separación por adsorción en las columnas T-201/T-202, dos columnas de adsorción idénticas dispuestas en paralelo. Estas operan de tal manera que mientras en una se lleva a cabo el proceso de adsorción, en la otra se lleva a cabo el proceso de desorción. Esto se traduce en que las columnas operan de manera cíclica.

Dicha desorción se realiza mediante la técnica de dos eluyentes: agua desionizada y disolución de etanol al 96%. Durante la etapa de adsorción, la corriente de alimentación fluye en sentido descendente a lo largo del lecho, formado por una resina afín a los compuestos a separar. El proceso logra que principalmente la vainillina y el siringaldehído se queden adsorbidos en el sólido, mientras que el resto de los compuestos separados se someten a tratamiento fuera de los límites de batería.

La desorción se divide en dos etapas. En la primera de ellas, una corriente de agua desionizada a presión atmosférica se suministra a través de la corriente 29. Esta aumenta su presión hasta 2,4 bar mediante la bomba centrífuga P-203 A/B, siendo la corriente 30 la que alimenta la columna con dicho compuesto. El uso de agua desionizada permite la desorción de la vainillina y siringaldehído, que salen de la columna hacia la siguiente etapa de separación a través de la corriente 34, a una temperatura de 25°C.

La segunda etapa de desorción se realiza con una disolución de etanol, que es bombeado de forma análoga al agua desionizada por medio de la bomba centrífuga P-204 A/B a una presión de 2,4 bar, a través de la corriente 32. El etanol permite la desorción de otros compuestos minoritarios que hayan podido quedar adsorbidos en el adsorbente y que no han sido desorbidos en el proceso con agua desionizada debido a una mayor fuerza de enlace. La corriente de salida de etanol con dichos compuestos y la corriente de salida en el proceso de adsorción saldrán del proceso a través de la corriente 33 para su correcto tratamiento fuera de los límites de batería. El proceso de separación por adsorción se encuentra controlado por un sistema de PLC, tal y como se describe en el apartado *10.Estrategia de control del proceso*, que regula los tiempos de adsorción y desorción en las columnas.

La corriente 34 de productos procedente de las columnas de adsorción pasa un tanque de almacenamiento V-202. Este equipo resulta fundamental en el sistema ya que garantiza que el proceso de producción se pueda realizar en continuo.

La corriente de salida del tanque V-202, corriente 36, entra en el precipitador PR-201, el cual tiene como objetivo la separación de la vainillina y siringaldehído. Este proceso se realiza en unas condiciones de presión y temperatura de 1 bar y 25°C, respectivamente. La precipitación del siringaldehído se produce al adicionar una disolución de NH₃ al 20%, a través de la corriente 36 a presión y temperatura de 1 bar y 25°C. El siringaldehído precipitado junto con una pequeña fracción de vainillina sale a través de la corriente 37. Por otra parte, se logra obtener una corriente con disolución del producto de interés, vainillina, junto con agua, amoníaco y una pequeña fracción de siringaldehído.

9.4.3. Sección 300: Purificación

En esta sección se lleva a cabo la purificación del producto de interés, vainillina. Para ello, la corriente 38 procedente de la Sección 200, es impulsada mediante la bomba P-301 A/B hacia el spray dryer, corriente 39.

En este equipo, la solución acuosa de vainillina y amoníaco es pulverizada, haciendo pasar una corriente de aire caliente seco, lo que provoca la evaporación del agua y amoníaco, junto con pequeñas fracciones de vainillina y siringaldehído (corriente 40). Se obtiene finalmente un producto en forma de polvo blanco, corriente 41, que se corresponde con el producto de interés, vainillina con una pureza del 98%.

9.5. Descripción detallada de equipos

A continuación, se hará una descripción detallada de los equipos implementados en cada sección, que hacen posible que se lleve a cabo el proceso de manera efectiva.

9.5.1. Sección 100

En ella se engloban los equipos que permiten el acondicionamiento de materias primas y la reacción de despolimerización de lignina Kraft. Los equipos de la Sección 100 se recogen en la *Tabla 14*.

Tabla 14: Resumen de equipos en sección 100. Fuente: [Elaboración propia]

Equipo	Denominación
Tanque de mezcla	TM-101
Bomba	P-101 A/B
Compresores	C-101 A/B, C-102 A/B
Intercambiador de calor	E-101, E-102, E-103
Reactor	R-101
Filtro	F-101 A/B

9.5.1.1. Tanque de mezcla TM-101

Se trata de un tanque agitado donde se realiza la mezcla de las corrientes de entrada de materias primas, lignina Kraft, hidróxido sódico y agua (Corrientes 1, 2, 3), a presión atmosférica y 25°C. Posee un sistema de agitación con el fin de garantizar que la mezcla sea homogénea.

9.5.1.2. Bomba P-101 A/B

El objetivo de la bomba centrífuga P-101 A/B es la elevación de la presión de la corriente 4 hasta los 10 bar, a la que se lleva a cabo la reacción posterior. Es importante destacar que la bomba debe estar preparada para impulsar corrientes que contengan compuestos de muy alto peso molecular, como lo es la lignina Kraft. Existen dos bombas P-101 idénticas y en paralelo, para asegurar que en caso de avería de la bomba A el proceso pueda continuar entrando en funcionamiento la bomba B.

9.5.1.3. Compresor C-101 A/B

Este compresor opera en la línea de entrada de aire fresco con el objetivo de elevar su presión hasta los 3 bar, condiciones a las que se lleva a cabo su filtración para enriquecimiento. Análogamente a los equipos de bombeo, se dispone de una pareja idéntica de compresores, dispuestos en paralelo, para que en el caso de que el compresor A falle, el compresor B pueda asumir la tarea.

9.5.1.4. Intercambiador de calor E-101

Se trata de un intercambiador de calor de carcasa y tubos, cuya misión realizar una primera elevación de la temperatura de la corriente de alimentación al reactor hasta los 115,42°C, aprovechando para ello la energía térmica cedida por el fluido refrigerante que circula por la camisa del reactor R-101.

9.5.1.5. Intercambiador de calor E-102

Este equipo se encarga de realizar la segunda etapa de calentamiento de la corriente de alimentación al reactor y que procede del intercambiador E-101. El intercambiador E-102 trabaja con vapor de media presión lo que permite elevar la temperatura de dicha corriente a la temperatura de operación del reactor R-101, 160 °C.

9.5.1.6. Intercambiador de calor E-103

En este caso, el intercambiador de calor E-103 se encargará del adecuar la temperatura de la corriente de aire enriquecido al reactor, desde unas condiciones de 239,06°C y 10 bar hasta 160°C, empleando agua como fluido refrigerante.

9.5.1.7. Reactor R-101

El reactor R-101 alberga la reacción de despolimerización de la lignina Kraft en medio básico, empleando aire enriquecido al 50% de oxígeno. Se trata de un reactor bifásico gas-líquido, con una configuración de columna de burbujeo empacada con un relleno estructurado. La reacción se lleva a cabo en unas condiciones de 160°C y 10 bar de presión total, con una presión parcial de oxígeno de 5 bar. En él, la fase líquida y la fase gas fluyen en contracorriente, siendo la entrada de corriente de alimentación por la cabeza del reactor y cayendo a través del lecho en dirección descendente; mientras que la fase gas entra homogéneamente por la parte de colas del reactor, gracias a un distribuidor de gas situado en la zona inferior del reactor.

El estructurado contribuye a un mayor y mejor contacto de ambas fases, aumentando la transferencia de materia, la conversión en el reactor y compensa la baja solubilidad del oxidante en la fase líquida. El oxígeno contenido en la corriente de aire enriquecido se alimenta en exceso para garantizar la máxima solubilidad de este a lo largo de toda la columna, lo que contribuye a aumentar la conversión. El oxígeno no reaccionado junto con el nitrógeno como inerte abandonan la columna por la parte superior. Una parte de la salida de gases es recirculada, corriente 18, previa purga de inerte, corriente 17, para evitar su acumulación, a 160°C.

Las reacciones que tienen lugar son de naturaleza exotérmica, por lo que, para garantizar unas condiciones isotermas, una camisa de refrigeración envuelve el reactor.

Dicha camisa emplea DowTherm como fluido refrigerante, siendo este enfriado en el intercambiador E-101 al aumentar la temperatura de la corriente 7 para la entrada al reactor. Se conforma así un proceso de integración energética en el proceso.

9.5.1.8. Filtro F-101 A/B

Se trata de un equipo compuesto por una membrana polimérica cuyo objetivo es la separación de N₂ del aire atmosférico, obteniéndose una corriente de aire enriquecido en O₂. En este caso, el equipo proporciona aire enriquecido al 50,6% de O₂, con un rendimiento del 50% con respecto al O₂ de entrada. [87]

9.5.2. Sección 200

En esta sección se llevan a cabo las distintas operaciones de separación de los compuestos como productos de la reacción llevada a cabo en la Sección 100. Los equipos de la Sección 200 se recogen en la *Tabla 15*.

Tabla 15: Resumen de equipos en Sección 200. Fuente: [Elaboración propia]

Equipo	Denominación
Bombas	P-201 A/B, P-202 A/B, P-203 A/B, P-204 A/B
Columnas adsorción	T-201/T-202
Filtros	F-201 A/B, F-202 A/B
Intercambiadores de calor	E-201
Precipitador	PR-201
Tanques almacenamiento	V-201, V-202

9.5.2.1. Bomba P-201 A/B

Se trata de una bomba de tipo centrífuga cuyo objetivo es elevar la presión de la corriente 22 procedente del equipo de ultrafiltración F-201 A/B, hasta una presión de 30 bar (corriente 23) a la que opera el filtro F-202 A/B. Se dispone de dos bombas idénticas en paralelo para garantizar la continuidad del proceso en caso de avería tal y como se ha explicado en los equipos de la Sección 100.

9.5.2.2. Bomba P-202 A/B

El objetivo de esta bomba centrífuga es elevar la presión de la corriente 25, de recirculación de lignina Kraft no despolimerizada a la sección 100, hasta una presión de 10 bar. Existen dos bombas del mismo tipo dispuestas en paralelo para asegurar la continuidad del proceso en caso de avería.

9.5.2.3. Bomba P-203 A/B

Se encuentra en la corriente de entrada de agua desionizada hacia las columnas de adsorción (corriente 29). El objetivo es la elevación de la presión, desde presión atmosférica hasta 2,4 bar, a la que se realiza la entrada de corrientes en las columnas de adsorción T-201/T-202. Existen dos bombas del mismo tipo dispuestas en paralelo para asegurar la continuidad del proceso en caso de avería.

9.5.2.4. Bomba P-204 A/B

El propósito de esta bomba es idéntico al de la bomba P-203 A/B, la elevación de presión hasta los 2,4 bar. Sin embargo, en este caso, será aplicada a la corriente 31 de alimentación de etanol al 96% a las columnas de adsorción T-201/T-202. Existen dos bombas del mismo tipo dispuestas en paralelo para asegurar la continuidad del proceso en caso de avería.

9.5.2.5. Columnas de adsorción T-201/T-202

El proceso de separación de productos mediante adsorción se realiza en dos columnas de adsorción idénticas dispuestas en paralelo, de tal manera que mientras una de las columnas opera en modo de adsorción, la otra lo hace en el modo de desorción. Esto se denomina como operación cíclica, con lo que se consigue que un proceso discontinuo como lo es la separación por adsorción, se convierta en un proceso continuo mediante la combinación de dos lechos.

El proceso de adsorción comienza con la introducción de la corriente de alimentación de productos (corriente 28) por la parte superior de la columna a una presión y temperatura de 2,4 bar y 25°C. La columna cuenta con un relleno adsorbente de tipo polimérico (resina SP700) a la cual se adsorben los compuestos vainillina y siringaldehído, y quedan por tanto separados del resto de compuestos, que eluyen por la parte inferior de la columna para su correcta gestión fuera de los límites de batería a través de la corriente 33.

El proceso de desorción se lleva a cabo empleando dos eluyentes. En el primer ciclo de desorción, cuya duración asciende a 1 hora, se introduce agua desionizada por la parte superior de la columna a 2,4 bar y 25°C. En este ciclo se desorben la vainillina y siringaldehído adsorbidos, saliendo dichos compuestos por la corriente 34 de productos hacia el siguiente proceso de separación.

El siguiente ciclo de desorción se lleva a cabo empleando una disolución de etanol al 96%, en las mismas condiciones que el primer eluyente, y cuya duración asciende a 30 minutos.

El etanol permite la desorción de otros compuestos minoritarios que hayan podido quedar adsorbidos en el proceso, siendo extraídos del proceso por la corriente 33 de residuos. Con este procedimiento queda regenerado el lecho adsorbente y está preparado para llevar a cabo un nuevo ciclo de adsorción.

Tal y como se ha mencionado anteriormente, la operación de adsorción se lleva a cabo durante un tiempo de 2,4 horas y los procesos de desorción durante 1 hora y 30 minutos para las etapas de desorción con agua desionizada y con etanol al 96%, respectivamente.

Existe un tiempo ocioso en el que una de las columnas se encuentra en espera, lo cual es un fenómeno habitual en este tipo de procesos con el objetivo de no emplear cantidades innecesarias de fluido desorbente. Dicho tiempo de espera asciende a 0,9 horas, en las que el equipo está preparado para realizar un nuevo ciclo.

El proceso y diseño de la columna de desorción que, como se ha explicado, estará duplicada en el proceso (T-201/T-202) se explicará en detalle en el *Anexo II. Cálculos justificativos. Parte B*.

9.5.2.6. Filtro F-201 A/B

El filtro F-201 A/B es un equipo de ultrafiltración cuyo objetivo es la separación de los compuestos de alto peso molecular provenientes de la reacción de despolimerización de lignina Kraft. El equipo contiene una membrana de ultrafiltración de 1 kDa, compuesta por TiO₂ con soporte cerámico. [88]

El proceso de ultrafiltración tiene un alto impacto en la separación de los compuestos de alto peso molecular, logrando un rendimiento de separación del 97% de lignina, que será recirculada junto con un 25% del caudal de agua de entrada al equipo hacia la Sección 100. La corriente de salida (corriente 22) se dirige hacia la segunda etapa de filtración, a una presión y temperatura de 2,4 bar y 25°C, respectivamente. Se dispone de dos filtros idénticos dispuestos en paralelo con el objetivo de mantener la continuidad del proceso en caso de ensuciamiento excesivo o avería del equipo general de operación. [88]

9.5.2.7. Filtro F-202 A/B

Se trata de un equipo de nanofiltración, encargado de realizar la segunda etapa de filtración para la separación de compuestos de alto peso molecular como la lignina no despolimerizada. Este equipo se compone de una membrana de filtración 600 Da de TiO₂ con soporte cerámico. Opera en unas condiciones de presión y temperatura de 25°C y 30 bar, logrando una retención del 75% de lignina, la cual será recirculada a la Sección 100 junto con un 25% del flujo de entrada de agua a través de la corriente 24. Se dispone de dos filtros idénticos dispuestos en paralelo con el objetivo de mantener la continuidad del proceso en caso de ensuciamiento excesivo o avería del equipo general de operación.

9.5.2.8. Intercambiador de calor E-201

Este equipo tiene como principal objetivo la disminución de temperatura de la corriente 19, correspondiente con la salida de productos del reactor R-101. Se utiliza agua enfriada como fluido refrigerante, haciendo que la temperatura se reduzca de 160°C a 25°C.

9.5.2.9. Precipitador PR-201

Este equipo es el encargado de realizar la separación entre la vainillina y siringaldehído. Este proceso tiene lugar en unas condiciones de presión y temperatura de 1 bar y 25°C. Para llevar a cabo la precipitación del siringaldehído se adiciona NH₃ al 20% a través de la corriente 36, con lo que se consigue la mencionada precipitación del compuesto, que será extraído del proceso a través de la corriente 37.

La corriente acuosa de vainillina con amoníaco sale del equipo de precipitación (corriente 38) en unas condiciones de presión y temperatura de 1 bar y 25°C hacia la Sección 300. [52]

9.5.2.10. Tanque de almacenamiento V-201

En este equipo se almacena la corriente procedente de los equipos de filtración F-202 A/B con el objetivo de garantizar la continuidad del proceso. Para ello, proporciona un flujo constante y estable líquido hacia las columnas de adsorción T-201/T-202. El almacenamiento se realiza en unas condiciones de 25°C y 2,4 bar.

9.5.2.11. Tanque de almacenamiento V-202

En este equipo se almacena la corriente de productos procedente de la desorción con agua desionizada (corriente 34) a una temperatura de 25°C. Este tanque de almacenamiento resulta de vital importancia para la continuidad del proceso ya que, la adsorción que se lleva a cabo en las columnas T-201/T-202 es un proceso cíclico. Por ello, se almacena la cantidad de disolución que contiene los productos necesaria garantizar que el flujo hacia el precipitador PR-201 sea siempre continuo a través de la corriente 35.

9.5.3. Sección 300

En esta sección se lleva a cabo la purificación del producto de interés, Vainillina, logrando que alcance el 98% de pureza. Los equipos presentes en la Sección 300 se recogen en la *Tabla 16*.

Tabla 16: Resumen de equipos en sección 300. Fuente:[Elaboración propia]

Equipo	Denominación
Bomba	P-301 A/B
Spray dryer	SD-301

9.5.3.1. Bomba P-301 A/B

Este equipo tiene el objetivo de impulsar la corriente de salida del precipitador, corriente 38, hacia el spray dryer. Para ello, realiza un aumento de presión hasta 1,03 bar.

Existen dos equipos idénticos dispuestos en paralelo para asegurar la continuidad del proceso en caso de avería.

9.5.3.2. Spray dryer SD-301

En este equipo se realiza el proceso de purificación de vainillina, obteniendo un producto en polvo del 98% de pureza.

Para ello, la corriente 39 de alimentación es pulverizada en el interior del equipo mientras se hace pasar una corriente de aire caliente seco, la cual provoca la separación del agua y amoníaco por evaporación. Se obtiene así un producto en polvo: vainillina de alta pureza. [89]

10. Estrategia de control del proceso

Todo proceso químico está sometido a variaciones u oscilaciones en sus condiciones de operación. El proceso planteado en este proyecto no es una excepción, por lo que será necesario diseñar un sistema de control que ajuste las variables del proceso necesarias para contrarrestar dichas perturbaciones.

En un problema de control, el comportamiento deseado del proceso se expresa en una serie de funciones matemáticas, con la que se analiza la evolución en el tiempo de ciertas variables del proceso, las cuales se clasifican de la siguiente forma. [90]

- Variable controlada: Es la variable medida con un instrumento y la cual se requiere que mantenga un valor deseado denominado *punto de consigna* o *set-point*.
- Variable perturbación: Afecta a las variables controladas y son externas al sistema de control.
- Variable manipulada: Tiene como objetivo compensar las desviaciones producidas por el efecto de las variables perturbación.

10.1. Justificación de la selección de la estrategia de control

Existen diversos tipos de sistemas de control dependiendo de su método de funcionamiento. Uno de los más usados en la industria es el lazo de realimentación o *feed-back*, el cual será empleado para el control de proceso por ser un sistema fácil de implementar y a la vez robusto y eficaz. [90]

Ante una determinada perturbación en el proceso, el sistema de control debe garantizar que el proceso se mantenga dentro de los valores estipulados.

La actuación de este sistema se basa en el error resultante de la diferencia entre el valor de la variable medida y el valor del *set-point*. Debido al gran número de variables a controlar, este sistema hace uso de elementos esenciales para mantener el proceso bajo control. [90]

En primer lugar, el lazo de control en un sistema de realimentación está formado por sensores o medidores. Son elementos primarios de medida, lo cuales recogen el valor de un fenómeno físico midiendo las variables controladas, de perturbación y variables secundarias. A continuación, los transmisores recogen la señal del sensor y la transforman, pasando de una señal estándar a una señal que pueda interpretar el controlador. [90]

Habitualmente se emplean señales eléctricas, cuyo rango oscila entre 4-20 mA, y las de tipo neumático, cuyo rango oscila entre 3-15 psi, aunque también son comunes las señales de tipo digital. El controlador recogerá las señales de las variables medidas y las compara con el valor del *set-point* establecido. En base al análisis elabora una respuesta de salida, que será enviada al actuador. Este se encarga de modificar el valor de la variable manipulada en base a la señal recibida desde el controlador. [90]

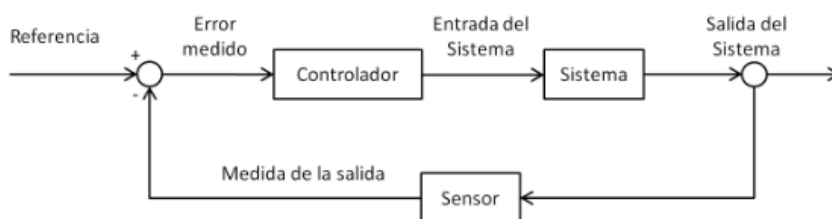


Figura 34: Sistema de control con lazo feedback. Fuente: [91]

Cabe destacar que el sistema de control para el caso de las columnas de adsorción es diferente al lazo *feed-back* explicado anteriormente. Esto se debe a que en ambas columnas se desarrollan distintas etapas dentro del proceso global de separación por adsorción, o lo que es lo mismo, siguen un proceso cíclico, por lo que el control será de tipo discreto.

La variable que se debe controlar en este caso es el tiempo durante el cual discurren los distintos fluidos a través de las columnas, lo que a su vez determina la etapa que se realiza en ese momento. Por tanto, será necesario el uso de un sistema de control más sofisticado, mediante un controlador lógico programable o PLC. Su nombre ya revela la principal ventaja de este tipo de controladores, y es que, a diferencia de los controladores PID, lo cuales están diseñados para realizar un solo tipo de control, el PLC puede ser programado para realizar casi cualquier tarea en base a las señales de entrada que reciba o en base a su programación como tal. Además, se trata de sistemas muy robustos y de alta fiabilidad, preparados para trabajar durante décadas sin reportar fallos.

Su versatilidad también está justificada, ya que, al poder ser programados, se pueden adaptar si a futuro el proceso así lo requiere. Su implementación como parte del sistema de control de las columnas de adsorción T-201/T-202 se analizará más adelante en el apartado 10.3.2. *Sección 200*. [92]

10.1.1. Algoritmo de control

Los algoritmos empleados habitualmente para realizar el control son los de tipo proporcional (P), proporcional-integral (PI) y proporcional-integral-derivativo (PID). La selección del tipo de algoritmo se realizará en base a la variable a controlar y a las distintas características de cada tipo, las cuales se mencionan a continuación.

Control proporcional (P)

El parámetro de ajuste de la acción proporcional es la ganancia proporcional K_c . Este tipo de control no evita el error en régimen permanente, aunque este se vuelva menor a medida que el valor de K_c aumenta [90]. La actuación de este tipo de control se rige por la *Ecuación (4)*.

$$m(t) = \bar{m} + K_c * e(t) \quad (4)$$

Siendo \bar{m} la señal de *bías*, $m(t)$ la señal de salida del controlador, K_c ganancia del controlador y $e(t)$ el error.

Control proporcional-integral (PI)

Debido a que la respuesta del control no es capaz de eliminar el error de régimen permanente, se implementa la acción integral a este primer tipo de control. Con ello, se logra obtener una respuesta más rápida ante una perturbación, eliminando el error de off-set. La actuación de este tipo de control se rige por la *Ecuación (5)*. [90]

$$m(t) = \bar{m} + K_c * \left(e(t) + \frac{1}{\tau} \int e(t) dt \right) \quad (5)$$

Siendo τ el tiempo integral, expresando en minutos.

Control proporcional-integral-derivativo (PID)

La introducción del tiempo derivativo (T_D) logra que la respuesta que se da ante una perturbación sea más rápida que con un control PI.

Además, ante una fuerte perturbación el factor derivativo proporciona una respuesta con menor número de oscilaciones, lo cual hace que el control PID sea adecuado para procesos que puedan sufrir grandes variaciones, tales como la temperatura o presión. La actuación de este tipo de control se rige por la siguiente *Ecuación (6)*. [90]

$$m(t) = \bar{m} + Kc * \left(e(t) + \frac{1}{\tau} \int e(t)dt + T_D \frac{de(t)}{dt} \right) \quad (6)$$

Una vez analizados los distintos algoritmos de control se concluye que en los controladores del proceso para caudal, presión y nivel se empleará uno de tipo proporcional-integral, PI. Por otro lado, la variable temperatura suele estar sujeta a variaciones más bruscas, por lo que se empleará uno de tipo PID debido a las ventajas que aporta sobre el PI. [90]

10.2. Nomenclatura y simbología empleada

El análisis y diseño del sistema de control del presente proceso se realizará siguiendo una serie de nomenclatura y simbología con el fin de facilitar el entendimiento de los distintos lazos de control y sus características. En la *Tabla 17* se recoge el significado de cada símbolo.

Tabla 17: Nomenclatura de control. Fuente: [93]

Letra	1ª Posición	Otras posiciones
A	Análisis	Alarma
C	-	Control
D	Diferencial	-
F	Caudal	-
H	Manual	Alto
I	Intensidad	Indicador
L	Nivel	Bajo
P	Presión/Vacío	-
S	Velocidad	Seguridad
T	Temperatura	Transmisor
V	-	Válvula
Y	Presencia	Conversor

En la *Figura 35*, se muestra la simbología sobre la ubicación de los elementos de control ubicados en la planta.

	Ubicación Primaria	Montado en campo	Ubicación Auxiliar
Instrumentos Discretos			
Indicadores o controladores distribuidos			
Función de computo			
Controlador Lógico Programable			

Figura 35: Simbología ubicación de los elementos de control. Fuente: [94]

En la *Figura 36* se muestra la simbología de las conexiones de los distintos elementos de control.

Señal a proceso o alimentación de un dispositivo		Señal no definida	
Señal neumática		Señal eléctrica	
Señal hidráulica		Tubo capilar	
Electromagnética o sónica guiada		Electromagnética o sónica no guiada	
Señales internas (software)		Señales eléctricas binarias	
Señales neumáticas binarias		Enlace mecánico	

Figura 36: Simbología conexiones de los elementos de control. Fuente: [94]

10.3. Variables de control del proceso

En este punto se analizarán las variables de control del proceso, así como las variables manipuladas con el objetivo de contrarrestar los efectos de las posibles perturbaciones. En el análisis se han priorizado las variables que garantizan que el proceso se realice bajo las condiciones necesarias, establecidas por diseño.

10.3.1. Sección 100

En la *Tabla 18* se muestran los distintos objetivos de control y variables manipuladas, relativos a la Sección 100 de acondicionamiento de materias primas y reacción.

Tabla 18: Variables controladas y manipuladas en la Sección 100. Fuente: [Elaboración propia]

Variable controlada	Variable manipulada
Nivel de líquido en el tanque de mezcla TM-101	Caudal efluente del tanque de mezcla
Caudal de fluido efluente de P-101 A/B hacia el intercambiador E-101	Flujo de salida de la bomba P-101 A/B
Presión de salida del compresor C-101 A/B	Flujo de aire efluente del compresor C-101 A/B
Presión de salida del compresor C-102 A/B	Flujo de aire efluente del compresor C-102 A/B
Temperatura de salida de la corriente de gas enriquecido del intercambiador E-103	Caudal de fluido refrigerante a través del intercambiador E-103
Temperatura en el interior del reactor R-101	Caudal de fluido refrigerante a través del intercambiador E-101
Temperatura de entrada al reactor R-101	Caudal de vapor de media presión a través del intercambiador E-102
Presión en el interior del reactor R-101	Caudal de entrada de gas enriquecido a la entrada del reactor R-101
Nivel de líquido en el interior del reactor R-101	Caudal de la corriente de productos a la salida del reactor R-101

10.3.1.1. Descripción de los lazos de control

Se procederá a la realización de la descripción de los lazos de control pertenecientes a la Sección 100, en base a los objetivos de control descritos anteriormente en la *Tabla 18*.

- Lazo de control LIC-101

El principal objetivo de este lazo es el control del nivel de líquido en el tanque de mezcla TM-101. Para llevar a cabo dicho cometido, el transmisor de nivel LT-101 situado en el tanque envía una señal de tipo eléctrica al controlador e indicador de nivel LIC-101. Este elaborará una respuesta en función del punto de consigna o *set-point* configurado para ello, la cual será enviada como señal eléctrica al transductor LY-101, que convertirá dicha señal eléctrica en una señal de tipo neumática para el accionamiento de la válvula de control de flujo LV-101, situada a la salida del tanque de mezcla.

- Lazo de control FIC-101

El principal objetivo de este lazo es el control de caudal de fluido proveniente del tanque de mezcla TM-101, hacia intercambiador E-101, garantizando que este sea estable y continuo. Para llevar a cabo dicha acción, el transmisor de flujo FT-101 envía una señal eléctrica con la información relativa al flujo al controlador e indicador de flujo FIC-101.

En función de la información entrante, elaborará una respuesta en forma de señal eléctrica al transductor FY-101 de la válvula de control de flujo FV-101 en base al valor de consigna estipulado, cuyo accionamiento se realizará en base a la señal neumática de entrada.

- Lazo de control PIC-101

Este lazo tiene como objetivo el control de la presión de salida del compresor C-101 A/B de la corriente de aire fresca al proceso establecido a 3 bar, para lo cual, se regulará el flujo de aire. El medidor de presión PT-101 transmite en forma de señal eléctrica la información sobre la presión de salida del compresor al controlador e indicador de presión PIC-101. Este emitirá una señal de respuesta de tipo eléctrico hacia el transductor PY-101 de la válvula de control PV-101, cuyo accionamiento permitirá la regulación del flujo de aire.

- Lazo de control PIC-102

Del mismo modo que en lazo de control PIC-101, el objetivo de este lazo es el control de la presión del aire enriquecido en O₂, 10 bar, a su salida del compresor multietapa C-102 A/B.

Se emplea un medidor de presión PT-102 para la transmisión de la información sobre dicha variable en forma de señal eléctrica al controlador e indicador de presión PIC-102, el cual enviará una señal eléctrica de respuesta en base al valor de consigna establecido al transductor PY-102 de la válvula de control PV-102.

- Lazo de control TIC-101

El objetivo de este lazo es el control de la temperatura de la corriente de aire enriquecido en O₂, proveniente del C-102 A/B en dirección a la de entrada al reactor R-101, asegurándose de que se realice a 160°C. Para ello, un medidor y transmisor de temperatura TT-101 envía una señal eléctrica con la información sobre la temperatura de la corriente 14 al controlador e indicador de temperatura TIC-101. Este elabora una respuesta en función del *set-point*, que será enviada en forma de señal eléctrica. Dicha señal eléctrica será convertida a señal neumática por medio del transductor TY-101, cuya señal de salida es transmitida al actuador de la válvula de control de flujo de vapor de media presión TV-101, regulando el caudal de vapor al intercambiador E-103.

- Lazo de control TIC-102

El objetivo de este lazo es el control de la temperatura en el interior del reactor, hecho que se considera fundamental debido a que la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción ascienda a 160°C y esta es de tipo exotérmico. Para ello, el medidor y transmisor TT-102 realizará una medición de la temperatura en la parte superior del equipo y transmitirá la información en forma de señal eléctrica al controlador e indicador de temperatura TIC-102.

Este elabora una respuesta en función del *set-point*, que será enviada en forma de señal eléctrica. Dicha señal eléctrica será convertida a señal neumática por medio del transductor TY-102, cuya señal de salida es transmitida al actuador de la válvula de control de flujo de fluido refrigerante DowTherm, TV-102, regulando el caudal de fluido refrigerante que circula por el intercambiador de calor E-101 hacia la camisa de refrigeración del reactor.

- Lazo de control TIC-103

Tal y como se ha mencionado anteriormente, la temperatura a la que se lleva a cabo la despolimerización de la lignina en el interior del reactor R-101 asciende a 160°C. Este lazo de control tiene como objetivo el mantener esta temperatura en la corriente de entrada al reactor. El medidor y transmisor TT-103 realiza una lectura de la temperatura de la corriente de salida del intercambiador E-102. Esta información es transmitida al controlador e indicador de temperatura TIC-103 en forma de señal eléctrica, el cual elabora una señal eléctrica de respuesta y la envía al transductor TY-103 de la válvula de control TV-103, encargada de regular el flujo de vapor de media presión al intercambiador de calor E-102.

- Lazo de control PIC-103

Este lazo se encargará del control de la presión en el interior del reactor por medio de la manipulación del caudal de gas enriquecido de entrada al reactor. Para ello, el medidor y transmisor de presión PT-103 enviará una señal eléctrica con la información sobre la presión del reactor al controlador e indicador de presión PIC-103.

Este elabora una respuesta que será enviada en forma de señal eléctrica al transductor PY-103, el cual transformará la señal eléctrica a neumática. Dicha señal se envía al actuador de la válvula PV-103, encargada de la regulación del caudal de aire enriquecido al reactor.

- Lazo de control LIC-102

Este lazo se encargará del control del nivel de líquido en el interior del reactor por medio de la manipulación del caudal de salida de productos del reactor. Para ello, el medidor y transmisor de nivel LT-102 enviará una señal eléctrica con la información sobre el nivel del reactor al controlador e indicador de nivel LIC-102. Este elabora una respuesta que será enviada en forma de señal eléctrica al transductor LY-102, el cual transformará la señal eléctrica a neumática. Dicha señal se envía al actuador de la válvula de control LV-102, encargada de la regulación del caudal de corriente de salida de productos del reactor R-101.

10.3.2. Sección 200

En esta sección se analizarán los distintos objetivos de control, relativos a la Sección 200 de separación de productos. Las distintas variables controladas y manipuladas se recogen en la *Tabla 19*.

Tabla 19: Variables controladas y manipuladas de la Sección 200. Fuente: [Elaboración propia]

Variable controlada	Variable manipulada
Temperatura de la corriente de salida de productos del intercambiador E-201	Caudal de fluido refrigerante a través del intercambiador E-201
Caudal de fluido efluente de P-201 A/B hacia el filtro F-202 A/B	Flujo de salida de la bomba P-201 A/B
Caudal de fluido efluente de P-202 A/B en la corriente de recirculación de lignina	Flujo de salida de la bomba P-202 A/B
Nivel de líquido en el tanque V-201	Caudal de la corriente de salida del tanque V-201
Caudal de agua desionizada efluente de P-203 A/B hacia las columnas de adsorción T-201/T-202	Flujo de salida de la bomba P-203 A/B
Caudal de disolución de etanol efluente de P-204 A/B hacia las columnas de adsorción T-201/T-202	Flujo de salida de la bomba P-204 A/B
Tiempo de flujo cada una de las corrientes de entrada y salida de T-201/T-202	Apertura o cierre de las válvulas de control de caudal mediante PLC
Nivel de líquido en el tanque V-202	Caudal de la corriente de salida del tanque V-202
Nivel de líquido en el equipo de precipitación PR-201	Caudal de la corriente de salida del precipitador PR-201

10.3.2.1. Descripción de los lazos de control

Se procederá a la realización de la descripción de los lazos de control pertenecientes a la Sección 200, en base a los objetivos de control descritos anteriormente en la *Tabla 19*.

- Lazo de control TIC-201

El objetivo de este lazo es el control de la temperatura de la corriente de salida del intercambiador E-201 en dirección a la entrada del filtro F-201 A/B, asegurándose de que se realice a una temperatura de 25°C para que no afecte al rendimiento del equipo de filtración. Para ello, un medidor y transmisor de temperatura TT-201 envía una señal eléctrica con la información sobre la temperatura de la corriente 20 al controlador e indicador de temperatura TIC-201. Este elabora una respuesta basada en el *set-point* establecido, que será enviada en forma de señal eléctrica.

Dicha señal eléctrica será convertida a señal neumática por medio del transductor TY-201, cuya señal de salida es transmitida al actuador de la válvula de control de flujo de agua de enfriamiento TV-201.

- Lazo de control FIC-201

Este lazo de control tiene el objetivo garantizar un flujo constante y estable de la corriente de productos a la salida de la bomba P-201 A/B hacia el equipo de filtración F-202 A/B a una presión de 30 bar. Para ello, un medidor y transmisor de caudal FT-201 envía una señal eléctrica con la información sobre el flujo al controlador e indicador FIC-201. Este elabora una respuesta en base a la señal de entrada y al valor de consigna establecido, enviándose en forma de señal eléctrica al transductor FY-201 de la válvula de control de flujo FV-201, que convertirá la señal eléctrica en neumática para el accionamiento del actuador de esta, regulando entonces el flujo de salida de la bomba P-201 A/B.

- Lazo de control FIC-202

Se encarga de garantizar el flujo estable y continuo a la salida de la bomba P-202 A/B de la corriente de recirculación que contiene lignina no despolimerizada. El medidor y transmisor de caudal FT-202 envía una señal eléctrica con la información sobre el caudal de dicha corriente a la salida de la bomba. Dicha señal será recogida por el controlador e indicador FIC-202 que en base al valor de consigna establecido y junto con la información de entrada, elabora una respuesta enviada al transductor FY-202 para la transformación de la información en una señal de tipo neumática con el fin de que interactúe el accionador de la válvula de control de flujo FC-202, regulando el caudal así el caudal a la salida de la bomba P-202 A/B.

- Lazo de control LIC-201

El objetivo de este lazo es el control del nivel del tanque de almacenamiento V-201. Para cumplir con dicho objetivo, un medidor de nivel, LT-201, instalado en el tanque envía una señal eléctrica con la información al controlador e indicador de nivel LIC-201, donde se elabora una respuesta de salida en base al *set-point* establecido. Dicha señal eléctrica será enviada al transductor LY-201, el cual transformará la señal eléctrica en una señal neumática, que a su vez será enviada al actuador de la válvula LV-201, con la que se regulará el caudal de salida del tanque de almacenamiento V-201.

- Lazo de control FIC-203

El flujo continuo y estable de agua desionizada a 2,4 bar hacia la columna de adsorción resulta vital. Este lazo de control se asegura de que el caudal a la salida de la bomba P-203 A/B sea así. Para ello, el medidor y transmisor de flujo FT-203 envía una señal eléctrica sobre dicha variable al controlador e indicador FIC-203, el cual elabora una respuesta en base a la señal de entrada y al valor de consigna estipulado.

La respuesta será enviada al transductor FY-203 para su conversión a señal neumática, necesaria para la acción del actuador de la válvula de control de flujo FV-203, que se encargará de la regulación del caudal a la salida de la bomba P-203 A/B.

- Lazo de control FIC-204

La función de este lazo de control es análoga a la del lazo de control FIC-203. El objetivo es garantizar el flujo continuo y estable de la disolución de etanol a 2,4 bar a la salida de la bomba P-204 A/B. Para ello, un medidor y transmisor de caudal FT-204 envía la señal eléctrica al controlador e indicador FIC-204. Con el valor de esa señal y el valor de consigna configurado, este elabora una respuesta que será transmitida al transductor FY-204, convirtiéndola en una señal neumática hacia el actuador de la válvula de control de flujo FV-204.

- Lazo de control PLC 1. Tiempo de operación en las columnas T-201/T-202

En el apartado 9.5.2.5 *Columnas de adsorción T-201/T-202* se ha descrito la función y la operación de las columnas de adsorción en detalle. Estas realizan 3 etapas, una de adsorción y dos de desorción con dos fluidos desorbentes distintos. Cada etapa transcurre durante un período de tiempo, determinado en el diseño de la operación, siendo de 2,4 horas la etapa de adsorción, de 1 hora la etapa de desorción con agua desionizada y 30 minutos la etapa de desorción con la disolución de etanol o regeneración.

Con el fin de regular dichos tiempos de operación, se ha implementado un lazo de control mediante programador lógico programable. El PLC enviará una orden en forma de señal eléctrica a las válvulas de todo o nada para el control del flujo de las corrientes de entrada a la columna (FV-205, FV-206, FV-207, F-208, F-209, F-210) y de salida (FV-211, FV-212, FV-213 y FV-214) en función del ciclo de operación que se deba realizar en cada columna y, por tanto, del tiempo. El PLC se encuentra programado con las secuencias de dichas etapas y en qué posición deben encontrarse las válvulas para cada caso.

A continuación, la *Tabla 20* muestra la secuencia de apertura y cierre de las válvulas por parte del PLC en un ciclo completo de operación de 4,8 horas, es decir, donde ambas columnas hayan realizado todas las etapas una vez.

Tabla 20: Secuencia de apertura y cierre de válvulas por parte del PLC. Fuente: [Elaboración propia]

Secuencia	Válvulas abiertas	Válvulas cerradas
T-201 Adsorción – T-202 Desorción agua desionizada	FV-208, FV-209, FV-212, FV-213	FV-205, FV-206, FV-207, FV-210, FV-211, FV-214
T-201 Adsorción – T-202 Desorción etanol	FV-206, FV-209, FV-213, FV-214	FV-205, FV-207, FV-208, FV-210, FV-211, FV-212
T-201 Adsorción – T-202 en espera	FV-209, FV-213	FV-205, FV-206, FV-207, FV-208, FV-210, FV-211, FV-212, FV-214
T-201 Desorción agua – T-202 Adsorción	FV-207, FV-210, FV-211, FV-214	FV-205, FV-206, FV-208, FV-209, FV-212, FV-213
T-201 Desorción etanol – T-202 Adsorción	FV-205, FV-210, FV-213, FV-214	FV-206, FV-207, FV-208, FV-209, FV-211, FV-212
T-201 en espera – T-202 Adsorción	FV-210, FV-214	FV-205, FV-206, FV-207, FV-208, FV-209, FV-211, FV-212, FV-213

- Lazo de control LIC-202

El objetivo de este lazo es el control del nivel de líquido en el interior del tanque de almacenamiento V-202. Este objetivo se lleva a cabo empleando un medidor y transmisor de nivel LT-202, que enviará una señal eléctrica al controlador e indicador de nivel LIC-202. Este elabora una señal de respuesta en función del valor del *set-point* y la envía al transductor LY-202 para su transformación a una señal de tipo neumática. Dicha señal neumática es recibida por el actuador de la válvula de control LV-202, que regulará el caudal de salida del tanque de almacenamiento.

- Lazo de control LIC-203

El objetivo de este lazo es el control del nivel de líquido en el interior del equipo de precipitación PR-201. Este objetivo se lleva a cabo empleando un medidor y transmisor de nivel LT-203, que enviará una señal eléctrica al controlador e indicador de nivel LIC-203. Este elabora una señal de respuesta en función del valor del *set-point* y la envía al transductor LY-203 para su transformación a una señal de tipo neumática. Dicha señal neumática es recibida por el actuador de la válvula de control LV-203, que regulará el caudal de salida del equipo de precipitación.

10.3.3. Sección 300

En esta sección se analizarán los distintos objetivos de control, relativos a la Sección 300 de separación de productos. Las distintas variables controladas y manipuladas se recogen en la *Tabla 21*.

Tabla 21: Variables controladas y manipuladas en la Sección 300. Fuente: [Elaboración propia]

Variable controlada	Variable manipulada
Caudal de fluido a la salida de P-301 A/B hacia el spray dryer SD-301	Flujo de salida de la bomba P-203 A/B

10.3.3.1. Descripción de los lazos de control

Se procederá a la realización de la descripción de los lazos de control pertenecientes a la Sección 300, en base a los objetivos de control descritos anteriormente en la *Tabla 21*.

- Lazo de control FIC-301

El objetivo de este lazo es garantizar el flujo constante y estable de la corriente 39 a su salida de la bomba P-301 A/B. Para ello, un medidor y transmisor de caudal FT-301 envía una señal de tipo eléctrica al controlador FIC-301, el cual elabora una respuesta enviada al transductor FY-301 de la válvula de control de flujo FV-301, la cual regulará el caudal a la salida de la bomba P-301 A/B.

10.4. Válvulas de alivio

A continuación, en la *Tabla 22* se recogen las válvulas de alivio implementadas en el proceso como medida de seguridad.

Tabla 22: Válvulas de alivio implementadas en los equipos del proceso. Fuente: [Elaboración propia]

Válvula de alivio	Descripción
Sección 100	
PSV-101	Válvula de alivio del tanque de mezcla TM-101
PSV-102 A/B	Válvula de alivio del compresor C-101 A/B
PSV-103 A/B	Válvula de alivio filtro F-101 A/B
PSV-104 A/B	Válvula de alivio del compresor C-102 A/B
PSV-105	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-103
PSV-106	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-101
PSV-107	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-102
PSV-108	Válvula de alivio del reactor R-101

Sección 200	
PSV-201	Válvula de alivio del intercambiador de calor E-201
PSV-202 A/B	Válvula de alivio filtro F-201 A/B
PSV-203 A/B	Válvula de alivio filtro F-202 A/B
PSV-204	Válvula de alivio tanque V-201
PSV-205	Válvula de alivio columna de adsorción T-201
PSV-206	Válvula de alivio columna de adsorción T-202
PSV-207	Válvula de alivio tanque V-202
PSV-208	Válvula de alivio precipitador PR-201
Sección 300	
PSV-301	Válvula de alivio del spray dryer SD-301

10.5. Alarmas e indicadores

A continuación, en la *Tabla 23* y *Tabla 24* se recogen los distintos indicadores y alarmas implantadas en los equipos de proceso.

Tabla 23: Sistemas de alarma en los equipos de proceso. Fuente: [Elaboración propia]

Equipo	Alarmas	Descripción
TM-101	LAL-101/LAH-101	Alarmas de bajo y alto nivel de líquido
F-101 A/B	PAH-101A/PAH-101B	Alarma por alta presión
R-101	PAH-102	Alarma por alta presión
R-101	TAH-101	Alarma por alta temperatura
F-201 A/B	PAH-201A/PAH-201B	Alarma por alta presión
F-202A/B	PAH-202A/PAH-202B	Alarma por alta presión
V-201	LAL-201/LAH-201	Alarmas de bajo y alto nivel de líquido
T-201	PAH-203	Alarma por alta presión
T-202	PAH-204	Alarma por alta presión
V-202	LAL-202/LAH-202	Alarmas de bajo y alto nivel de líquido
PR-201	LAL-203/LAH-203	Alarmas de bajo y alto nivel de líquido
SD-301	TAH-301	Alarma por alta temperatura

Tabla 24: Sistemas de indicación de los equipos de proceso. Fuente: [Elaboración propia]

Equipo	Indicador	Descripción
P-101 A/B	PI-101A/PI-101B	Indicador presión en P-101 A/B
C-101 A/B	PI-102A/PI-102B	Indicador presión en C-101 A/B
F-101 A/B	PI-103A/PI-103B	Indicador de presión en F-101 A/B
C-102 A/B	PI-104A/PI-104B	Indicador de presión en C-102 A/B
F-201 A/B	PI-201A/PI-202B	Indicador de presión en F-201A/B
P-201 A/B	PI-202A/PI-202B	Indicador presión en P-201 A/B
F-202 A/B	PI-203A/PI-203B	Indicador de presión en F-202 A/B
P-202 A/B	PI-204A/PI-204B	Indicador presión en P-202 A/B
P-203 A/B	PI-205A/PI-205B	Indicador presión en P-203 A/B
P-204 A/B	PI-206A/PI-206B	Indicador presión en P-204 A/B
P-301 A/B	PI-301A/PI-301B	Indicador presión en P-301 A/B
SD-301	TI-301	Indicador de temperatura en SD-301

11. Seguridad en la instalación

11.1. Introducción

Desde mediados del siglo pasado, se ha producido un desarrollo tecnológico muy importante, con el objetivo de aumentar la seguridad en los procesos químicos; hasta el punto de que, en la actualidad, la seguridad y prevención tiene la misma importancia que la propia producción del proceso. El concepto de seguridad ha evolucionado desde estrategias para la prevención de accidentes basadas únicamente en la protección de los trabajadores; hasta un enfoque basado en la prevención de riesgos (diseño de las instalaciones, condiciones de operación óptimas, etc.), para disminuir el riesgo de un posible accidente. [33]

En concreto en la industria química, los procesos de fabricación en plantas químicas son especialmente peligrosos. No sólo están presentes peligros propios de toda planta de fabricación (p.ej. peligros mecánicos que puedan provocar lesiones sobre los trabajadores), sino que surgen otros peligros adicionales: aquellos derivados del uso, almacenaje y manipulación de los productos químicos utilizados en el proceso o las propias condiciones de operación (Altas presiones, química más complicada, etc.). [95]

Con el objetivo de adoptar todas las medidas necesarias para garantizar la seguridad y reducir al mínimo todos los riesgos posibles, en este apartado se llevará a cabo un estudio de seguridad dividido en puntos clave explicados a continuación.

Para tener en cuenta los *Compuestos X* presentes en el sistema, se considera la acetovainillona como compuesto representativo de dicho grupo.

Esta suposición se realiza en base a lo indicado en el apartado 9.1.3 *Compuestos equivalentes (X) y justificación*. de la memoria descriptiva, al ser uno de los compuestos en mayor proporción dentro de los *Compuestos X*.

11.2. **Ámbito jurídico: Normativa actual**

Se presenta la legislación aplicable sobre las instalaciones en medida de seguridad industrial y prevención; recogida en los Real Decreto y Reglamentos.

- El Real Decreto 656/2017 del 23 de junio (BOE-A-2017-8755), a través del cual se aprueba el Reglamento de Almacenamiento de Productos Químicos y sus Instrucciones Técnicas Complementarias MIE APQ 0 a 10.
- El Real Decreto 840/2015 del 21 de septiembre (BOE-A-2015-11268), por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas. También se conoce como Seveso III.
- El Real Decreto 108/2016 del 18 de marzo (BOE-A-2016-2827), por el que se establecen los requisitos esenciales de seguridad para la comercialización de los recipientes a presión simples.
- El Real Decreto 2060/2008 del 12 de diciembre (BOE-A-2009-1964), por el que se aprueba el Reglamento de equipos a presión y sus instrucciones técnicas complementarias.
- El Real Decreto 709/2015 del 24 de julio (BOE-A-2015-9527), por el que se establecen los requisitos esenciales de seguridad para la comercialización de los equipos a presión.
- El Real Decreto 513/2017, de 22 de mayo (BOE-A-2017-6606), por el que se aprueba el Reglamento de instalaciones de protección contra incendios.
- El 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, y por el que se modifican y derogan las Directivas 67/548/CEE y 1999/45/CE y se modifica el Reglamento (CE) n° 1907/2006.
- El Reglamento (CE) n° 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 las 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) n° 793/93 del Consejo y el Reglamento (CE) n° 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/CE y 2000/21/CE de la Comisión.

11.3. Inventario de sustancias

Se elabora un inventario con las sustancias presentes en el proceso de obtención de vainillina. Para ello, se hace uso de las fichas de datos seguridad de cada sustancia. Estas deben estar elaboradas en base a lo indicado en el Anexo II del Reglamento (CE) n° 1907/2006 (también conocido como Reglamento REACH).

Las fichas de seguridad deben estar divididas en dieciséis secciones de conformidad con el artículo 31, apartado 6. La sección 2 se corresponde con la Identificación de los peligros que presenta la sustancia o la mezcla, así como la información cautelar adecuada asociada a esos peligros. En este proyecto las fichas de seguridad se pueden encontrar en el Archivo II, *Anexo V*. [96]

En la *Tabla 25*, se recogen las propiedades más importantes para la seguridad de la planta, para cada uno de los compuestos. Previamente, para la total comprensión de los datos presentados, se introduce una breve definición de dichas propiedades en base a la bibliografía. [95] [97]

- Punto de inflamabilidad (“Punto Flash”): Temperatura mínima a la cual una sustancia emana suficiente vapor para formar una mezcla susceptible de ser inflamable en el aire. A dicha temperatura y en presencia de una fuente de ignición, el vapor se inflama, pero de forma momentánea. De forma general el punto flash aumenta con la presión.
- Temperatura de autoignición: Temperatura mínima por encima de la cual, un elemento arde espontáneamente y de manera autosostenida en contacto con el aire sin necesidad de una fuente de ignición exterior.
- Límites de inflamabilidad: Mezclas vapor-aire que entran en ignición únicamente dentro de unos rangos de composición determinados. Es decir, establecen la concentración más baja (Límite inferior) y más alta (Límite superior) de concentración de vapor o gas (% volumen) en el aire, que provoca un incendio flash en presencia de una fuente de ignición.

Tabla 25: Propiedades relativas a la seguridad para el inventario de sustancias. Fuente: Elaboración propia a partir de [Fichas de seguridad de cada compuesto].

Compuesto	Punto de inflamabilidad (°C)	Temperatura de autoignición (°C)	Límite inferior (vol%)	Límite superior (vol%)
Lignina	-	-	-	-
Oxígeno	Líquido	<i>No inflamable</i>	<i>No inflamable</i>	<i>No inflamable</i>
NaOH	-	-	-	-
Agua	No inflamable	-	-	-
Nitrógeno	-	-	-	-
Vainillina	159,8 – 160,8	>400	-	-
Ácido Vainillínico	-	-	-	-
Siringaldehído	-	-	-	-
Acetovainillona	-	-	-	-
Etanol	12	455	3,1	27,7
Amoníaco	-	-	-	-

La mayoría de los compuestos presentes en el proceso no disponen de datos disponibles. Esto puede dar pie a deducir que no tiene gran interés determinar estos valores al tratarse de sustancias poco reactivas o peligrosas. Únicamente en el caso del etanol sí que es necesario tener en cuenta su posible peligrosidad.

11.4. Clasificación de acuerdo con el Reglamento CLP

El Reglamento (CE) nº 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008, sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas; es conocido como Reglamento CLP (“*Classification, Labelling and Packaging*”). El Reglamento CLP presenta como características generales un nuevo sistema de clasificación de la peligrosidad de las sustancias y de las mezclas de sustancias. También especifica como se debe ser el correcto etiquetado de los envases en los que se comercializan las sustancias. [98]

Los peligros asociados a cada una de las sustancias se dividen en tres grandes grupos: Peligros físicos, peligros para la salud y peligros para el medio ambiente. Este documento también recoge los pictogramas usados para recoger gráficamente la información sobre el peligro en cuestión. Por último, cada uno de los peligros lleva asociada una indicación de peligro, describiendo la naturaleza de este. [98]







En la *Tabla 26*, se recogen las frases H (frases de peligro) de este proceso junto con su indicación de peligro correspondiente.







Tabla 26: Leyenda con las frases y sus correspondientes indicaciones de peligro. Fuente: Elaboración propia. a partir de [98]

Frase	Indicación de peligro
H225	Líquido y vapores muy inflamables
H270	Puede provocar o agravar un incendio; comburente
H280	Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento.
H290	Puede ser corrosivo para los metales
H302	Nocivo en caso de ingestión
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
H335	Puede irritar las vías respiratorias

En la *Tabla 27* se realiza la clasificación de las sustancias recogidas en el inventario de sustancias de acuerdo con las categorías de peligro en las que están incluidas. Se proporciona el pictograma que debe llevar la etiqueta del envase para su comercialización.

Tabla 27: Clasificación de acuerdo con el Reglamento CLP. Fuente: Elaboración propia a partir de [Fichas de seguridad de cada compuesto]

Sustancia (CAS)	Clase de peligro	Categoría de peligro	Frase	Pictograma
Lignina (8068-05-1)	No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008			
Oxígeno (7782-44-7)	Gases Comburentes	1	H270	
	Gases a presión	4	H280	
NaOH (1310-73-2)	Corrosivos para los metales	1	H290	
	Corrosión cutánea	1A	H314	
	Lesiones oculares graves	1	H318	
Agua (7732-18-5)	No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008			
Nitrógeno (7727-37-9)	Gases a presión	(Gas comprimido)	H280	
Vainillina (121-33-5)	Irritación ocular	2	H319	

Sustancia (CAS)	Clase de peligro	Categoría de peligro	Frase	Pictograma
Ácido Vainillínico (121-34-6)	No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008			
	Toxicidad agua, Oral	4	H302	
Siringaldehído (134-96-3)	Irritación cutánea	2	H315	
	Irritación ocular	2	H319	
	Toxicidad específica -exposición única	3	H335	
Acetovainillona	Irritación cutánea	2	H315	
	Irritación ocular	2	H319	
	Toxicidad específica -exposición única	3	H335	
Etanol	Líquidos inflamables	2	H225	
	Lesiones oculares graves o irritación ocular	1	H318	
Amoníaco	Corrosión o irritación cutáneas	1B	H314	
	Lesiones oculares graves	1	H318	
	Toxicidad específica -exposición única	3	H335	

Bibliografía de los símbolos: [99]

11.5. Clasificación de la instalación según la Normativa Seveso.

La clasificación de la instalación se hace en función del Real Decreto 840/2015 del 21 de septiembre (BOE-A-2015-11268), por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas. También conocido como Seveso III. El Anexo I parte 1 de esta norma establece la definición de categorías y cantidades umbrales, dividiendo las instalaciones en nivel superior y nivel inferior. El Anexo II da un listado con sustancias nominadas con cantidades umbrales específicas. [100]

- 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. (BOE-A-2015-11268)
- 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. (BOE-A-2015-11268).

Para realizar la clasificación se siguen los siguientes pasos:

Se comprueba en el Anexo I parte I, con la clasificación CLP, si cada una de las sustancias está afectada por la normativa Seveso. En la parte II del mismo anexo se comprueba si la sustancia está nominada. En el caso de que sí, se toman los umbrales establecidos en el anexo I parte II mientras que si no está nominada se toman los del Anexo I parte I.

A continuación, se determina la afectación del establecimiento para la cual se tiene en cuenta la cantidad almacenada de cada sustancia y los valores de los umbrales seleccionados anteriormente:

- Una de las sustancias supere el valor del umbral superior: se clasifica la instalación como un establecimiento de nivel superior.

- No se supera el umbral superior, pero si el inferior por parte de alguna sustancia: Se realiza la regla de la suma con los umbrales superiores para cada uno de los peligros (H, P, E). Si la regla de la suma es superior a 1 el establecimiento pasa a ser de nivel superior. Si el valor es inferior, la afectación es de nivel inferior.

- No se supera el umbral inferior: Se aplica la regla de la suma para umbrales inferiores. Si el valor obtenido es superior a 1, el establecimiento es de nivel inferior; si es inferior a 1, no está afectado por Seveso.

Se considera el almacenamiento de las materias primas durante un periodo de tres días y para los compuestos: lignina, NaOH, etanol, amoníaco, agua. Los resultados se presentan en la *Tabla 28*.

Tabla 28. Clasificación de cada sustancia según la normativa SEVESO. Fuente: [Elaboración propia]

	Almacenamiento (ton)	Clasificación seveso	H	P	E	O	Nominado (anexo I parte II)	Columna 2	Columna 3	Aplica
Lignina	121,12	No presenta	-	-	-	-	-	-	-	-
NaOH (50%)	218,71	No presenta	-	-	-	-	-	-	-	-
Agua	1253,48	No presenta	-	-	-	-	-	-	-	-
Etanol (20%)	1241,41	P5a	-	X	-	-	NO	10	50	Nivel superior
Amoniaco	122,57	No presenta	-	-	-	-	-	-	-	-

Como el etanol no se encuentra en la lista de sustancias en la parte II del Anexo I, se toman como umbral inferior y superior las columnas 2 y 3 de la parte I de dicho anexo. El almacenamiento de etanol se encuentra por encima del umbral superior (columna 3). Por lo tanto, la instalación se clasifica como establecimiento de nivel superior de acuerdo con la normativa Seveso III. Esto implica el cumplimiento de lo establecido en el Real Decreto 840/2015 y presentar toda la documentación e información detalladas en el Anexo III del mismo.

11.6. Clasificación NFPA de las sustancias.

La Asociación Nacional de Protección contra Incendios (en inglés: *The National Fire Protection Association, NFPA*), es una organización global fundada en 1896 cuyo objetivo es eliminar las muertes, lesiones y pérdidas económicas provocadas por los incendios y peligros eléctricos y relacionados. [101]

Dentro de los aproximadamente 300 códigos y normas de consenso, investigación, capacitación, etc. que proporciona la NFPA, se hará uso de la norma NFPA 704, para la identificación de peligros en sustancias. Se trata de un sistema sencillo en el cual a cada sustancia se le identifican cuatro tipos de peligros: A cada peligro se le asigna un color, y se escala cada color en función de la gravedad del peligro. [101]

Para la identificación de los peligros se hace uso de una figura en forma de rombo denominado diamante de fuego (*Diamond Fire*). Está dividido en cuatro partes con cuatro colores distintos tal y como se puede observar en la *Figura 37*.





Figura 37: Diamante de fuego norma NFPA 704. Fuente: [102]

El rojo se corresponde con los riesgos de inflamabilidad, el azul con los peligros para la salud, el amarillo con los riesgos de reactividad y el blanco está destinado a riesgos específicos. Cada uno de los colores se divide en cuatro niveles en función de la gravedad. [101]

Se proporciona la clasificación NFPA para cada una de las sustancias presentes en el proceso de producción de vainillina en la *Tabla 29*.

Tabla 29: Clasificación NFPA 704 de las sustancias del proceso. Fuente: [103] [104]

Sustancia (CAS)	Clasificación NFPA 704
Lignina (8068-05-1)	No presenta
Oxígeno (7782-44-7)	
NaOH (1310-73-2)	
Agua (7732-18-5)	No presenta
Nitrógeno (7727-37-9)	No presenta
Vainillina (121-33-5)	No presenta
Ácido Vainillínico (121-34-6)	
Siringaldehído (134-96-3)	No presenta
Acetovainillona (498-02-2)	

Sustancia (CAS)	Clasificación NFPA 704
Amoniaco (7664-41-7)	
Etanol (64-17-5)	




11.7. Estudio de reactividad química descontrolada.

Uno de los factores clave a analizar en el estudio de seguridad del proceso es la propia química del proceso. Esto se debe a que en el proceso pueden entrar en contacto elementos químicos que, debido a su reactividad, deriven en una reacción descontrolada. Esto puede hacer aumentar en gran medida condiciones como presión y temperatura y provocar un posible accidente o explosión. Se trata así, de un elemento clave para poder determinar los riesgos y peligros del proceso.

11.7.1. Matriz de compatibilidad química

La Matriz de Compatibilidad proporciona una descripción general de las reactividades entre todos los posibles pares de sustancias en el caso de que entren en contacto. Esto permite llevar a cabo un estudio de la reactividad química descontrolada, aunque no aporta información en el caso de que entren en contacto más de dos sustancias al mismo tiempo. A continuación, en la *Tabla 30*, la leyenda permite la comprensión de la información que aporta la matriz.

Tabla 30: Leyenda de la matriz de compatibilidad química. Fuente: [Elaboración propia]

Símbolo	Significado
	Incompatible: Es probable y se esperan que ocurran problemas de reactividad peligrosos.
	Precaución: Pueden ocurrir problemas de reactividad en ciertas condiciones
	Compatible: Las sustancias son compatibles

Dentro de la base de datos del software utilizado, no están recogidos los siguientes compuestos, por lo que no aparecen en la matriz: Lignina, ácido vainillínico, siringaldehído, acetovainillona. No se dispone del software original CRW4 (*Chemical Reactivity Worksheet*) ya que, a pesar de haber sido solicitado en varias ocasiones, no se ha recibido respuesta para su descarga en el destino web correspondiente. (se trata de un software gratuito). Es por este motivo que no se pudo crear hoja de datos de los compuestos no identificados, ya que la versión web no dispone de este servicio. Se presenta la matriz de compatibilidad química de los compuestos del proceso *Tabla 31*.

Tabla 31. Matriz de compatibilidad química del proceso. Fuente: [103]

	SODIUM HYDROXIDE SOLUTION				
OXYGEN-NITROGEN GAS MIXTURE	Incompatible ■ Corrosive Generates gas Generates heat Intense or explosive reaction Toxic	OXYGEN-NITROGEN GAS MIXTURE			
VANILLIN	Incompatible ■ Flammable Generates gas Generates heat Intense or explosive reaction Polymerization hazard	Incompatible ■ Explosive Flammable Generates gas Generates heat Intense or explosive reaction Toxic	VANILLIN		
AMMONIA, SOLUTION, WITH MORE THAN 10% BUT NOT MORE THAN 35% AMMONIA	Caution ■ Corrosive Generates gas Generates heat Toxic	Incompatible ■ Corrosive Generates gas Generates heat Intense or explosive reaction Toxic	Caution ■ Generates gas Generates heat	AMMONIA, SOLUTION, WITH MORE THAN 10% BUT NOT MORE THAN 35% AMMONIA	
ETHANOL	Incompatible ■ Flammable Generates gas Generates heat	Incompatible ■ Corrosive Explosive Flammable Generates gas Generates heat Intense or explosive reaction Toxic	Caution ■ Generates heat Intense or explosive reaction	Compatible ■	ETHANOL
WATER	Caution ■ Corrosive Generates gas Generates heat Toxic	Incompatible ■ Corrosive Generates gas Generates heat Toxic	Compatible ■	Caution ■ Generates heat	Compatible ■

Como se puede observar en la *Tabla 31*, hay varias incompatibilidades entre distintos compuestos en el proceso. Se deben tener en cuenta las siguientes incompatibilidades.

- Mezcla oxígeno nitrógeno-Vainillina. El aire (mezcla oxígeno-nitrógeno agrupa la mayoría de las incompatibilidades con los compuestos presentes en el proceso. No obstante, el O₂ entra en contacto directo con la vainillina, en el interior del reactor, provocando su oxidación a ácido vainillínico. Esta reacción es exotérmica con posible generación de gases lo que puede provocar un aumento de la presión y una posible explosión. También está en contacto con NaOH disuelto en agua.

A pesar de estas incompatibilidades, la reacción en el reactor R-101 tiene lugar en la fase líquida; por lo que la cantidad reaccionada del mismo es muy pequeña debido a la baja solubilidad del oxígeno en el medio reaccionante. No obstante, gracias al sistema de refrigeración instalado, se evita que la temperatura aumente, y por consecuencia, la presión en su interior. También otros elementos de seguridad como es el caso de una válvula de alivio garantizan el control de las condiciones de operación como la presión. De esta manera se evitan los daños potenciales de esta reacción.

- Mezcla oxígeno nitrógeno-disolución NaOH. Análogo a lo que sucede en la incompatibilidad anterior, NaOH con una cantidad de oxígeno muy pequeña (únicamente el oxígeno disuelto en el líquido). Del mismo modo que en lo explicado en el párrafo anterior, se controlan los posibles aumentos de presión y T.
- Amoníaco-disolución NaOH. En el proceso de purificación y cristalización, se puede producir un aumento de temperatura ya que en la corriente de entrada pueden aparecer restos de NaOH que, en contacto con la disolución de amoníaco empleada para la precipitación del Siringaldehído, pueden liberar calor.

En cuanto a la incompatibilidad entre etanol y la mezcla de oxígeno y nitrógeno, ambos compuestos se encuentran en diferentes secciones del proceso y nunca entran en contacto. Lo mismo ocurre con la disolución de amoníaco en el precipitador.

El cómputo global establece que se debe llevar a cabo un control de las condiciones de presión y temperatura, sobre todo en el reactor, para evitar que las incompatibilidades entre ciertos compuestos. Así se evita que puedan derivar en reacciones descontroladas, y provocar un hipotético accidente o explosión, lo que causaría daños tanto en los equipos, como en los operarios. Por último, deben ser analizadas las posibles incompatibilidades de los compuestos no disponibles en la base de datos, al igual que las mezclas de más de dos sustancias, las cuales están presentes a lo largo de todo el proceso.

11.8. Distancias de seguridad en la planta

Las distintas secciones en las que se divide la planta de producción de vainillina del presente proyecto deben estar correctamente situadas entre sí para garantizar la máxima seguridad en la planta. Una buena distribución de las áreas y los equipos de la fábrica permite evitar posibles situaciones de riesgo que se puedan originar.

Con el objetivo de limitar la sobrepresión por explosión y los posibles daños por exposición al fuego (explosiones); en este apartado se lleva a cabo el cálculo de las distancias recomendadas entre las distintas áreas y equipos en el proceso. Para ello, se siguen las directrices de distribución y espaciado para instalaciones petroleras y plantas químicas establecidas por el *Global Asset Protection Services (GAPS)* en la guía *GAP.2.5.2*.

En la *Figura 38* y la *Figura 39* se recogen las distancias mínimas recomendadas entre áreas del proceso y equipos del proceso respectivamente. Se basan en los peligros derivados de explosiones en tanques y fuegos.

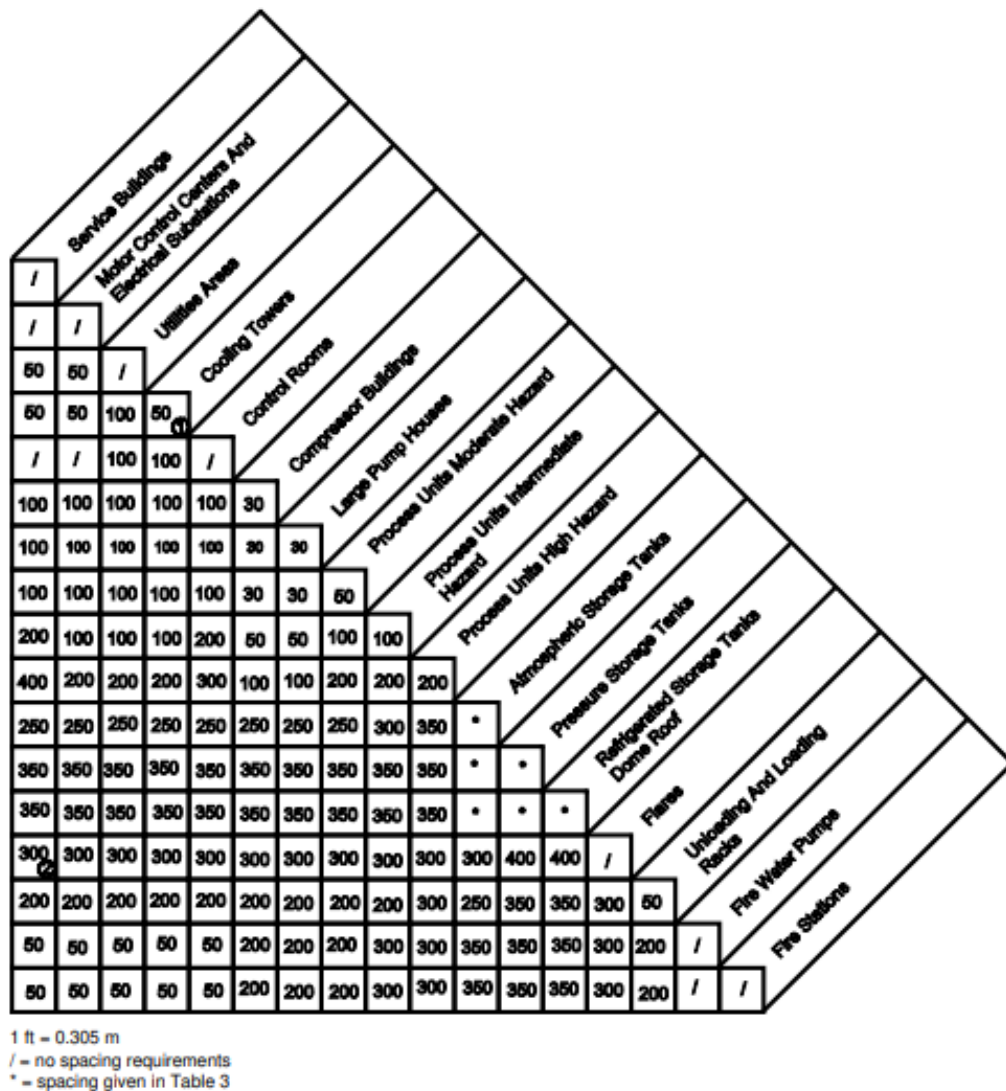


Figura 38: Distancias mínimas recomendadas entre áreas para plantas químicas. Fuente: [105]

En la *Tabla 32* se recogen las distancias mínimas entre las áreas de la planta de producción de vainillina. Se consideran las siguientes áreas:

- A. Área de utilidades.
- B. Edificios de servicios.
- C. Salas de control.
- D. Recipientes a presión atmosférica.
- E. Unidad de proceso de peligrosidad media (Reactor R-101).
- F. Unidad de proceso de peligrosidad baja (Columna de adsorción T-201 y T-202).

Tabla 32. Distancias mínimas (m) entre áreas del proceso. Fuente: [Elaboración propia]

	A	B	C	D	E	F
A						
B	15,25					
C	-	30,5				
D	76,25	76,25	76,25			
E	61	30,5	61	91,5		
F	30,5	30,5	30,5	76,25	30,5	

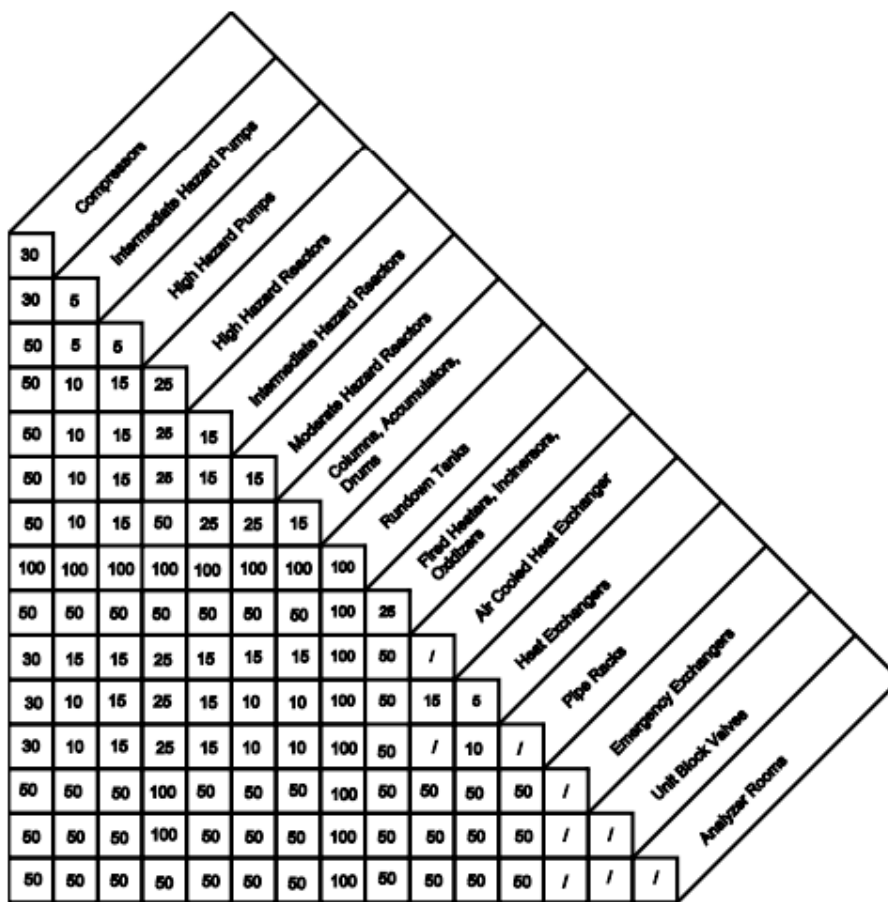


Figura 39: Distancias mínimas recomendadas entre equipos en plantas químicas. Fuente: [105]

En la *Tabla 33* se establecen las distancias entre los distintos equipos. Se consideran los siguientes equipos:

- A. Compresores.
- B. Bombas.
- C. Intercambiadores de calor.
- D. Reactor R-101. (intermediate Hazard reactors).
- E. Columna de adsorción.
- F. Tanques de almacenamiento.

Tabla 33. Distancias mínimas entre los equipos del proceso. Fuente: [Elaboración propia]

	A	B	C	D	E	F
A						
B	9,15					
C	3,05	3,05				
D	15,15	3,05	3,05			
E	15,15	3,05	3,05	7,625		
F	30,5	30,5	30,5	30,5	30,5	

11.9. Índice DOW de incendio y explosión

La DOW'S fire & explosion index hazard classification guide (índice DOW), es una guía de análisis de riesgo en la industria química (desde su primera edición en el año 1964). Proporciona un método para hallar valor relativo de riesgo de las pérdidas de las unidades individuales del proceso a causa de posibles incendios o explosiones; conocido como Índice DOW (F&EI (Fire & Explosion Index)). Es decir, se trata de una herramienta diseñada para para clasificar los peligros relativos con el almacenamiento, manejo y procesado de materiales explosivos e inflamables. [106]

Para el cálculo del índice DOW se debe seguir el proceso descrito en la guía, en la que se determinan los siguientes factores.

- Factor del material (FM). Se define como una medida intrínseca de la potencial liberación de energía de una explosión, a causa de una combustión o una reacción química.
- Riesgos generales del proceso (F1). Factor que tienen una importancia primordial en la determinación de la magnitud de un accidente de fuga.
- Riesgos especiales del proceso (F2). Contribuye principalmente a la probabilidad de que se produzca un incidente de fuga. [106]

Cada factor está dividido en distintas secciones/supuestos con un rango de penalización asociada.

Se debe seleccionar la penalización adecuada considerando las condiciones más peligrosas que pueden dar lugar durante la normal operación del equipo (se tienen en cuenta condiciones de operación, los compuestos implicados...). Hay que considerar que no todos los supuestos tienen por qué aplicar. [106]

11.9.1. Selección de la unidad del proceso pertinente

En un primer lugar, se debe determinar que unidad de todo el proceso debe ser seleccionada para calcular el Índice DOW. El equipo escogido debe ser aquel que pueda impactar el proceso en referencia a la seguridad y a la prevención de riesgos. Atendiendo a estos criterios, se decide determinar el Índice DOW en base al **reactor R-101**. Se trata de la unidad más importante del proceso al mismo tiempo que presenta las condiciones de operación más susceptibles de provocar un accidente. [106]

11.9.2. Factor del material (FM)

En la guía “*Índice de Incendio y Explosión: Guía para la clasificación de Riesgos*” (traducción al castellano del original), en el Apéndice A hay un listado de los factores de material para una serie de compuestos. Para este proyecto, ninguno de los compuestos que intervienen se encuentra en la lista, por lo que se procede a calcular una estimación del factor del material mediante la Tabla 1. Se hace uso de los ratios de inflamabilidad y reactividad para cada sustancia proporcionados por la norma NFPA 704 explicada en el apartado *11.6 Clasificación NFPA de las sustancias*.

En la *Tabla 34* se recogen los factores de inflamabilidad y reactividad para cada sustancia, y el respectivo factor de material para cada una de ellas hallado a partir de la Tabla 1 de la guía.

Tabla 34. Factor del material (FM) para cada una de las sustancias presentes en el reactor. Fuente: Elaboración propia a partir de [106]

Sustancia	N _F	N _R	FM
Lignina, Vainillina, Siringaldehído, H ₂ O	No presenta		-
Ácido Vainillínico	1	1	14
Mezcla O ₂ -N ₂ (aire)	0	0	1
NaOH	0	1	14

De acuerdo con lo indicado en el apéndice B, para mezclas se debe hacer un promedio basado en el porcentaje que representa cada compuesto. Al tratarse de una mezcla reaccionante, se debe seleccionar el compuesto con el FM más alto, siempre que represente más de un 5% de la composición de la mezcla.

Para este proceso el NaOH presenta el de mayor porcentaje en la mezcla, por lo que se selecciona como compuesto base para el FM.

11.9.3. Factor de peligros generales del proceso (F_1)

Se analizan seis factores que pueden contribuir al riesgo y se determina su penalización correspondiente:

- A. Reacciones químicas exotérmicas. La oxidación de lignina a Vainillina y Siringaldehído, junto con la degradación de Vainillina a Ácido Vainillínico, son reacciones exotérmicas que tienen lugar en el reactor por lo que este factor ha de ser tenido en cuenta. La reacción principal es una oxidación por lo que la penalización es de 0,5.
- B. Reacciones endotérmicas. No hay ninguna reacción endotérmica en el reactor R-101 por lo que este factor no aplica.
- C. Manipulación de materiales y transferencia. Dentro del reactor no se opera de forma manual con ninguno de los compuestos. La operación es en estado estacionario, es decir, continuo; por lo que no se producen cargas ni descargas en el reactor. Este factor no aplica penalización.
- D. Unidades de proceso en estancias cerradas o interiores. Se entiende como zona cerrada cualquier área cubierta con tres o más paredes o un área sin techo con muros en todos sus lados. El reactor se encuentra al aire libre por lo que no aplica.
- E. Accesos. Hay disponibles más de dos accesos a la unidad de proceso por lo que no penaliza.
- F. Drenado y control de derrames. En el diseño del reactor R-101 en este proyecto, no se especifica ni se diseña el sistema de drenaje apropiado para la unidad. No obstante, sí que se contempla la necesidad de disponer de un sistema de control de derrames. Aun así, en base a lo indicado en las condiciones del factor, no penaliza.

El valor del factor de riesgos generales del proceso $F_1=1,5$.

11.9.4. Factor de peligros especiales de proceso (F_2)

Se analizan doce factores en los que se consideran las condiciones específicas del proceso que representan por sí mismos una mayor causa de explosión.

- A. Materiales tóxicos. Se multiplica el factor de salud de la clasificación NFPA 704 (N_H) por 0,2. En este caso se trata de una mezcla por lo que se usa el del compuesto que presente el mayor valor. Se trata del NaOH o el O_2 con un valor de 3. Por lo tanto, la penalización es de 0,6.
- B. Presión subatmosférica. La presión de operación es de 10 bar por lo que no aplica penalización.
- C. Operación en el rango o cerca del rango de inflamabilidad. Uno de los reactivos es oxígeno y nitrógeno por lo que siempre se está en presencia de aire. No obstante, no hay datos de los rangos de inflamabilidad de los compuestos que entran al reactor. Como el sistema está dispuesto de una purga para evitar la acumulación de inertes y mantener los rangos de concentración de O_2 constantes en el reactor, se considera una penalización de 0,3 de acuerdo con la bibliografía.

- D. Explosión de polvo. No se trabaja con polvo por lo que no penaliza.
- E. Presión. Se trabaja a presión superior a la atmosférica por lo que se debe aplicar este factor. Se considera presión de tarado de la válvula de alivio situada en el reactor un 5% superior a la presión de operación. Por lo tanto, la presión es de 10,5 bar = 9,5 bar manométricos = 137,79 psig. Se hace uso de la Tabla 2 de la página 23 de la guía en la que se relaciona la presión manométrica de tarado de la válvula de alivio y su penalización (*Figura 40*).

FIGURE 2 - PRESSURE PENALTY FOR FLAMMABLE & COMBUSTIBLE LIQUIDS

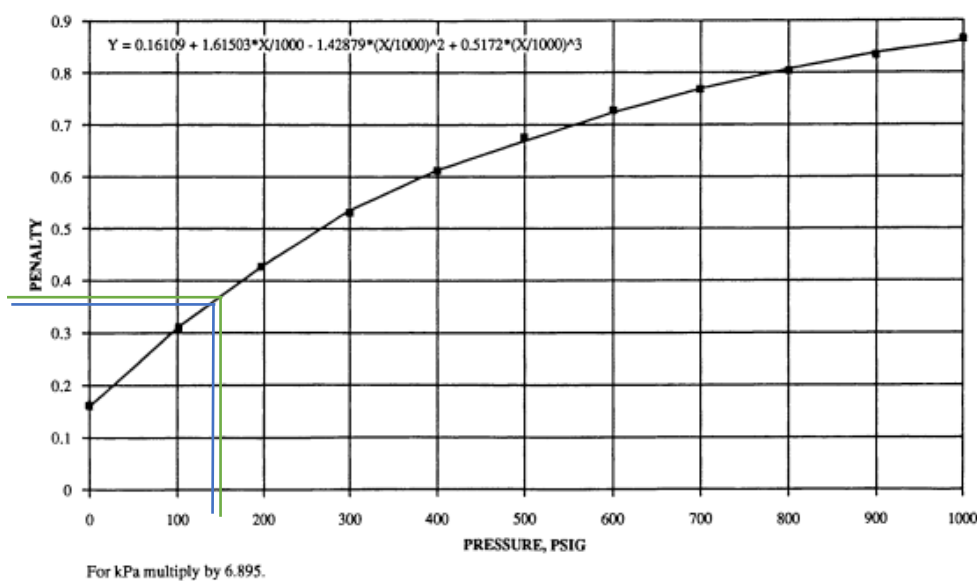


Figura 40. Penalización correspondiente a cada presión manométrica de tarado de la válvula de alivio.
Fuente: [106]

La penalización hallada para la presión manométrica de operación (9 bar = 130,53 psig) es de 0,35. Al operar con gases comprimidos (alimentación de oxígeno y nitrógeno al reactor) se multiplica por 1,2 por lo que se obtiene una penalización de 0,42. Para la presión de alivio se obtiene de la gráfica un valor de 0,37.

Por lo tanto, la penalización final es el resultado de:

$$0,42 \cdot \frac{0,35}{0,37} = 0,4$$

- F. Temperatura baja. Pretende reflejar la posible fragilidad del acero carbono si está expuesto a temperaturas por debajo de su punto de transición. Como no se trabaja a temperaturas bajas no aplica penalización.
- G. Cantidad de material inflamable/inestable. Se penaliza en función de la cantidad de material inflamable expuesta sobre un área adicional. Se divide en tres categorías y la penalización se aplica una única vez para la sección y debe ser basada en el material seleccionado para el FM.

Se escoge la sección de líquidos y gases en el proceso. El material en el que se basa el factor del material, FM es el NaOH en disolución. Se trata de un compuesto no inflamable que no entra en ninguno de los supuestos descritos en la bibliografía, por lo que no aplica penalización.

- H. Corrosión y erosión. Tal y como se contempla en el *Anexo II. Apartado 14. Diseño mecánico del reactor R-101*, se considera el factor de corrosión de 0,4 debido al pH muy básico de la disolución por lo que se le aplica una penalización de 0,2.
- I. Fugas uniones y empaquetaduras. Para el diseño mecánico del reactor se ha considerado un factor de eficacia de soldadura de un 100% por lo que no se pueden producir ningún tipo de fuga. No penaliza.
- J. Equipamiento calefactor. No se usan equipos que aporten calor en el reactor. La reacción es muy exotérmica y necesita refrigeración. No aplica.
- K. Sistemas de intercambio de calor con aceite térmico. No aplica debido a que no se emplea aceite térmico como fluido de intercambio de calor.
- L. Equipos de rotación. No se tiene en cuenta penalización ya que no se emplean este tipo de equipos.

El valor obtenido para los peligros especiales de proceso $F_2=2,5$.

11.9.5. Factor de peligro de la unidad de proceso (F_3)

El factor de riesgo de la unidad del proceso es el resultado del producto del factor de riesgos generales del proceso (F_1) por el factor de riesgos especiales del proceso (F_2). El resultado es de $F_3=3,75$.

11.9.6. Determinación del índice DOW.

El índice DOW (F&EI) es el resultado de multiplicar el factor de peligro de la unidad de proceso (F_3) por el factor del material (FM). En función del valor obtenido, se determina el peligro de la unidad del proceso, en este caso el reactor R-101. Los rangos de peligro establecidos se recogen en la siguiente *Tabla 35*:

Tabla 35. Grado de peligro según el índice de fuego y explosión DOW. Fuente: [106]

Grado de peligro para el índice DOW	
Rango del índice F&EI	Grado de peligro
1-60	Ligero
61-96	Moderado
97-127	Intermedio
128-158	Grave
159-superior	Severo

Se obtiene un valor del **Índice DOW de 52,5** por lo que el peligro para el reactor R-101 es ligero. En la *Tabla 36* se muestra el formulario para el cálculo de los factores de peligro y el índice de incendio y explosión proporcionado por la guía.

Tabla 36. Formulario para el cálculo de los factores de peligro y el índice de incendio y explosión.
Fuente: [106]

AREA / COUNTRY España	LOCATION Polígono industrial de "A Reigosa"	DATE 13/07/2022
SITE Ponte Candelas, Pontevedra, Galicia.	PROCESS UNIT Reactor R-101	SECTION Sección 100
PREPARED BY: Calvo Doce, Martín Iglesias García, Carlos		
MATERIALS IN PROCESS UNIT Lignina, NaOH, O₂, N₂, Vainillina, Siringaldehído, Ácido Vainillínico.		
STATE OF OPERATION Diseño de la planta.	BASIC MATERIAL(S) FOR MATERIAL FACTOR NaOH (Hidróxido de Sodio)	
MATERIAL FACTOR (See Table 1 or Appendices A or B) Note requirements when unit temperature over 140 °F (60 °C)		14
1. General Process Hazards	Penalty Factor Range	Penalty Factor Used(1)
Base Factor	1.00	1
A. Exothermic Chemical Reactions	0.30 to 1.25	0,5
B. Endothermic Processes	0.20 to 0.40	0
C. Material Handling and Transfer	0.25 to 1.05	0
D. Enclosed or Indoor Process Units	0.25 to 0.90	0
E. Access	0.20 to 0.35	0
F. Drainage and Spill Control _____ gal or cu.m.	0.25 to 0.50	0
General Process Hazards Factor (F₁)		1,5
2. Special Process Hazards		
Base Factor	1.00	1
A. Toxic Material(s) [%NH%] 0	0.20 to 0.80	0,6
B. Sub-Atmospheric Pressure (< 500 mm Hg)	0.50	0
C. Operation In or Near Flammable Range <input checked="" type="checkbox"/> Inerted <input type="checkbox"/> Not Inerted		
1. Tank Farms Storage Flammable Liquids	0.50	0
2. Process Upset or Purge Failure	0.30	0,3
3. Always in Flammable Range	0.80	0
D. Dust Explosion (See Table 3)	0.25 to 2.00	0
/ E. Pressure (See Figure 2) Operating Pressure [10] psig or kPa gauge Relief Setting [10,5] psig or kPa gauge		0,4
F. Low Temperature	0.20 to 0.30	0
G. Quantity of Flammable/Unstable Material: Quantity [%SPGQ%] lb or kg H _C = [%SPGHC%] BTU/lb or kcal/kg		0
1. Liquids or Gases in Process		0
2. Liquids or Gases in Storage		No aplica
3. Combustible Solids in Storage, Dust in Process		No aplica
H. Corrosion and Erosion	0.10 to 0.75	0,2
I. Leakage – Joints and Packing	0.10 to 1.50	0
J. Use of Fired Equipment		0
K. Hot Oil Heat Exchange System	0.15 to 1.15	0
L. Rotating Equipment	0.50	0
Special Process Hazards Factor (F₂)		2,5
Process Unit Hazards Factor (F₁ x F₂) = F₃		3,75
Fire and Explosion Index (F₃ x MF = F&EI)		52,5

11.9.7. Factor de daño

El factor de daño representa el efecto global del daño causado por el fuego más el daño por explosión derivado de la fuga de combustible o de la energía reactiva de una unidad del proceso. El factor de daño se determina a partir del factor de peligro de la unidad de proceso (F_3) y del factor del material. Gracias a la *Figura 41*, se puede hallar el factor de daño.

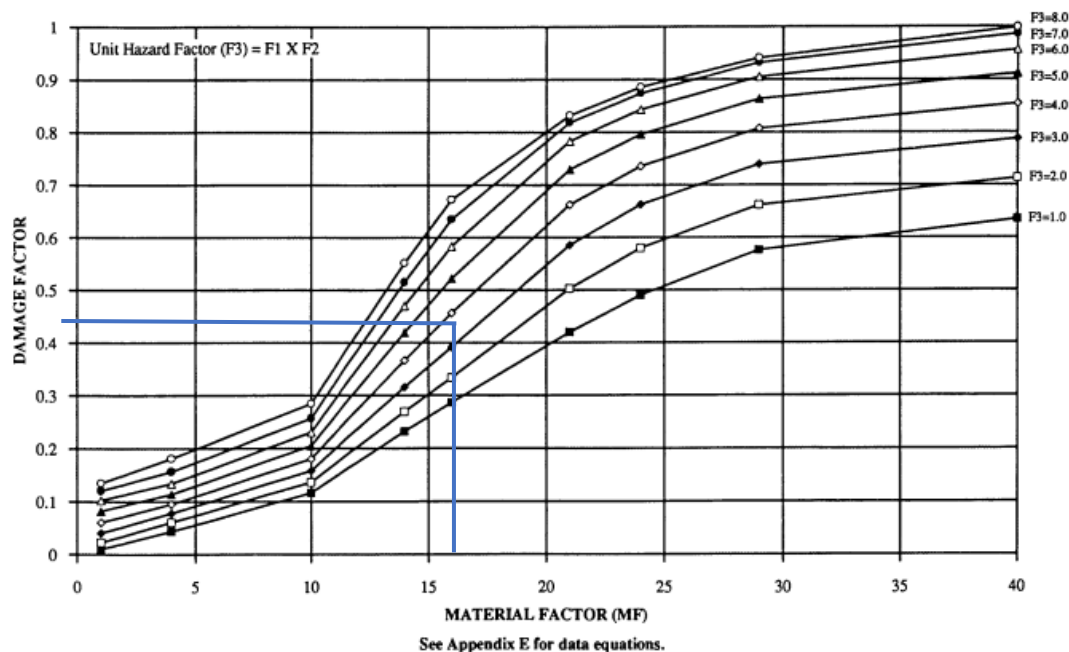


Figura 41. Determinación del factor de daño. Fuente: [106]

Se obtiene un factor de daño para el Reactor R-101 de 0,45, es decir, un **45%**.

11.9.8. Radio de exposición

Gracias a la *Figura 42* y conocido el Índice DOW, se puede determinar el radio de exposición. Este valor permite determinar el área alrededor del equipo que se ve afectada en caso de incendio o explosión. Es decir, cualquier equipo, persona, etc. que se encuentre dentro de dicho radio, puede sufrir las consecuencias (en diferente grado) si se produce un accidente.

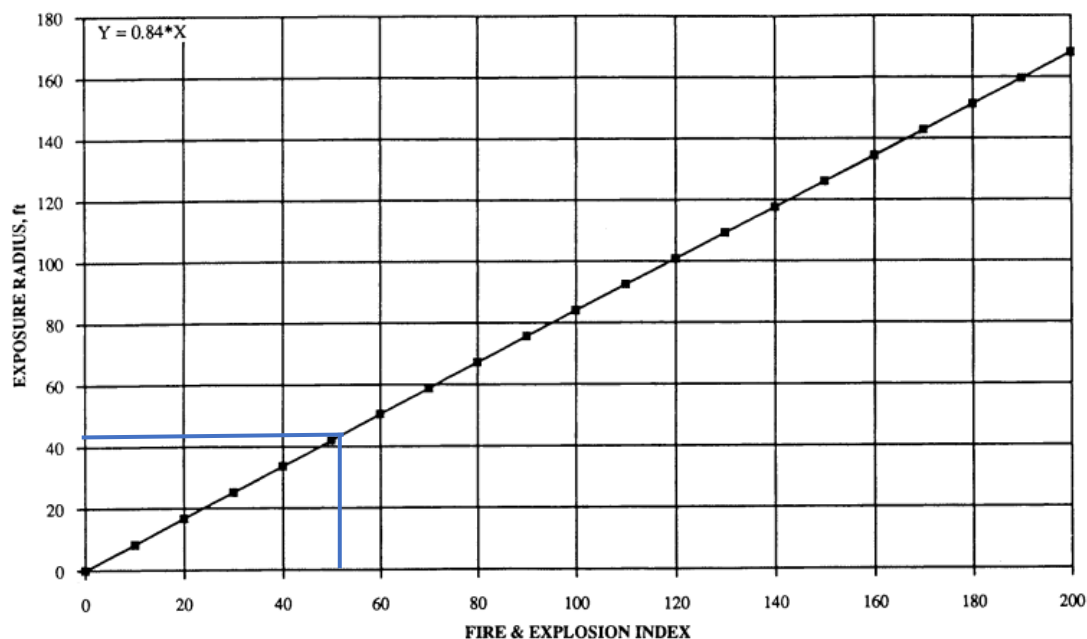


Figura 42. Determinación del radio de exposición. Fuente: [106]

El radio de exposición proporcionado por la gráfica está en pies. Se realiza la conversión a metros multiplicando por 0,3048 tal como indica la bibliografía. Se obtiene un radio de exposición de 42 ft que es equivalente a **12,8 m**.

12. Legislación, normas y códigos de diseño

En el presente apartado se recogen la legislación, las normas y los códigos de diseño a seguir para el desarrollo del diseño de la planta de producción de vainillina a partir de lignina Kraft.

12.1. Legislación general

12.1.1. Área comunitaria

- Reglamento (CE) n° 765/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 9 de julio de 2008, por el que se establecen los requisitos de acreditación y vigilancia del mercado relativos a la comercialización de los productos y por el que se deroga el Reglamento (CEE).
- Directiva 2008/68/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de septiembre de 2008, sobre el transporte terrestre de mercancías peligrosas.

12.1.2. Área nacional

- 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 de 24 de julio de 1889 por el que se publica el Código Civil.

- Real Decreto 314/2006, del 17 de marzo, por el que se aprueba el Código Técnico de la edificación. (B.O.E. 28/3/2006).

12.2. Legislación acerca de la seguridad y de la higiene laboral

12.2.1. Área comunitaria

- 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.
- 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 (refundición).
- Directiva 2003/10/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 6 de febrero de 2003, sobre las disposiciones mínimas de seguridad y de salud relativas a la exposición de los trabajadores a los riesgos derivados de los agentes físicos (ruido).
- Reglamento (CE) n° 1907/2006 del Parlamento Europeo y del Consejo, relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de las sustancias y mezclas químicas (REACH).
- 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 (Directiva Seveso III).
- Directiva 1999/92/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 1999, relativa a las disposiciones mínimas para la mejora de la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores expuestos a los riesgos derivados de atmósferas explosivas.
- Directiva 2006/42/CE del Parlamento Europeo y del Consejo de 17 de mayo de 2006 relativa a las máquinas y por la que se modifica la Directiva 95/16/CE (refundición).
- 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, y por el que se modifican y derogan las Directivas 67/548/CEE y 1999/45/CE y se modifica el Reglamento (CE) n° 1907/2006 (CLP).
- Directiva 92/58/CEE del Consejo, de 24 de junio de 1992, relativa a las disposiciones mínimas en materia de señalización de seguridad y de salud en el trabajo.
- Reglamento (UE) n° 649/2012 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos (PIC).

12.2.2. Área nacional

- Real Decreto 656/2017, de 23 de junio, por el que se aprueba el Reglamento de Almacenamiento de Productos Químicos y sus Instrucciones Técnicas Complementarias MIE APQ 0 a 10.
- Real Decreto 1196/2003, de 19 de septiembre, por el que se aprueba la Directriz básica de protección civil para el control y planificación ante el riesgo de accidentes graves en los que intervienen sustancias peligrosas.
- 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.
- Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en las obras de construcción.
- Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de prevención de Riesgos Laborales.

12.3. Legislación acerca del medio ambiente

12.3.1. Área comunitaria

- Directiva 2014/52/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de abril de 2014, por la que se modifica la Directiva 2011/92/UE, relativa a la evaluación de las repercusiones de determinados proyectos públicos y privados sobre el medio ambiente.
- Directiva 1999/31/CE del Consejo, de 26 de abril de 1999, relativa al vertido de residuos.
- Directiva 2002/49/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 25 de junio de 2002, sobre evaluación y gestión del ruido ambiental.
- Directiva 2001/42/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 27 de junio de 2001, relativa a la evaluación de los efectos de determinados planes y programas en el medio ambiente.
- Decisión 2006/507/CE del Consejo, de 14 de octubre de 2004, relativa a la firma, en nombre de la Comunidad Europea, del Convenio de Estocolmo sobre contaminantes orgánicos persistentes.
- Directiva 2010/75/EU del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de noviembre de 2010, sobre las emisiones industriales (prevención y control integrados de la contaminación).

12.3.2. Área nacional

- Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire y modificado por el Real Decreto 678/2014, de 1 de agosto y posteriormente por el Real Decreto 39/2017, de 27 de enero.

- Real Decreto Legislativo 1/2001, de 20 de julio, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley de Aguas.
- Ley 21/2013, del 9 de noviembre, de evaluación ambiental, tomando en cuenta las modificaciones establecidas en la Ley 9/2018, de 5 de diciembre con las que se transpone la Directiva 2014/52/UE del Parlamento Europeo y del Consejo.
- Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera.
- Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido.

12.3.3. Área autonómica

- Real Decreto 106/2015, de 9 de julio, sobre contaminación acústica de Galicia.
- Real Decreto 37/2014, de 27 de marzo, por el que se declaran zonas especiales de conservación los lugares de importancia comunitaria de Galicia y se aprueba el Plan director de la Red Natura 2000 de Galicia.

12.4. Normas, guías y códigos de diseño

- Código A.S.M.E. (American Society of Mechanical Engineers) BPV.
- Normas DIN (Deutsches Institut für Normung, de Alemania).
- Estándar API 520 (American Petroleum Institut)
- Normativa TEMA (American Tubular Exchanger Manufactures Association) relativa a intercambiadores de calor.
- Normas UNE (Una Norma Española).
- Normas ISO (International Organization of Standarization).
- Estándar ISA (International Standard Atmosphere).
- Norma NFPA 704 (Asociación Nacional de Protección contra el Fuego).
- Normas NBE (Normas Básicas de Edificación).
- Normas NTE (Normas Tecnológicas de Edificación).

En Santiago de Compostela, a día 3 de enero de 2023.

Firman, los autores del proyecto,



Carlos Iglesias García



Martín Calvo Doce

13. Bibliografía

- [1]. Los Procesos Sintéticos hacia Vainillina. *Food Ingredients Brasil*, 2014, no. 31. pp. 80-83. Disponible en: https://revista-fi.com/upload_arquivos/201606/2016060711019001464891186.pdf.
- [2]. *Vainillina, 99 %*, Thermo Scientific&trade. , 2022 [Consulta: 1 Junio, 2022] Disponible en: <https://www.fishersci.es/shop/products/vanillin-99-thermo-scientific/11459103>.
- [3]. *Molécula De Vainillina*. 2022 Disponible en: <https://elements.envato.com/es/vanillin-molecule-W932CK>.
- [4]. National Center for Biotechnology Information. *Vanillin*. 2022 [Consulta: 1 Abril, 2022] Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1183>
- [5]. *Vanillina*. 2022 [Consulta: 3 Abril, 2022] Disponible en: <https://hmong.es/wiki/Vanillin>.
- [6]. KOESTER, Vera. Wilhelm Haarmann (1847 – 1931). *ChemistryViews*, 01-03-2021 [Consulta: 3 Abril, 2022]. Disponible en: https://www.chemistryviews.org/details/ezone/11279757/Wilhelm_Haarmann_1847_1931/. ISSN 2190-3735.
- [7]. BOMGARDNER, Melody M. *El Problema Con La Vainilla*. , 2022 [Consulta: 3 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.scientificamerican.com/espanol/noticias/el-problema-con-la-vainilla/>.
- [8]. BRAVO, Gefersoon; GÓMEZ GARCÍA, Valentinaand BONILLA LEAÑO, Juan Sebastian. Vainillina. *Revista ReCiTeIA*, Enero, 2021, vol. 18, no. 3. pp. 19-36. Disponible en: https://www.researchgate.net/publication/348848794_VAINILLINA.
- [9]. BABÍO NÚÑEZ, Beatriz. Extracción De Vainillina Y Ácido Vanílico Empleando Disolventes Eutécticos Profundos. Universidad Politécnica de Madrid, Junio, 2019. Disponible en: https://oa.upm.es/65458/1/TFM_BEATRIZ_BABIO_NUNEZ.pdf.
- [10]. Los Procesos Sintéticos Hacia Vainillina. *Food Ingredients Brasil*, 2014, no. 31. pp. 80-83. Disponible en: https://revista-fi.com/upload_arquivos/201606/2016060711019001464891186.pdf.
- [11]. SHARMA, Nandini; and SHARMA, Upendra K. A Comprehensive Review on Vanilla Flavor: Extraction, Isolation and Quantification of Vanillin and Others Constituents. *International Journal of Food Sciences and Nutrition*, Octubre, 2007, vol. 59, no. 4. pp. 299-326. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/09687630701539350>.
- [12]. PACHECO ARAÚJO, José D. *Production of Vanillin from Lignin Present in the Kraft Black Liquor of the Pulp and Paper Industry*. Universidade do Porto, Agosto, 2008.

- [13]. Borges da Silva, E. A.; ZABKOVA, M. and ARAÚJO, J. D. An Integrated Process to Produce Vanillin and Lignin-Based Polyurethanes from Kraft Lignin. *Chemical Engineering Research and Design*, Septiembre, 2009, vol. 87, no. 9. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2009.05.008>.
- [14]. CHÁVEZ-SIFONTES, Marvin; and DOMINE, Marcelo E. *Lignina, Estructura Y Aplicaciones: Métodos De Despolimerización Para La Obtención De Derivados Aromáticos De Interés Industrial*. Universidad Politécnica de Valencia, 25 Octubre, 2013.
- [15]. *Lignin, Alkali Lignin, Kraft 8068-05-1*. [Consulta: 13 Abril, 2022] Disponible en: <http://www.sigmaaldrich.com/>.
- [16]. *Vanillin Market Size Worth \$724.5 Million by 2025 | CAGR: 7.0%*. [Consulta 16 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.grandviewresearch.com/press-release/global-vanillin-market>.
- [17]. *Global Vanilla and Vanillin Market Report and Forecast 2022-2027*. [Consulta 16 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.expertmarketresearch.com/reports/vanilla-and-vanillin-market>.
- [18]. KUMAR ESWARAN, Anish. *Fermentation-Derived Vanillin could be a Sustainable Natural Alternative to Synthetic Vanillin*. 8 Mayo, 2017. [Consulta 16 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.beroeinc.com/article/fermentation-derived-vanillin/>.
- [19]. LTD, Research a. M. *Global Vanilla Market - Forecasts from 2020 to 2025*. [Consulta 17 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.researchandmarkets.com/reports/5215209/global-vanilla-market-forecasts-from-2020-to>.
- [20]. *Vanillin Market | 2022 - 27 | Industry Share, Size, Growth - Mordor Intelligence*. [Consultado: 21 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/vanillin-market>.
- [21]. News, Melody M. Bomgardner, Chemical & Engineering. *El Problema Con La Vainilla*. [Consultado: 21 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.scientificamerican.com/espanol/noticias/el-problema-con-la-vainilla/>.
- [22]. WONG, Jason T. *Technological, Commercial, Organizational, and Social Uncertainties of a Novel Process for Vanillin Production from Lignin*. University of British Columbia, 2012. Disponible en: <https://core.ac.uk/download/pdf/56377175.pdf>.
- [23]. BRUNETTI, Lorenza. *Biotechnological Production of Vanillin using Microbial Cells*. UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DELLA TUSCIA DI VITERBO.

- [24]. *Norohy | La Vainilla De La a A La Z: Todo Sobre La Vainilla*. [Consultado: 20 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.norohy.es/erase-una-vez-la-vainilla/>.
- [25]. CIRIMINNA, Rosaria, et al. Vanillin: The Case for Greener Production Driven by Sustainability Megatrend. *ChemistryOpen*, vol. 8, no. 6. Available from <https://doi.org/10.1002/open.201900083>.
- [26]. *Vanillin*. [Consultado: 21 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.berjeinc.com/products/aromatic-chemicals/vanillin/>.
- [27]. FACHE, Maxence; BOUTEVIN, Bernardand CAILLOL, Sylvain. Vanillin Production from Lignin and its use as a Renewable Chemical. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 10 Diciembre, 2015, vol. 4, no. 1. pp. 35–46. Disponible en: <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.5b01344>.
- [28]. DESSBESELL, L., PALEOLOGOU, M., LEITCH, M., PULKKI, R. y XU, C. (Charles), 2020. Global lignin supply overview and kraft lignin potential as an alternative for petroleum-based polymers. Vol. 123. ISSN 1364-0321. DOI 10.1016/j.rser.2020.109768. Disponible en: <https://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2020.109768>.
- [29]. *Lignin Market Size & Share | Industry Report, 2020-2027*. [Consultado: 22 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/lignin-market>.
- [30]. PINTO, P.C.R., COSTA, C.E. y RODRIGUES, A.E., 2013. Oxidation of Lignin from Eucalyptus globulus Pulping Liquors to Produce Syringaldehyde and Vanillin. vol. 52, no. 12, pp. 4421-4428. ISSN 0888-5885. DOI 10.1021/ie303349j. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1021/ie303349j>.
- [31]. WONGTANYAWAT, Nattanan; LUSANANDANA, Possawatand KHWANJAIKUN, Nawaporn. Comparison of Different Kraft Lignin-Based Vanillin Production Processes. *Computers & Chemical Engineering*, 2 Septiembre, 2018, vol. 117. pp. 159-170. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.05.020>.
- [32]. KHWANJAIKUN, Nawaporn; AMORNRAKSA, Suksunand SIMASATITKUL, Lida. Techno-Economic Analysis of Vanillin Production from Kraft Lignin: Feasibility Study of Lignin Valorization. *Bioresource Technology*, Marzo, 2020, vol. 299. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.122559>.
- [33]. SINNOT, Ray; and TOWLER, Gavin. *Diseño En Ingeniería Química*. Quinta ed. Barcelona: Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
- [34]. *Extensión Geográfica De Los Municipios De Pontevedra*. 2008/2020. Disponible en: <https://www.infolaso.com/geografia/114-geografia-de-espana/1190-extension-geografica-de-los-municipios-de-pontevedra.html>.

- [35]. *Habitantes Ponte Caldelas 1900-2021*. 21/07/2022 [Consulta: 12 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.foro-ciudad.com/pontevedra/ponte-caldelas/habitantes.html>.
- [36]. *Ponte Caldelas - ¿Cuántas Empresas Hay En Tu Municipio?* 01/03/2022 Disponible en: <https://www.epdata.es/datos/numero-empresas-municipio-localidad/140/ponte-caldelas/5661>.
- [37]. Alyssalover. *Situación Ponte Caldelas*, 2005. Disponible en: https://es.m.wikipedia.org/wiki/Archivo:Situacion_Ponte_Caldelas.PNG.
- [38]. *XESGTIÓN DO SOLO DE GALICIA-XESTUR, S.A - Ficha Parque Empresarial*. 25/07/2022 Disponible en: https://www.xesturgalicia.com/index.php?seccion=solo_empresarial&opcion=fichape&id=308.
- [39]. Google Maps. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <https://www.google.es/maps/>.
- [40]. LA VOZ. *Rebaja En El Precio Del Suelo Del Polígono De A Reigosa, En Ponte Caldelas*. 02-12-2020 [Consulta: 14 Abril, 2022] Disponible en: https://www.lavozdegalicia.es/noticia/pontevedra/pontecaldelas/2020/02/12/rebaja-precio-suelo-poligono-reigosa-ponte-caldelas/0003_202002P12C7998.htm.
- [41]. *Polígono Industrial De A Reigosa, Pontecaldelas | Información*. 10-25-2013 [Consulta: 15 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.ingestin.com/poligono-industrial-de-a-reigosa-pontecaldelas/>.
- [42]. *El Mapa Ferroviario (Actualizado) De Galicia*, 2022 [Consulta: 16 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.riasbaixatribuna.com/2021/01/23012021-el-mapa-ferroviario.html>.
- [43]. *Puerto De Marín*. [Consulta: 16 Abril, 2022] Disponible en: <https://guias.masmar.net/index.php/Puertos/Pontevedra-%7C-Galicia/Puerto-de-Mar%C3%ADn>.
- [44]. *Historia - APMARIN*. Aaccentia Multimedia SL [Consulta: 17 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.apmarin.com/es/paginas/historia>.
- [45]. *Los Polígonos Industriales De La Provinciales Estarán a Todo Gas Antes De 2020*. [Consulta: 17 Abril, 2022] Disponible en: <https://pontevedraviva.com/xeral/24354/poligonos-industriales-provincia-estaran-a-todo-gas-antes-2020-pontevedra/>.
- [46]. *Presentación-Viaqua*. [Consulta: 18 Abril] Disponible en: <https://www.viaqua.gal/presentacion>.
- [47]. *Habitantes Ponte Caldelas 1900-2021*. 21/07/2022 [Consulta: 18 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.foro-ciudad.com/pontevedra/ponte-caldelas/habitantes.html>.

- [48]. *El Clima En Ponte Caldelas, El Tiempo Por Mes, Temperatura Promedio (España)* - Weather Spark. [Consulta: 19 Abril, 2022] Disponible en: <https://es.weatherspark.com/y/32578/Clima-promedio-en-Ponte-Caldelas-Espa%C3%B1a-durante-todo-el-a%C3%B1o>.
- [49]. *El Riesgo Más Alto De Terremoto En Galicia Se Da En 282 Parroquias De Lugo Y Ourense*. 08-23-2018 [Consulta: 19 Abril, 2022] Disponible en: https://www.lavozdeg Galicia.es/noticia/galicia/2018/08/23/riesgo-alto-terremoto-galicia-da-282-parroquias-lugo-ourense/0003_201808G23P4991.htm.
- [50]. BRYAN, C. C.; Seattleand Wash. *Manufacture of Wanillin from Lignin*. EE.UU.: 19 Octubre, 1954.
- [51]. GOMES, E. D.; and RODRIGUES, A. E. Lignin Biorefinery: Separation of Vanillin, Vanillic Acid and Acetovanillone by Adsorption. *Separation and Purification Technology*, 1 Junio, 2019, vol. 216. pp. 92-101. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.01.071>.
- [52]. TARABANKO, V. E., et al. Separation of Vanillin and Syringaldehyde Produced from Lignins. *Separation Science and Technology*, 2 Enero, 2013, vol. 48, no. 1. pp. 127-132. Available from <https://doi.org/10.1080/01496395.2012.673671>.
- [53]. *Gestión De Residuos*. [Consulta: 30 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.sertego.com/>.
- [54]. *Gestión De Residuos en Pontevedra*. 2022 [Consulta: 30 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.ambiteco.es/gestion-residuos-pontevedra.html>.
- [55]. *Habitantes Vigo 1900-2021*. 21/07/2022 [Consulta: 30 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.foro-ciudad.com/pontevedra/vigo/habitantes.html>.
- [56]. *Habitantes Pontevedra 1900-2021*. 21/07/2022 [Consulta: 30 Abril, 2022] Disponible en: <https://www.foro-ciudad.com/pontevedra/pontevedra/habitantes.html>.
- [57]. Syringaldehyde | 134-96-3. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: https://www.chemicalbook.com/ChemicalProductProperty_EN_CB7405808.htm.
- [58]. Syringaldehyde. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <https://www.chembk.com/en/chem/Syringaldehyde>.
- [59]. Showing metabocard for Vanillic acid (HMDB0000484). Disponible en: <https://hmdb.ca/metabolites/HMDB0000484>.
- [60]. DHANANJAYA, B.L., NATARAJU, A., RAJESH, R., RAGHAVENDRA GOWDA, C.D., SHARATH, B.K., VISHWANATH, B.S. y D'SOUZA, C.J.M., 2006. Anticoagulant effect of Naja naja venom 5'nucleotidase: Demonstration through the use of novel specific inhibitor, vanillic acid. Vol. 48, no. 4, pp. 411-421. ISSN 0041-0101.

- DOI 10.1016/j.toxicon.2006.06.017. Disponible en:
<https://dx.doi.org/10.1016/j.toxicon.2006.06.017>
- [61]. 4-Hydroxy-3-methoxybenzoic acid. Disponible en:
<https://www.chembk.com/en/chem/4-Hydroxy-3-methoxybenzoic%20acid.>
- [62]. *Estructura Fenol.* Disponible en:
https://th.bing.com/th/id/R.bb08e0b13d5ced613681f3a0ad1b8a6a?rik=bQmqPKFroMNBxg&riu=http%3a%2f%2fwww.vitrilab.pt%2fwebimage%2fFenol_Fenol_Quimicos_.jpg&ehk=ncH12s%2f%2fdSYEc8zZvitSWB0YLFEmi6u0xSCWjgRQEyE%3d&risl=&pid=ImgRaw&r=0&sres=1&sresct=1.
- [63]. *Estructura Acido Benzoico.* Disponible en:
https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/a/a2/Benzoic_acid.svg/200px-Benzoic_acid.svg.png.
- [64]. *Estructura Ácido Hidroxibenzoico.* Disponible en:
https://file.medchemexpress.com/product_pic/hy-y0264.gif.
- [65]. *Estructura Catecol.* Disponible en:
<https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/e/ed/Brenzcatechin.svg/129px-Brenzcatechin.svg.png.>
- [66]. *Estructura Syringol.* Disponible en:
<https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/4/4e/Syringol.png/800px-Syringol.png.>
- [67]. *Estructura Dehidrovainillina.* Disponible en:
<https://www.musechem.com/uploads/structure/2092-49-1.gif.>
- [68]. KURT, Cetin; and BITTNER, Jürgen. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry John Wiley & Sons, Ltd, 2006. *Sodium Hydroxide*. ISBN 9783527306732. Disponible en:
https://onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1002/14356007.a24_345.pub2
- [69]. *Hidróxido De Sodio*, pp. 263-276. Disponible en:
<http://documentacion.ideam.gov.co/openbiblio/bvirtual/018903/Links/Guia17.pdf>
- [70]. ALERTS, I. Ammonium Hydroxide Prices - Historical & Forecast Data in Several Countries. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <https://www.intratec.us/chemical-markets/ammonium-hydroxide-price.>
- [71]. National Center for Biotechnology Information. *Oxygen*. 2022 [Consulta: 17 Mayo, 2022] Disponible en:
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/977#section=Related-Records.>

- [72]. BRENES-ESQUIVEL, Roberto and ROJAS-SOLANO, Luis Francisco. El Agua: Sus Propiedades Y Su Importancia Biológica. *Acta Académica*, Noviembre, 2005, vol. 37 [Consulta: 18 Mayo, 2022]. pp. 167-196. Disponible en: <http://revista.uaca.ac.cr/index.php/actas/article/view/407>. ISSN 2215-583X.
- [73]. *Propiedades Del Agua*. [Consulta: 19 Mayo, 2022] Disponible en: <https://agua.org.mx/propiedades-derl-agua/>.
- [74]. National Center for Biotechnology Information. *Water*. 2022 [Consulta: 19 Mayo, 2022] Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/962>.
- [75]. *Water-Physical Properties/Britannica*. [Consulta: 20 Mayo, 2022] Disponible en: <https://www.britannica.com/science/water/Physical-properties>.
- [76]. *Información Técnica Del Agua Desionizada*. 1995-2022 [Consulta: 26 Mayo, 2022] Disponible en: [:https://www.cosmos.com.mx/wiki/agua-desionizada-4jng.html](https://www.cosmos.com.mx/wiki/agua-desionizada-4jng.html).
- [77]. ALFARO SANTAMARÍA, Kattia. *Evaluación Del Proceso Tecnológico De Producción De Agua Desionizada Y El Procedimiento Para La Regeneración De Las Resinas De Intercambio En Una Empresa Agroindustrial*. Universidad de Costa Rica.
- [78]. *Estándares Para La Calidad Del Agua/Agua Pura/Wasserlab*. [Consulta: 26 Mayo, 2022] Disponible en: <https://www.wasserlab.com/es/agua-pura/estandares-para-la-calidad-del-agua>.
- [79]. KOSARIC, Naim, et al. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry* John Wiley & Sons, Ltd, 2011 [Consulta: 28 Mayo, 2022]. *Ethanol*, pp. 1-72. Disponible en: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/14356007.a09_587.pub2. ISBN: 9783527306732.
- [80]. *Spain Ethanol Prices, 18-Jul-2022*. 2022 [Consulta: 28 Mayo, 2022] Disponible en: https://www.globalpetrolprices.com/Spain/ethanol_prices/.
- [81]. National Center for Biotechnology Information. *Ethanol*. 2022 [Consulta: 28 Mayo, 2022] Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/702#section=Melting-Point>.
- [82]. *Factory Price Ethanol High Quality 96%*. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <https://qiaotuchem.en.made-in-china.com/product/kwFaMgJcgGTz/China-Factory-Price-Ethanol-High-Quality-70-75-95-96-99-6-99-9-.html>.
- [83]. *Ammonia Solution, 20%, Certified AR for Analysis*. 2022 [Consulta: 28 Mayo, 2022] Disponible en: <https://www.fishersci.es/shop/products/ammonia-solution-20-certified-ar-analysis-d-0-92-2/p-7072803>.

- [84]. FARGUES, C., MATHIAS, Á. y RODRIGUES, A., 1996. Kinetics of Vanillin Production from Kraft Lignin Oxidation. Vol. 35, no. 1. [Consulta: 28 enero 2023]. ISSN 0888-5885. DOI 10.1021/ie950267k. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1021/ie950267k>.
- [85]. Esteves da Costa, Carina Andreia. *Vanillin and Syringaldehyde from Side Streams of Pulp and Paper Industries and Biorefineries*. Universidade do Porto, Marzo, 2017.
- [86]. ARAÚJO, J.D.P., GRANDE, C.A. y RODRIGUES, A.E., 2010. Vanillin production from lignin oxidation in a batch reactor. Vol 88, no. 8, pp. 1024-1032. [Consulta: 12 diciembre 2022]. ISSN 0263-8762. DOI 10.1016/j.cherd.2010.01.021. Disponible en: <https://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2010.01.021>.
- [87]. MICARI, Marina; and AGRAWAL, Kumar Varoon. Oxygen Enrichment of Air: Performance Guidelines for Membranes Based on Techno-Economic Assessment. *Journal of Membrane Science*, Enero, 2022, vol. 641, no. 1. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2021.119883>.
- [88]. MOTA, M.I.F., PINTO, P.C.R., LOUREIRO, J.M. y RODRIGUES, A.E., 2015. Recovery of Vanillin and Syringaldehyde from Lignin Oxidation: A Review of Separation and Purification Processes. ISSN 1542-2119. DOI 10.1080/15422119.2015.1070178. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1080/15422119.2015.1070178>.
- [89]. SD Series Spray Dryer. Disponible en: <https://kedagroup.com/index.php?m=content&c=index&a=lists&catid=161&details=0>.
- [90]. OLLERO DE CASTRO, Pedro; and FERNÁNDEZ CAMACHO, Eduardo. *Control E Instrumentación De Procesos Químicos*. España: EDITORIAL SINTESIS, 2006. ISBN 84-7738-517-3.
- [91]. FERNÁNDEZ PANADERO, J., 2021. Sin feedback no hay paraíso o por qué es tan fácil ser negacionista. [Consulta: 28 enero 2023]. Disponible en: <https://lacienciaparatodos.wordpress.com/2021/11/16/sin-feedback-no-hay-paraiso-o-por-que-es-tan-facil-ser-negacionista/>.
- [92]. KUPHALDT, T.R., 2017. *Lessons In Industrial Instrumentation*. S.l.: Samurai Media Limited. ISBN 978-988-8407-08-8.
- [93]. STANDARD, A.N. *Instrumentation Symbols and Identification*. Norma ANSI/ISA-5.1-2009. 8 septiembre 2009. S.l.: s.n. Disponible en: http://integrated.cc/cse/Instrumentation_Symbols_and_Identification.pdf.
- [94]. P&ID Diagramas de Tuberías e Instrumentación. 2019. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <https://controlreal.com/es/diagramas-de-tuberias-e-instrumentacion-pid/>.

- [95]. CROWL, Daniel A.; and LOUVAR, Joseph F. *Chemical Process Safety*. Segunda ed. New Jersey: Prentice Hall, 16 octubre, 2001. ISBN 0-13-018176-5. Disponible en: [https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=ogdmLGMOOrEMC&oi=fnd&pg=PT3&dq=Crowl,+AND.,+Louvar,+J.:Chemical+Process+Safety.+Fundamentals+with+applications.+Ed.+Pearson+\(2011\).&ots=KVoX4mX0xh&sig=dmfdzqhtU3oeE6QDzHqqJr0ks6w#v=onepage&q&f=false](https://books.google.es/books?hl=es&lr=&id=ogdmLGMOOrEMC&oi=fnd&pg=PT3&dq=Crowl,+AND.,+Louvar,+J.:Chemical+Process+Safety.+Fundamentals+with+applications.+Ed.+Pearson+(2011).&ots=KVoX4mX0xh&sig=dmfdzqhtU3oeE6QDzHqqJr0ks6w#v=onepage&q&f=false).
- [96]. *REGLAMENTO (UE) N O 453/2010 DE LA COMISIÓN De 20 De Mayo De 2010 Por El Que Se Modifica El Reglamento (CE) N O 1907/2006 Del Parlamento Europeo Y Del Consejo, Relativo Al Registro, La Evaluación, La Autorización Y La Restricción De Las Sustancias Y Preparados Químicos (REACH)*, 31 Mayo, 2010.
- [97]. Fuegos y explosiones. Diseño para su prevención. Seguridad e prevención de riesgos. [Consulta: 22 junio 2023]. Disponible en: https://cv.usc.es/pluginfile.php/1417354/mod_resource/content/1/Tema%204.pdf.
- [98]. 1. *REGLAMENTO (CE) no 1272/2008 DEL PARLAMENTO EUROPEO Y DEL CONSEJO De 16 De Diciembre De 2008.* , 31 Diciembre, 2008.
- [99]. Pictogramas CLP - ECHA. [Consulta: 14 Junio, 2022] Disponible en: <https://echa.europa.eu/es/regulations/clp/clp-pictograms>.
- [100]. *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*. Real Decreto, 20 Octubre, 2015. 251.
- [101]. *NFPA Overview*. [Consulta: 15 Junio, 2022] Disponible en: <https://www.nfpa.org/overview>.
- [102]. *Nfpa*. [Consulta: 15 Junio, 2022]. Disponible en: <https://www.gemapro.cl/wp-content/uploads/2019/06/nfpa.png>.
- [103]. Database of Hazardous Materials. [Consulta: 15 Junio, 2022]. Disponible en: <https://cameochemicals.noaa.gov/>.
- [104]. *Ácido Vainillico*. [Consulta: 15 Junio, 2022] Disponible en: https://es.frwiki.wiki/wiki/Acide_vanillique.
- [105]. *Oil and Chemical Plant Layout and Spacing.*, 2015. GAPS Guidelines GAP.2.5.2 A Publication of Global Asset Protection Services LLC OIL AND CHEMICAL PLANT LAYOUT AND SPACING
- [106]. AIChE technical manual American Institute of Chemical Engineers, 1994. *Dow's Fire & Explosion Index Hazard Classification Guide*.

ANEXO I.
BALANCES DE
MATERIA Y
ENERGÍA

ÍNDICE

1	Balances de materia	3
1.1	Introducción	3
1.2	Balance de materia global	3
1.3	Balance de materia a las unidades del proceso	7
1.3.1	Tanque de mezcla TM-101	7
1.3.2	Reactor R-101	7
1.3.3	Filtro F-101 A/B	9
1.3.4	Filtro F-201 A/B	9
1.3.5	Filtro F-202 A/B	10
1.3.6	Tanque de almacenamiento V-201	11
1.3.7	Columnas de adsorción T-201/T-202	11
1.3.8	Tanque de almacenamiento V-202	12
1.3.9	Precipitador PR-201	13
1.3.10	Spray dryer SD-301	13
1.4	Balance de materia en recirculaciones	15
1.4.1	Unión de corrientes 5 y 26	15
1.4.2	Unión de corrientes 14 y 18	15
1.4.3	Unión de corrientes 21 y 24	16
1.5	Balance de materia en la purga	17
2	Balances de energía	17
2.1	Introducción	17
2.2	Intercambiadores de calor	18
2.2.1	Intercambiador de calor E-101	19
2.2.2	Intercambiador de calor E-102	20
2.2.3	Intercambiador de calor E-103	20
2.2.4	Intercambiador de calor E-201	21
2.3	Reactor R-101	22
2.4	Columnas de adsorción T-201 y T-202	23
2.5	Compresores	24
2.5.1	Compresor C-101 A/B	24
2.5.2	Compresor C-102 A/B	25
2.6	Filtro F-101 A/B	26
2.7	Spray dryer SD-301	27
3	Bibliografía	28

1 Balances de materia

1.1 Introducción

Los balances de materia son la base del diseño del proceso. Permiten determinar la cantidad de materias primas necesarias para obtener la cantidad de producto final deseado. Se aplican tanto al proceso global como a cada unidad de proceso, para poder así determinar el flujo necesario con sus respectivas composiciones; parámetros necesarios para un correcto dimensionamiento de cada uno de ellos. [1]

El balance general de materia se basa en la ecuación de conservación de masa por la que se establece que en cualquier proceso (a excepción de los procesos nucleares) la materia ni se genera ni se destruye. Se presenta en la siguiente *Ecuación (1)*. [1]

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación} \quad (1)$$

Es necesario puntualizar que, para operación en estado estacionario, el término de acumulación es nulo. Además, si no existe reacción química, el término de generación desaparece de la ecuación, por lo que el balance de materia se reduce a la siguiente *Ecuación (2)*. [1]

$$\text{Entrada} = \text{Salida} \quad (2)$$

El único equipo en el que está presente una etapa de reacción química es el reactor R-101, en cuya expresión sí que es necesario reflejar el término de generación en el balance de materia, *Ecuación (3)*.

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} \quad (3)$$

En este Anexo se determinan el balance global, a través del cual se comprueba el cumplimiento del Principio de Conservación de la Materia; y los balances a cada una de las unidades en el proceso. No se presenta balance en aquellos equipos en los que se mantienen constantes las composiciones y los caudales de cada compuesto, es decir, en aquellas unidades en las que solo se produzcan cambios en las condiciones de operación, a saber, bombas e intercambiadores de calor.

1.2 Balance de materia global

Se presenta el balance de materia global. Las corrientes de entrada son las siguientes:

- Alimentación de materias primas al sistema:
 - Corriente 1: Entrada de lignina.
 - Corriente 2: Entada de la disolución de NaOH.
 - Corriente 3: Entrada de agua.
- Alimentación fase gas al sistema:
 - Corriente 9: Entada de aire al sistema.

- Etapa de adsorción:
 - Corriente 29: Alimentación de agua desionizada a las columnas de adsorción T-201/T-202.
 - Corriente 31: alimentación de disolución de etanol a las columnas de adsorción T-201/T-202.
- Etapa de purificación
 - Corriente 36: Alimentación de disolución de amoníaco al precipitador PR-201.
 - Corriente 42: Entrada de aire para deshidratación del producto en SD-301.

Las corrientes de salida se corresponden con:

- Corriente 11: Salida de aire enriquecido en nitrógeno del filtro F-101 A/B.
- Corriente 17: Purga de inerte.
- Corriente 33: Salida de residuos de la columna de adsorción T-201/T-202.
- Corriente 37: Salida de siringaldehído.
- Corriente 40: Salida de aire, agua y amoníaco.
- Corriente 41: Salida de vainillina.

En la *Tabla 1* se muestra el balance global en unidades másicas y en la *Tabla 2* se expresa el balance en unidades molares:

Tabla 1: Balance de materia global. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas								Salidas					
	Flujo másico (kg/h)								Flujo másico (kg/h)					
	C. 1	C. 2	C. 3	C. 9	C.29	C.31	C.36	C.42	C.11	C.17	C.33	C.37	C.40	C.41
Lignina	1.557,24	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3,54	-	-	-
NaOH	-	1.518,80	-	-	-	-	-	-	-	-	1.518,80	-	-	-
O ₂	-	-	-	1.523,01	-	-	-	3.032,10	761,51	691,79	-	-	3.032,10	-
N ₂	-	-	-	5.015,51	-	-	-	9.985,30	4.380,61	634,90	-	-	9.985,30	-
H ₂ O	-	1.518,80	17.409,27	-	-	861,36	1.475,92	-	-	-	19.789,43	-	1.475,92	-
Vainillina	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	10,30	0,34	46,97	62,20
Siringaldehído	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2,20	20,98	1,87	0,47
Ac. vainillínico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	59,76	-	-	-
Compuestos X	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.418,35	-	-	-
Etanol	-	-	-	-	-	16.380,45	-	-	-	-	16.380,45	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-	-	21.534,12	-	-	-	-	-	-	-	21.533,65	0,47
NH ₃	-	-	-	-	-	-	226,49	-	-	-	-	-	226,49	-
TOTAL	82.038,37								82.038,37					

Tabla 2: Balance global molar. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas								Salidas					
	Flujo molar (kmol/h)								Flujo molar (kmol/h)					
	C. 1	C. 2	C. 3	C. 9	C.29	C.31	C.36	C.42	C.11	C.17	C.33	C.37	C.40	C.41
Lignina	0,67	-	-	-	-	-	-	-	-	-	$1,52 \cdot 10^{-3}$	-	-	-
NaOH	-	37,96	-	-	-	-	-	-	-	-	37,96	-	-	-
O ₂	-	-	-	47,60	-	-	-	94,75	23,80	21,62	-	-	94,75	-
N ₂	-	-	-	179,06	-	-	-	356,45	156,39	22,67	-	-	356,45	-
H ₂ O	-	84,31	966,36	-	-	47,81	81,93	-	-	-	1098,48	-	81,93	-
Vainillina	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,068	$2 \cdot 10^{-3}$	0,31	0,41
Siringaldehído	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,012	0,12	0,01	$3 \cdot 10^{-3}$
Ac. vainillínico	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,36	-	-	-
Compuestos X	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8,34	-	-	-
Etanol	-	-	-	-	-	355,56	-	-	-	-	355,56	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-	-	1195,01	-	-	-	-	-	-	-	1194,98	0,026
NH ₃	-	-	-	-	-	-	13,30	-	-	-	-	-	13,30	-

Se comprueba en la *Tabla 1* que se cumple la ley de conservación de masa ya que la suma de las corrientes de entrada es igual a la suma de las corrientes de salida.

1.3 Balance de materia a las unidades del proceso

Se presentan los balances de materia a aquellos equipos en los que está presente un cambio en la composición de salida de la o las corrientes del proceso. Tal y como se indicó en el apartado anterior, no se tienen en cuenta bombas, compresores e intercambiadores de calor.

1.3.1 Tanque de mezcla TM-101

Al tanque llegan las corrientes 1, 2, 3, correspondientes a la alimentación fresca de lignina, NaOH y agua respectivamente.

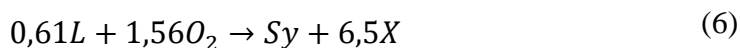
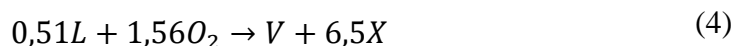
En la *Tabla 3* se muestra el balance de materia y la demostración del cierre del balance.

Tabla 3: Balance de materia al equipo TM-101. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas			Salidas
	Flujo másico (kg/h)			Flujo másico (kg/h)
	C. 1	C. 2	C. 3	C.4
Lignina	1.557,24	-	-	1.557,24
NaOH	-	1.518,80	-	1.518,80
O ₂	-	-	-	-
N ₂	-	-	-	-
H ₂ O	-	1.518,80	17.409,27	18.928,08
Vainillina	-	-	-	-
Siringaldehído	-	-	-	-
Ac. vainillínico	-	-	-	-
Compuestos X	-	-	-	-
Etanol	-	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-	-
NH ₃	-	-	-	-
TOTAL		22.004,12		22.004,12

1.3.2 Reactor R-101

Se presenta el balance de materia al reactor con el siguiente mapa de reacciones:



Es necesario recordar que la vainillina, expresada como V en la reacción de oxidación de la lignina a vainillina (4) y siringaldehído (Sy) (6) presenta la ecuación molecular $C_8H_8O_3$. Para el ácido vainillínico la expresión molecular es $C_8H_8O_4$.

La alimentación líquida al reactor, corriente 8, está formada por la corriente 5 de salida del tanque de mezcla TM-101 y la corriente 26 de recirculación del filtro F-201 A/B y el filtro F-202 A/B. La recirculación está formada por la lignina no despolimerizada (no reaccionada) recuperada mediante los filtros F-201 A/B y F-202 A/B, junto con un 25% de la corriente de agua de entrada a cada filtro.

La lignina y el NaOH alimentado al reactor deben estar en una concentración concreta ($[L]=60$ g/L y $[NaOH]=80$ g/L) de acuerdo con la bibliografía [2] para alcanzar las condiciones de operación necesarias en el reactor. El agua fresca alimentada es la necesaria para garantizar la concentración de lignina y NaOH en la entrada al reactor, junto con el agua en la disolución de NaOH y el agua presente en la recirculación de lignina.

La alimentación de aire enriquecido al reactor se hace a través de la corriente 15, formada por la corriente fresca de aire enriquecido, corriente 14, y la corriente de recirculación de gas tras la purga, corriente 18. La salida de gases del equipo se lleva a cabo a través de la corriente 16.

La conversión alcanzada para las condiciones determinadas para el reactor es de un 76,72% de lignina.

Tabla 4: Balance de materia al equipo R-101. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas		Salidas	
	Flujo másico (kg/h)		Flujo másico (kg/h)	
	C. 8	C. 15	C.16	C.19
Lignina	2.025,07	-	-	471,37
NaOH	2.700,09	-	-	2.700,09
O ₂	-	1.510,04	1.440,32	-
N ₂	-	1.321,88	1.321,88	-
H ₂ O	33.649,91	-	-	33.649,91
Vainillina	-	-	-	119,81
Siringaldehído	-	-	-	25,51
Ac. vainillínico	-	-	-	59,76
Compuestos X	-	-	-	1.418,35
Etanol	-	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-	-
NH ₃	-	-	-	-
TOTAL	41.207,00		41.207,00	

1.3.3 Filtro F-101 A/B

El filtro F-101 A/B purifica el aire de entrada al sistema, corriente 9 y obtiene aire enriquecido en nitrógeno o filtrado, corriente 11; y aire enriquecido en oxígeno al 50,6% en la corriente 12. Previo al filtrado, es necesario incrementar la presión del gas por medio del compresor C-101 A/B, cuya salida, corriente 10, se introduce en el equipo de filtración mencionado. El sistema de filtración tiene una eficacia de recuperación de 0,5 en base al oxígeno de entrada a la membrana del equipo. El balance se muestra en la *Tabla 5*

Tabla 5. Balance de materia al equipo F-101 A/B. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas	Salidas	
	Flujo másico (kg/h)	Flujo másico (kg/h)	
	C. 10	C.11	C.12
Lignina	-	-	-
NaOH	-	-	-
O ₂	1.523,01	761,51	761,51
N ₂	5.015,51	4.380,61	634,90
H ₂ O	-	-	-
Vainillina	-	-	-
Siringaldehído	-	-	-
Ac. vainillínico	-	-	-
Compuestos X	-	-	-
Etanol	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-
NH ₃	-	-	-
TOTAL	6.538,52	6.538,52	

1.3.4 Filtro F-201 A/B

El filtro-201 A/B recupera parte de la lignina presente en la corriente 20 de salida del intercambiador de calor E-201, encargado del enfriamiento de la corriente de productor proveniente del reactor R-101. De este equipo tiene como salidas la corriente 21, cuyo fluido será enviado a la recirculación, y la corriente 22, en dirección a la bomba P-201 A/B para incrementar la presión de cara al equipo F-202 A/B. El balance de materia se muestra en la *Tabla 6*:

Tabla 6: Balance de materia al equipo F-201 A/B. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas	Salidas	
	Flujo másico (kg/h)	Flujo másico (kg/h)	
	C. 20	C.21	C.22
Lignina	471,37	457,22	14,14
NaOH	2.700,09	675,02	2.025,07
O ₂	-	-	-
N ₂	-	-	-
H ₂ O	33.649,91	8.412,48	25.237,43
Vainillina	119,81	-	119,81
Siringaldehído	25,51	-	25,51
Ac. vainillínico	59,76	-	59,76
Compuestos X	1.418,35	-	1.418,35
Etanol	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-
NH ₃	-	-	-
TOTAL	38.444,80	38.444,80	

1.3.5 Filtro F-202 A/B

El funcionamiento de este equipo es análogo al filtro F-201 A/B. La entrada al equipo se realiza a través de la corriente 23, procedente de la bomba P-201 A/B usada para aumentar la presión de entrada al filtro. Existen dos corrientes de salida, la corriente 24, cuyo fluido será recirculado, y la corriente 27, en dirección al tanque V-201 y en la que la fracción de lignina es ínfima. El balance de materia se presenta en la *Tabla 7*:

Tabla 7: Balance de materia al equipo F-202 A/B. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas	Salidas	
	Flujo másico (kg/h)	Flujo másico (kg/h)	
	C. 23	C.24	C.27
Lignina	14,14	10,61	3,54
NaOH	2.025,07	506,27	1.518,80
O ₂	-	-	-
N ₂	-	-	-
H ₂ O	25.237,44	6.309,36	18.928,08
Vainillina	119,81	-	119,81
Siringaldehído	25,51	-	25,51
Ac. vainillínico	59,76	-	59,76
Compuestos X	1.418,35	-	1.418,35
Etanol	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-
NH ₃	-	-	-
TOTAL	28.900,08	28.900,08	

1.3.6 Tanque de almacenamiento V-201

Este equipo tiene como función el almacenamiento del fluido donde se encuentra el compuesto de interés antes de dirigirse a las columnas de adsorción T-201 y T-202 para la separación de compuestos. Es por este motivo, que ejerce de tanque “pulmón”, de tal manera que se garantice la continuidad del proceso. El balance de materia de este equipo se presenta en la *Tabla 8*.

Tabla 8: Balance de materia al equipo V-201. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas	Salidas
	Flujo másico (kg/h)	Flujo másico (kg/h)
	C.27	C.28
Lignina	3,54	3,54
NaOH	1.518,80	1.518,80
O ₂	-	-
N ₂	-	-
H ₂ O	18.928,08	18.928,08
Vainillina	119,81	119,81
Siringaldehído	25,51	25,51
Ac. vainillínico	59,76	59,76
Compuestos X	1.418,35	1.418,35
Etanol	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-
NH ₃	-	-
TOTAL	22.073,84	22.073,84

1.3.7 Columnas de adsorción T-201/T-202

El balance de materia de las columnas de adsorción T-201/T-202 ha sido calculado detalladamente en el *Anexo II. Cálculos Justificativos. Parte B. Columnas de adsorción T-201/T-202*. La alimentación se realiza a través de la corriente 28, procedente del tanque V-201. Por otra parte, se introducen los compuestos necesarios para el proceso de desorción a través de la corriente 30, agua desionizada, y la corriente 32, disolución de etanol, previa elevación de la presión por medio de las bombas P-203 A/B y P-204 A/B. Existen dos corrientes de salida de estos equipos. Por una parte, la corriente 33, que contiene los compuestos considerados como residuos, que se dirigirán a tratamiento; y la corriente 34, en la que se encuentra la vainillina, principal objetivo de este proceso. El balance se muestra en la *Tabla 9*.

Tabla 9: Balance de materia a las columnas de adsorción T-201/T-202. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas			Salidas	
	Flujo másico (kg/h)			Flujo másico (kg/h)	
	C. 28	C. 30	C. 32	C.33	C.34
Lignina	3,54	-	-	3,54	-
NaOH	1.518,80	-	-	1.518,80	-
O ₂	-	-	-	-	-
N ₂	-	-	-	-	-
H ₂ O	18.928,08	-	861,36	19.789,43	-
Vainillina	119,81	-	-	10,30	109,50
Siringaldehído	25,51	-	-	2,20	23,31
Ac. vainillínico	59,76	-	-	59,76	-
Compuestos X	1.418,35	-	-	1.418,35	-
Etanol	-	-	16.380,45	16.380,45	-
H ₂ O _{desionizada}	-	21.534,12	-	-	21.534,12
NH ₃	-	-	-	-	-
TOTAL		60.849,77		60.849,77	

1.3.8 Tanque de almacenamiento V-202

La función que cumple este equipo es análoga al descrito previamente V-201. El objetivo es el almacenamiento del fluido procedente de las columnas de adsorción T-201/T-202 a través de la corriente 34 con el fin de garantizar el flujo constante hacia las siguientes etapas del proceso, a través de la corriente 35, garantizando que el proceso sea continuo. El balance de materia de este equipo se presenta en la *Tabla 10*.

Tabla 10: Balance de materia al equipo V-202. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas	Salidas
	Flujo másico (kg/h)	Flujo másico (kg/h)
	C.34	C.35
Lignina	-	-
NaOH	-	-
O ₂	-	-
N ₂	-	-
H ₂ O	-	-
Vainillina	109,50	109,50
Siringaldehído	23,31	23,31
Ac. vainillínico	-	-
Compuestos X	-	-
Etanol	-	-
H ₂ O _{desionizada}	21.534,12	21.534,12
NH ₃	-	-
TOTAL	21.666,93	21.666,93

1.3.9 Precipitador PR-201

El precipitador PR-201 separa el siringaldehído presente en la salida de productos de la adsorción tras el tanque de almacenamiento V-202, corriente 35. Para llevar a cabo la precipitación se hace uso de una corriente de disolución de amoníaco al 20% a través de la corriente 36. Existen dos salidas a través de la corriente 37, la cual contiene principalmente siringaldehído, y la corriente 38, la cual contiene la vainillina. El balance de materia se muestra en la *Tabla 11*.

Tabla 11: Balance de materia al equipo PR-201. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas		Salidas	
	Flujo másico (kg/h)		Flujo másico (kg/h)	
	C.35	C.36	C.37	C.38
Lignina	-	-	-	-
NaOH	-	-	-	-
O ₂	-	-	-	-
N ₂	-	-	-	-
H ₂ O	-	1.475,92	-	1.475,92
Vainillina	109,50	-	0,34	109,16
Siringaldehído	23,31	-	20,98	2,33
Ac. vainillínico	-	-	-	-
Compuestos X	-	-	-	-
Etanol	-	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	21.534,12	-	-	21.534,12
NH ₃	-	226,49	-	226,49
TOTAL	23.369,35		23.369,35	

1.3.10 Spray dryer SD-301

La sección de purificación (S-300) está encabezada por el spray dryer, en el cual se evaporan los compuestos volátiles presentes en la corriente 39 de entrada, tales como el agua y amoníaco, siendo enviados como residuos para tratamiento fuera de los límites de batería a través de la corriente 40. Para ello, el equipo utiliza aire, cuya entrada se realiza a través de la corriente 42 a 25°C hacia el equipo, donde se deshumificará y se calentará hasta los 100°C. Como resultado de este proceso, se obtiene el producto objetivo, la vainillina al 98% de pureza, cuya salida del proceso será llevada a cabo a través de la corriente 41. El balance de materia se realiza a partir de la metodología mostrada en la bibliografía [3] y los resultados obtenidos se presentan en la *Tabla 13*.

La cantidad de aire necesario para llevar a cabo el proceso se determina a partir del siguiente balance de materia, *Ecuación (7)* [3].

$$M_e(w_1) + G(H_1) = M_s(w_2) + G(H_2) \quad (7)$$

Donde:

$M_e(w_1)$: Caudal másico de líquido a evaporar en la entrada (kg/h)

$M_s(w_2)$: Caudal másico de líquido no evaporado en la corriente de producto (kg/h)

G : Caudal másico de aire seco (kg/h)

w_1, w_2 : Humedad absoluta del aire a la entrada y a la salida, respectivamente (kg_{H2O}/kg_{aire})

Para la determinación del caudal de aire se establece a partir de datos del fabricante que el aire seco entra a una temperatura de 100°C con una humedad de 0,005 kg/kg, y se considerará saturación en el aire caliente efluente del equipo. Empleando el diagrama psicrométrico se determina la humedad absoluta del aire a esa temperatura para saturación. En la *Tabla 12* se muestran los resultados obtenidos, así como en la *Tabla 13* el balance de materia al equipo.

Tabla 12: Caudal de aire en el SD-301. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
$M_e(w_1)$ (kg/h)	23.236,53
$M_s(w_2)$ (kg/h)	0,47
w_1 (kg _{H2O} /kg _{aire})	0,005
w_2 (kg _{H2O} /kg _{aire})	1,79
G (kg/h)	13.017,40

Tabla 13: Balance de materia al equipo SD-301. Fuente: [Elaboración propia]

	Entradas		Salidas	
	Flujo másico (kg/h)		Flujo másico (kg/h)	
Corrientes/ Compuestos	C.39	C.42	C.40	C.41
Lignina	-	-	-	-
NaOH	-	-	-	-
O ₂	-	3.032,10	3.032,10	-
N ₂	-	9.985,30	9.985,30	-
H ₂ O	1.475,92	-	1.475,92	-
Vainillina	109,16	-	46,97	62,20
Siringaldehído	2,33	-	1,87	0,47
Ac. vainillínico	-	-	-	-
Compuestos X	-	-	-	-
Etanol	-	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	21.534,12	-	21.533,65	0,47
NH ₃	226,49	-	226,49	-
TOTAL	36.365,43		36.365,43	

1.4 Balance de materia en recirculaciones

A continuación, se detallarán el balance de materia de las recirculaciones presentes en el proceso.

1.4.1 Unión de corrientes 5 y 26

Se trata de la mezcla de la corriente 5, procedente de TM-101, y la recirculación de una parte de lignina, NaOH y agua, proveniente de los filtros F-201 A/B y F-202 A/B, corriente 26. El balance de materia se muestra en la *Tabla 14*.

Tabla 14: Balance de materia de la recirculación. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas		Salidas
	Flujo másico (kg/h)		Flujo másico (kg/h)
	C.5	C.26	C.6
Lignina	1.557,24	467,83	2.025,07
NaOH	1.518,80	1.181,29	2.700,09
O ₂	-	-	-
N ₂	-	-	-
H ₂ O	18.928,08	14.721,84	33.649,91
Vainillina	-	-	-
Siringaldehído	-	-	-
Ac. vainillínico	-	-	-
Compuestos X	-	-	-
Etanol	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-
NH ₃	-	-	-
TOTAL	38.375,08		38.375,08

1.4.2 Unión de corrientes 14 y 18

Se corresponde con la mezcla de corrientes gaseosas. Por una parte, a través de la corriente 14 se realiza la entrada fresca de aire enriquecido, procedente del intercambiador de calor E-103, cuyo objetivo es la adecuación de su temperatura a la de reacción. Dicha corriente se une a la corriente 18, de recirculación del gas procedente del reactor R-101 tras la purga de inerte, y que contiene oxígeno sin reaccionar. La corriente resultante de la unión, corriente 15, será la entrada de gas al reactor R-101. El balance de materia se muestra en la *Tabla 15*.

Tabla 15: Balance de materia en la recirculación de gas. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas		Salidas
	Flujo másico (kg/h)		Flujo másico (kg/h)
	C.14	C.18	C.15
Lignina	-	-	-
NaOH	-	-	-
O ₂	761,51	748,54	1.510,04
N ₂	634,90	686,98	1.321,88
H ₂ O	-	-	-
Vainillina	-	-	-
Siringaldehído	-	-	-
Ac. vainillínico	-	-	-
Compuestos X	-	-	-
Etanol	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-
NH ₃	-	-	-
TOTAL	2.831,92		2.831,92

1.4.3 Unión de corrientes 21 y 24

Se trata de la mezcla de corrientes procedentes de las salidas de los filtros F-201 A/B y F-202 A/B, respectivamente. Estas corrientes poseen un alto contenido en lignina no despolimerizada, por lo que su objetivo será la unión de ambas para poder llevar a cabo la recirculación de compuestos, a través de la corriente 25, para su acondicionamiento. El balance de materia se muestra en la *Tabla 16*.

Tabla 16: Balance de materia a la recirculación de salida de filtros. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas		Salidas
	Flujo másico (kg/h)		Flujo másico (kg/h)
	C.21	C.24	C.25
Lignina	457,22	10,61	467,83
NaOH	675,02	506,27	1.181,29
O ₂	-	-	-
N ₂	-	-	-
H ₂ O	8.412,48	6.309,36	14.721,84
Vainillina	-	-	-
Siringaldehído	-	-	-
Ac. vainillínico	-	-	-
Compuestos X	-	-	-
Etanol	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-
NH ₃	-	-	-
TOTAL	16.370,96		16.370,96

1.5 Balance de materia en la purga

Con el objetivo de recircular el gas que contiene oxígeno no reaccionado procedente del reactor, corriente 16, será necesario una purga para evitar la acumulación de inerte (N₂) en el sistema, a través de la corriente 17. La recirculación del gas se realizará a través de la corriente 18. El balance de materia en la purga se muestra en la *Tabla 17*.

Tabla 17: Balance de materia en la purga de la corriente gaseosa efluente de R-101. Fuente: [Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas	Salidas	
	Flujo másico (kg/h)	Flujo másico (kg/h)	
	C.16	C.17	C.18
Lignina	-	-	-
NaOH	-	-	-
O ₂	1.440,32	691,79	748,54
N ₂	1.321,88	634,90	686,98
H ₂ O	-	-	-
Vainillina	-	-	-
Siringaldehído	-	-	-
Ac. vainillínico	-	-	-
Compuestos X	-	-	-
Etanol	-	-	-
H ₂ O _{desionizada}	-	-	-
NH ₃	-	-	-
TOTAL	2.762,20	2.762,20	

2 Balances de energía

2.1 Introducción

A diferencia de lo que sucede en el balance de materia, la conservación de energía no tiene por qué conservarse, debido a que parte puede ser producida o consumida en un proceso químico. Los balances de energía se realizan para determinar los requerimientos de energía en el proceso, tanto de enfriamiento como de calentamiento en los intercambiadores de calor, así como requerimientos de potencia como es el caso de las bombas y compresores. [1]

La ecuación general de conservación de energía se define mediante la *Ecuación (8)*:

$$E_{\text{salida}} = E_{\text{entrada}} + \text{Generación} - \text{Consumo} + \text{Acumulación} \quad (8)$$

Es posible distinguir entre distintos tipos de energía: Energía potencial, cinética, interna, calor, etc. Para la realización de los balances de energía en este proyecto se considera la energía potencial y la energía cinética al no ser significantes frente al calor y el trabajo. Por lo tanto, la ecuación de conservación de energía simplificada con la que se realizan los balances se expresa según la *Ecuación (9)*:

$$H_2 - H_1 = Q - W \quad (9)$$

En la que:

H: es el término de entalpía de reacción

Q: es el calor intercambiado

W: es el trabajo realizado

Para líquidos, la entalpía específica sigue la siguiente *Ecuación (10)*.

$$H_i = m \cdot C_p \cdot T_i \quad (10)$$

En la que:

m: caudal másico de la corriente (kg/s)

C_p: Calor específico de la corriente (J/kg °C)

T_i es la temperatura de la corriente (°C)

A continuación, se presentan los balances a cada equipo del proceso en el que haya un intercambio de energía. Debe aclararse que se consideran no relevantes los intercambios de calor que tienen lugar en los filtros F-201 A/B y F-202 A/B, donde la variación de temperatura en los líquidos que los atraviesan se asume despreciables, no así en el filtro F-101 A/B, donde se realizará el correspondiente balance de energía.

2.2 Intercambiadores de calor

El calor necesario a aportar o retirar en cada caso, se calcula mediante la *Ecuación (11)* para intercambios en los que no se produzca un cambio de fase.

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot C_p \cdot (T - T_0) \quad (11)$$

En la que:

\dot{Q} : Calor intercambiado (kW)

\dot{m} : Caudal másico de la corriente (kg/s)

C_p: Calor específico de la corriente a la temperatura media entre T y T₀ (kJ/kg·°C)

T : Temperatura de la corriente a la salida ($^{\circ}\text{C}$)

T_0 : Temperatura de la corriente de salida ($^{\circ}\text{C}$)

A partir de la *Ecuación (11)* se determinan los flujos másicos de las corrientes de utilidades una vez determinada la energía necesaria para cada caso. En el caso de que se emplee vapor de agua como fluido de calentamiento, se considera que entra y sale a la misma temperatura, por lo que la energía que aporta el fluido se corresponde con el calor latente, expresado en la *Ecuación (12)*.

$$Q_v = \dot{m} \cdot \lambda_{vap} \quad (12)$$

En la que:

\dot{m} : Caudal másico de la corriente (kg/h)

λ_{vap} : Entalpía de vaporización (kJ/kg)

2.2.1 Intercambiador de calor E-101

El intercambiador de calor E-101, junto con el intercambiador E-102, tiene como objetivo aumentar la temperatura de la corriente de entrada al reactor. El intercambiador E-101 hace a la vez la función de enfriamiento del fluido térmico empleado en el reactor R-101. De esta forma se aprovecha la energía retirada al reactor para calentar la corriente y así disminuir la temperatura del refrigerante para volver a ser usado en el reactor.

El cálculo del balance de energía se presenta en la *Tabla 18*:

Tabla 18. Balance de energía al intercambiador E-101. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Energía retirada en el reactor \rightarrow Aportada a la corriente (kW)	4.096,06
Temperatura de la corriente de entrada, 6 ($^{\circ}\text{C}$)	25
Calor específico medio (kJ/kg $\cdot^{\circ}\text{C}$) *	4,25
Caudal másico de la corriente de entrada, 6 (kg/s)	10,66
Temperatura de la corriente de salida, 7 ($^{\circ}\text{C}$)	115,42

*Dato obtenido mediante Aspen Hysys

El caudal másico de fluido térmico DowTherm ha sido calculado en el *Anexo II. Cálculos justificativos* en el *Apartado 12.2. Cálculo del caudal de refrigerante del Diseño del Reactor R-101*, donde se ha obtenido un valor de 25,68 kg/s.

2.2.2 Intercambiador de calor E-102

Aporta el calor necesario para terminar de adecuar la temperatura de la corriente 7 (salida del intercambiador de integración energética E-101) hasta la requerida para la operación en el Reactor R-101. La salida del intercambiador es la corriente 8. Se usa como fluido de servicio vapor de media presión (*mps*) a 170°C.

El cálculo del balance de energía para hallar el requerimiento de calor necesario se presenta en la siguiente *Tabla 19*:

Tabla 19. Balance de energía al intercambiador E-102. Cálculo del flujo de calor. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Temperatura de la corriente de entrada, T_7 (°C)	115,42
Temperatura de la corriente de salida, T_8 (°C)	160
Calor específico medio (kJ/kg·°C) *	4,39
Caudal másico de la corriente de entrada, 7 (kg/s)	10,66
Flujo de calor (kW)	2.086,66

*Dato obtenido mediante Aspen Hysys

En la *Tabla 20* se presenta el cálculo del caudal de fluido de utilidad empleado.

Tabla 20: Cálculo del caudal de mps empleado en E-102. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Flujo de calor (kW)	2.086,66
Temperatura de entrada, T_e (°C)	170
Temperatura de salida, T_s (°C)	170
Entalpía vaporización, λ_{vap} (kJ/kg)	2.049
Caudal másico vapor media presión, <i>mps</i> (kg/s)	1,01

2.2.3 Intercambiador de calor E-103

El intercambiador de calor E-103 disminuye la temperatura de la corriente 13 compuesta por oxígeno y nitrógeno enriquecido al 50,6% de O₂, salida de la membrana F-101 A/B y el compresor C-102 A/B. Se emplea como fluido refrigerante agua fría (*cooling water*, *cw*) desde una temperatura de 32°C hasta 50°C, tal y como se indica en las heurísticas para refrigeración. [1]

En la *Tabla 21* se recoge el cálculo de la energía intercambiada necesaria para descender la temperatura de la corriente.

Tabla 21. Balance de energía al intercambiador E-103. Cálculo del flujo de calor. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Temperatura de la corriente de entrada, T_{13} (°C)	239,06
Temperatura de la corriente de salida, T_{14} (°C)	160
Calor específico medio (kJ/kg·°C) *	1,01
Caudal másico de la corriente de entrada, 13 (kg/s)	0,39
Flujo de calor (kW)	-31,14

**Dato obtenido mediante Aspen Hysys*

En la *Tabla 22* se presenta el cálculo del caudal de fluido de utilidad empleado.

Tabla 22: Cálculo del caudal de cooling water empleado en E-103. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Flujo de calor (kW)	-31,14
Temperatura de entrada, T_e (°C)	32
Temperatura de salida, T_s (°C)	50
Calor específico T_e (kJ/kg·°C) [5]	4,178
Calor específico T_s (kJ/kg·°C) [5]	4,181
Calor específico medio (kJ/kg·°C)	4,18
Caudal másico <i>cooling water</i> , cw (kg/s)	0,41

2.2.4 Intercambiador de calor E-201

El intercambiador de calor E-201 tiene como objetivo disminuir la temperatura de la corriente 19 de salida del reactor R-101 desde 160°C hasta 25°C en la corriente 20 a la entrada del filtro F-201 A/B. Se emplea como fluido refrigerante *chilled water* o agua enfriada. Esto es debido a que *cooling water* (*agua fría*) no puede trabajar a temperaturas inferiores a 25°C por lo que se necesita que el fluido de servicio esté a menos temperatura para enfriar la corriente hasta dicho valor. Se introduce a 15°C y se extrae a 32°C de acuerdo con los rangos establecidos por las heurísticas.

En la *Tabla 23* se recoge el valor de requerimiento energético para este intercambiador.

Tabla 23. Balance de energía al intercambiador E-201. Cálculo del flujo de calor. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Temperatura de la corriente de entrada, T_{19} (°C)	160
Temperatura de la corriente de salida, T_{20} (°C)	25
Calor específico medio (kJ/kg·°C) *	4,076
Caudal másico de la corriente de entrada, 19 (kg/s)	10,68
Flujo de calor (kW)	-5876,78

*Dato obtenido mediante Aspen Hysys

En la *Tabla 24* se presenta el cálculo del caudal de fluido de utilidad empleado.

Tabla 24. Cálculo del caudal de chilled water empleado en E-201. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Flujo de calor (kW)	5876,78
Temperatura de entrada, T_e (°C)	15
Temperatura de salida, T_s (°C)	32
Calor específico T_e (kJ/kg·°C) [5]	4,185
Calor específico T_s (kJ/kg·°C) [5]	4,178
Calor específico medio (kJ/kg °C)	4,182
Caudal másico <i>chilled water</i> (kg/s)	82,69

2.3 Reactor R-101

El reactor opera en condiciones isotermas a una temperatura constante de 160°C. Los cálculos de la entalpía de cada reacción y el calor liberado total, el cual debe ser retirado para mantener las condiciones de T, han sido detallados en el *Anexo II. Cálculos justificativos. Parte A*. En la *Tabla 25* se presenta el calor liberado por cada reacción y el calor total:

Tabla 25. Balance de energía al reactor R-101. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Q1 (kJ/h)	$-1,45 \cdot 10^7$
Q1 (kJ/h)	$-9,49 \cdot 10^4$
Q1 (kJ/h)	$-1,923 \cdot 10^5$
Calor reacción (kJ/h)	$-1,47 \cdot 10^7$
Calor reacción (W)	$-4,10 \cdot 10^6$

2.4 Columnas de adsorción T-201/T-202

El balance de energía en las columnas de adsorción ha sido calculado en detalle en el *Anexo II. Cálculos justificativos. Parte B Apartado 4.5 Balance de energía en la columna de diseño*. Para ello, se realizó el cálculo del calor liberado en el proceso de adsorción como el producto del caudal másico de mezcla y la entalpía isostérica de adsorción. Una vez obtenido el dato de calor liberado, se calcula el gradiente térmico para el caudal total de fluido y su respectivo valor de calor específico. Se calcula finalmente el gradiente térmico por cada ciclo de adsorción, teniendo en cuenta el tiempo de operación. Los resultados se muestran a continuación en la *Tabla 26*.

Tabla 26: Balance de energía a la columna de adsorción T-201 A/B. Fuente: [Elaboración propia]

$\Delta H_{isostérica}$ (kJ/mol)	-20
$\dot{m}_{mezcla\ adsorbida}$ (mol/h)	907,47
\dot{Q} (kJ/h)	-18.149,40
Ciclo de adsorción (h)	2,4
\dot{Q} (kJ/ciclo adsorción)	-43.558,56
\dot{m}_{fluido} (kg/h)	22.073,84
\dot{m}_{fluido} (kg/ciclo adsorción)	52.977,22
C_p (kJ/kg·°C)*	3,7524
ΔT (°C)	0,22

*Dato de C_p obtenido con el simulador Aspen HYSYS

2.5 Compresores

El proceso descrito necesita de una corriente de aire enriquecido en oxígeno para llevar a cabo la reacción de despolimerización de lignina. Sin embargo, la corriente de gas ha de ser previamente tratada en el equipo de filtración F-101 A/B y posteriormente comprimida hasta una presión de 10 bar. Para ello, se hace uso de compresores, equipos diseñados para el aumento de presión de fluidos compresibles.

Sin embargo, dicha compresión conlleva a un aumento de la temperatura de dicho gas, por lo que será necesaria la realización de los balances de energía pertinentes con el objetivo de evaluar la variación de temperatura y energía en dicho proceso.

Asumiendo una compresión isentrópica, la temperatura de salida de un gas tras una etapa de compresión puede ser obtenida mediante la *Ecuación (13)* [1]

$$T_2 = T_1 \cdot \left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{\left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\right)} \quad (13)$$

Donde:

T_1 : Temperatura de entrada del gas (K)

T_2 : Temperatura de salida del gas (K)

P_1 : Presión inicial del gas (bar)

P_2 : Presión final del gas (bar)

γ : Relación entre capacidades caloríficas, C_p/C_v

2.5.1 Compresor C-101 A/B

La corriente de aire necesaria en el proceso para la etapa de reacción debe pasar en primer lugar por una etapa de enriquecimiento en O_2 . Dicha etapa se realizará en el equipo de filtración F-101 A/B, para lo cual será necesario elevar la presión del gas hasta los 3 bar. Tomando como referencia una temperatura de entrada de 25°C y haciendo uso de la *Ecuación (13)* es posible calcular la temperatura de salida de la corriente de gas. Los resultados se presentan en la *Tabla 27*.

Tabla 27: Variación de temperatura en C-101 A/B. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
P_1 (bar)	1,01
P_2 (bar)	3
γ	1,4
T_1 (K)	298,15
T_2 (K)	406,70
T_2 ($^\circ\text{C}$)	133,55

2.5.2 Compresor C-102 A/B

Una vez la corriente de aire de entrada haya sido sometida al proceso de enriquecimiento en O₂, esta debe acondicionarse hasta una presión de 10 bar. Teniendo la presión de salida de la corriente gaseosa del equipo de filtración F-101 A/B, puede determinarse que la relación de compresión es elevada. Una elevación de presión de este calibre en una sola etapa conllevaría a un gran aumento de la temperatura, lo cual mermaría la eficiencia del proceso y podría suponer un riesgo desde el punto de vista de la seguridad.

Es por este motivo que se implementará un compresor multietapa, C-102 A/B, el cual realiza la compresión hasta la presión final en varias etapas con una refrigeración del fluido compresible entre cada una de ellas. La ventaja de este sistema es el control de la temperatura que experimenta el gas debido al aumento de la presión, lo cual aumenta la eficiencia del proceso. [4]

Dado que el consumo mínimo de energía se logra cuando las relaciones de compresión de las sucesivas etapas son iguales, se llevará a cabo la compresión del gas enriquecido en O₂ en dos etapas con una refrigeración intermedia. [4]

El balance de energía se establecerá en cada etapa de compresión, así como en la etapa intermedia de refrigeración con el objetivo de conocer la variación de temperatura de la corriente de gas.

2.5.2.1 Etapa 1 de compresión

En esta primera etapa se realiza una compresión de la corriente proveniente del filtro F-101 A/B hasta los 5 bar de presión. Para la realización de los cálculos debe tenerse en cuenta la temperatura de salida y caída de presión provocada por el filtro F-101 A/B, especificado en el Apartado 2.6 *Filtro F-101 A/B*. La temperatura de salida se recoge en la *Tabla 28*.

Tabla 28: Variación de temperatura en la primera etapa de compresión del C-102 A/B. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
P ₁ (bar)	1,5
P ₂ (bar)	5
γ	1,4
T ₁ (K)	333,63
T ₂ (K)	470,33
T₂ (°C)	197,18

2.5.2.2 Etapa intermedia de refrigeración

En esta etapa se llevará a cabo una disminución de la temperatura de la corriente de gas con el objetivo de hacer que el proceso global de compresión sea lo más eficiente posible. El cálculo se realizará a partir de la *Ecuación (11)*. Los resultados se presentan en la *Tabla 29*.

Tabla 29: Variación de temperatura en la etapa intermedia de refrigeración. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
\dot{m} (kg/s)	0,39
C_p (kJ/kg.°C)	1,01
T_1 (°C)	197,18
T_2 (°C)	147,18
\dot{Q} (kW)	-19,70

2.5.2.3 Etapa 2 de compresión

Finalmente, en esta segunda etapa se llevará a cabo la compresión del gas hasta los 10 bar de presión. Cabe destacar que la pérdida de presión en la etapa intermedia de refrigeración se considera despreciable, y que, por tanto, del mismo modo que en el caso de la etapa 1 de compresión, empleando la *Ecuación (11)* se obtiene la temperatura de salida del gas de esta etapa y se recoge en la *Tabla 30*.

Tabla 30: Variación de temperatura en la segunda etapa de compresión del C-102 A/B. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
P_1 (bar)	5
P_2 (bar)	10
γ	1,4
T_1 (K)	420,33
T_2 (K)	512,21
T_2 (°C)	239,06

2.6 Filtro F-101 A/B

Este equipo tiene como objetivo el enriquecimiento en O_2 de la corriente fresca de aire. El paso de la corriente de gas a través de las láminas filtrantes provoca una caída de presión en el gas de 1,5 bar, lo cual conlleva a una disminución de la temperatura de la corriente gaseosa proveniente del compresor C-101 A/B.

El cálculo de la temperatura de salida se realizará empleando la *Ecuación (13)*, considerando el proceso como una expansión isentrópica. El calor se halla a partir de la *Ecuación (11)*. Los resultados se presentan en la *Tabla 31*.

Tabla 31: Variación de temperatura en el filtro F-101 A/B. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
P ₁ (bar)	3
P ₂ (bar)	1,5
γ	1,4
T ₁ (K)	406,70
T ₂ (K)	333,63
T₂ (°C)	60,48
\dot{m} (kg/s)	1,82
C _p (kJ/kg.°C)	1,03
\dot{Q} (kW)	-136,98

2.7 Spray dryer SD-301

Este equipo realiza una doble función ya que, por una parte, realiza la separación de otros compuestos líquidos presentes junto a la vainillina en la corriente de entrada y, por otra parte, logra obtener la vainillina al 98% de pureza en forma de polvo.

Para llevar a cabo este proceso, el equipo propio prepara una corriente de aire seco a 100°C a partir de la corriente de aire fresco a 25°C. Dicha corriente fluye a través de las microgotas del fluido de entrada al equipo, lo cual provoca el secado de gran parte del producto y la evaporación del agua y amoníaco principalmente. Desde el punto de vista energético, se considera que la operación en el equipo es adiabática, por lo que no existe intercambio de calor con los alrededores, sino que el intercambio de energía se produce entre los fluidos del interior del spray dryer. [3]

Teniendo en cuenta estos factores, se realiza el balance de energía necesaria para la vaporización de los compuestos, a partir de la *Expresión (14)*.

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot C_p \cdot \Delta T + \dot{m} \cdot \lambda_{vaporización} \quad (14)$$

Se debe aclarar que los datos de C_p y λ_{vaporización} de la mezcla de compuestos evaporados se ha determinado mediante el software *ASPEN HYSYS*. Los resultados obtenidos se muestran en la *Tabla 32*.

Tabla 32: Balance de energía en el SD-301. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
\dot{m} (kg/s)	6,39
C_p (kJ/kg °C)	4,21
T_1 (°C)	25
T_2 (°C)	100
$\lambda_{\text{vaporización}}$ (kJ/kg)	2.309
\dot{Q} (kW)	16.776,21

Finalmente, es necesario explicar que al hacer pasar una corriente de aire seco alta temperatura a través de microgotas de fluido, estas se vaporizarán prácticamente en el acto. A partir de este hecho, sumado a la falta de datos reales sobre la operación de este equipo por parte del fabricante, se asume que la corriente gaseosa efluente del equipo lo hará a una temperatura de 100°C, mientras que el producto en polvo lo hará a 25°C debido al proceso de separación ciclónico que se lleva a cabo en el interior del equipo.

3 Bibliografía

- [1]. SINNOT, Ray; and TOWLER, Gavin. *Diseño En Ingeniería Química*. Quinta ed. Barcelona: Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
- [2]. GOMES, E. D.; and RODRIGUES, A. E. Lignin Biorefinery: Separation of Vanillin, Vanillic Acid and Acetovanillone by Adsorption. *Separation and Purification Technology*, 1 Junio, 2019, vol. 216. pp. 92-101. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.01.071>.
- [3]. BORRAEZ JIMÉNEZ, C.F. y MEJÍA GALVÍS, N., 2016. *DESARROLLO DE UNA TECNOLOGIA ESCALA DE BANCO PARA EL SECADO DE CRUDO DE ALMIDÓN NATIVO DE QUINUA*. S.I.: FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA FACULTAD DE INGENIERÍAS. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <https://repository.uamerica.edu.co/bitstream/20.500.11839/809/1/4111368-2016-2-IM.pdf>.
- [4]. FERNÁNDEZ DÍEZ, P. COMPRESORES. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: http://www.ing.una.py/pdf_material_apoyo/compresores-y-ventiladores.pdf.
- [5]. WWW.VAXASOFTWARE.COM. Calor específico del agua entre 0 °C y 100 °C. [Consulta: 29 Enero 2023] Disponible en: http://www.vaxasoftware.com/doc_edu/qui/caloresph2o.pdf.

ANEXO II.
CÁLCULOS
JUSTIFICATIVOS

ÍNDICE

REACTOR R-101	5
1. Introducción.....	6
2. Química del reactor.	6
2.1. Química del proceso	6
2.1.1. Estimación del coeficiente estequiométrico de la lignina	7
2.1.2. Determinación del coeficiente estequiométrico de los compuestos equivalentes (X).....	7
3. Modelo cinético	8
4. Consideraciones previas al diseño.....	9
4.1. Teoría de la doble capa	10
4.2. Etapa limitante	11
4.3. Modelo para la fase líquida.....	12
4.4. Modelo para la fase gas	12
5. Selección del tipo de reactor.....	13
6. Selección del tipo de relleno.....	18
7. Cálculos previos	19
7.1. Constantes cinéticas a la temperatura de operación.....	19
7.2. Solubilidad del oxígeno	20
7.3. Exceso de oxígeno	20
8. Balances de materia	21
9. Balance de Energía	25
9.1. Cálculo de la entalpía de la reacción 3 (L-Sy).....	26
9.2. Cálculo del calor de reacción.....	27
10. Dimensionamiento del reactor.....	28
10.1. Volumen del líquido.....	29
10.2. Volumen del relleno Mellapak 750Y	29
10.3. Volumen del gas (hold-up gas)	30
10.4. Dimensiones del reactor	32
11. Caída de presión	32
12. Sistema de refrigeración	35
12.1. Tipo de camisa	35
12.2. Cálculo del caudal de refrigerante.....	36
13. Distribuidor de gas	38
13.1. Tipos y selección.....	38

13.2.	Diseño y dimensionamiento del distribuidor de gas	39
13.2.1.	Cálculo de la velocidad del gas a través del plato y del número de orificios. 39	
13.2.2.	Cálculo de la caída de presión en el plato.....	41
14.	Diseño mecánico del reactor R-101	42
14.1.	Presión de diseño.....	42
14.2.	Temperatura de diseño	42
14.3.	Selección del material de operación.....	42
14.4.	Espesor de la carcasa.....	45
14.4.1.	Cálculo del espesor de la carcasa del reactor R-101.....	45
14.4.2.	Cálculo del espesor de la camisa de refrigeración.....	46
14.5.	Selección y dimensionamiento de los cabezales superior e inferior	47
14.6.	Análisis de cargas.....	50
14.6.1.	Cargas por peso.....	50
14.6.2.	Cargas por viento	53
14.6.3.	Otras cargas.....	54
14.7.	Análisis de tensiones	54
15.	Válvula de alivio.....	55
15.1.	Dimensionamiento de la válvula.....	56
	COLUMNA DE ADSORCIÓN T-201/T-202.....	58
1.	Introducción.....	59
1.1.	Equilibrio de adsorción	60
1.1.1.	Correlaciones para el equilibrio de adsorción	61
1.2.	Materiales adsorbentes.....	64
1.3.	Métodos de desorción y regeneración del lecho	66
1.3.1.	Oscilación de temperatura (TSA).....	66
1.3.2.	Oscilación de presión (PSA y VSA).....	67
1.3.3.	Fluido desplazante y cambio de pH.....	67
2.	Características de la alimentación a la columna.....	67
3.	Elección del sólido adsorbente	68
4.	Diseño del equipo: Método de Longitud de lecho no usado (LUB).....	69
4.1.	Estudio dinámico experimental de lechos fijos de adsorción	70
4.2.	Análisis de la parte experimental.....	73
4.2.1.	Cálculos experimentales	75
4.2.2.	Escalamiento de la columna de adsorción.....	83

4.3.	Proceso de desorción	90
4.4.	Operación de las columnas	90
4.5.	Balance de materia en la columna de diseño	91
4.6.	Balance de energía en la columna de diseño	94
4.7.	Análisis de la caída de presión.....	96
5.	Diseño mecánico de la columna de adsorción.....	98
5.1.	Determinación de las condiciones de diseño	98
5.1.1.	Presión y temperatura de diseño.....	98
5.2.	Elección del material para el diseño	99
5.3.	Cálculo del espesor de carcasa.....	101
5.4.	Selección y diseño de cabezales	102
5.5.	Determinación de la altura total de columna	105
5.6.	Accesorios de columna: Boquillas, aperturas y conexiones	105
5.7.	Cargas soportadas	106
5.7.1.	Cargas debidas al peso.....	106
5.7.2.	Cargas por viento.....	109
5.8.	Cargas por efectos sísmicos	110
5.9.	Esfuerzos debido a cargas.....	110
5.9.1.	Esfuerzos primarios	110
5.9.2.	Esfuerzos principales.....	111
5.9.3.	Esfuerzos compresivos y estabilidad elástica.....	112
6.	Soporte de la columna	113
	DIMENSIONAMIENTO BÁSICO DE EQUIPOS	116
1.	Tanque de mezcla TM-101.....	116
2.	Tanque de almacenamiento V-201	117
3.	Tanque de almacenamiento V-202.....	119
4.	Agitador del tanque TM-101	120
5.	Bombas	121
6.	Compresores	125
7.	Filtros F-101 A/B, F-201 A/B y F-202 A/B	126
8.	Intercambiadores de calor.....	127
9.	Precipitador PR-201	129
10.	Spray dryer SD-301	129
11.	Dimensionamiento de conducciones	129
12.	Bibliografía.....	132

PARTE A: REACTOR R-101

1. Introducción

El reactor es una de las unidades fundamentales en cualquier proceso químico. La relevancia de este equipo no tiene por qué ser significativa en el ámbito económico; pero se trata de un elemento clave para la viabilidad del proyecto. Debe presentar las características específicas (físicas, operacionales, etc.) necesarias para que la óptima transformación de las materias primas a productos.

Para obtener dichas características en este proyecto, es necesario elaborar un diseño detallado del reactor R-101, el cual se lleva a cabo en el presente *Anexo II. Cálculos justificativos. Parte A*.

A lo largo de cada apartado de este diseño se tomará como base la siguiente *Tabla 1* en la que se indica la nomenclatura para referida a cada compuesto:

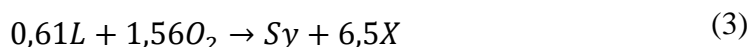
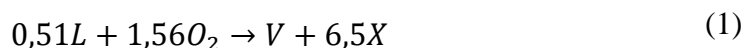
Tabla 1. Nomenclatura para cada compuesto. Fuente: [Elaboración propia]

Compuesto	Nomenclatura
Lignina	L
Vainillina	V
Siringaldehído	Sy
Ácido vainillínico	VA
Compuestos equivalentes	X
Oxígeno	O ₂
Nitrógeno	N ₂
NaOH	NaOH

2. Química del reactor.

2.1. Química del proceso

Tal y como se ha indicado en la Memoria. *Apartado 9.3. Descripción química del proceso*, la oxidación de lignina en medio alcalino origina una gran cantidad de compuestos. En este proceso se consideran como productos de reacción el compuesto de valor añadido en el que se basa el proceso, la Vainillina (V), y dos subproductos originados por su degradación debido al medio oxidante en el que se desarrolla la reacción, Siringaldehído (Sy) y Ácido vainillínico (VA). (*Reacciones (1), (2), (3)*). [1] [2] [3]



Los compuestos restantes formados se engloban en un único compuesto equivalente definido como X, tal y como se ha explicado en la Memoria, apartado 9.1. *Subproductos formados en el proceso*. Representa los compuestos fenólicos y no fenólicos derivados de la despolimerización de la lignina a excepción del Siringaldehído y la Vainillina.

2.1.1. Estimación del coeficiente estequiométrico de la lignina

El coeficiente estequiométrico de la lignina en las *Reacciones (1) y (3)* se estima en función de las masas moleculares de la lignina. El producto formado se ha estimado usando la siguiente expresión recogida en bibliografía: *Ecuación (4)*. [2]

$$\alpha = \frac{M_x}{0,13 \cdot M_L} \quad (4)$$

En la que:

M_x: masa molecular del compuesto obtenido en la reacción

M_L: masa molecular de la lignina

Se obtienen así los siguientes coeficientes estequiométricos recogidos en la *Tabla 2*:

Tabla 2. Cálculos de los coeficientes estequiométricos para la lignina. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Masa molecular lignina Kraft (g/mol)	2325
Masa molecular Vainillina (g/mol)	152,15
Masa molecular Siringaldehído (g/mol)	182,17
Lignina-Vainillina (R1)	0,51
Lignina-Siringaldehído (R2)	0,61

2.1.2. Determinación del coeficiente estequiométrico de los compuestos equivalentes (X)

En base a lo especificado en bibliografía [2], por cada mol de lignina que se rompe se originan 13 moles de compuestos equivalentes. Por lo tanto, en el mapa de reacciones la especie X presenta un coeficiente estequiométrico de 6,5. [2]

3. Modelo cinético

Las cinéticas correspondientes a la oxidación de lignina en medio alcalino y la posterior oxidación de vainillina a ácido vainillínico, fueron propuestas por *Alírio Rodrigues* y colaboradores [1], fruto de un estudio de investigación sobre la oxidación de lignina Kraft para producir vainillina.

La expresión de la ecuación cinética para la *Ecuación (1)* es la siguiente:

$$(-r_1) = k_1 C_O^{1,75} C_L \quad (5)$$

En la que:

(-r1): velocidad de oxidación de lignina en (mol/m³·s)

k₁: constante cinética de la reacción ((m³/mol)^{1,75}·s)

C_O: concentración de oxígeno disuelta en el líquido (mol/ m³)

C_L: concentración de lignina (mol/ m³)

La constante cinética k₁ sigue la ecuación de Arrhenius y presenta la siguiente expresión (*Ecuación (6)*)

$$k_1 = 1,289 \cdot \exp\left(\frac{-29100}{R \cdot T}\right) \quad (6)$$

En la que:

R: constante de los gases ideales: 8,314 (J/mol·K).

T: temperatura de reacción (K).

El valor de la energía de activación (E₁) es de 29100 J/mol·K

La expresión para la ecuación cinética de la *Ecuación (2)* es la siguiente:

$$(-r_2) = k_2 C_O C_L \quad (7)$$

En la que:

(-r2): velocidad de oxidación de vainillina en (mol/m³·s)

k₂: constante cinética de la reacción (m³/mol·s)

C_O: concentración de oxígeno disuelta en el líquido (mol/m³)

C_L: concentración de lignina (mol/m³)

La constante cinética k₂ sigue la ecuación de Arrhenius y presenta la siguiente expresión (*Ecuación (8)*)

$$k_2 = 72,6 \cdot \exp\left(\frac{-46000}{R \cdot T}\right) \quad (8)$$

En la que:

R: constante de los gases ideales: 8,314 (J/mol·K)

T: temperatura de reacción (K)

El valor de la energía de activación (E_2) es de 46000 J/mol·K

La expresión cinética de la *Ecuación (3)* es la siguiente *Ecuación (9)*. [2]

$$(-r_3) = k_3 C_L^{0,31} P_O^{1,4} \quad (9)$$

En la que:

(-r₃): velocidad de oxidación de lignina en (mol/m³·s)

K₃: constante cinética de la reacción

P_O: presión parcial de oxígeno

C_L: concentración de lignina (mol/m³)

La constante cinética k₃ sigue la ecuación de Arrhenius y presenta la siguiente expresión (*Ecuación (10)*)

$$k_3 = 0,4895 \cdot \exp\left(\frac{-29100}{RT}\right) \quad (10)$$

En la que:

R: constante de los gases ideales: 8,314 (J/mol·K)

T: temperatura de reacción (K)

El valor de la energía de activación (E_3) es de 29.100 J/mol·K

4. Consideraciones previas al diseño

Se establecen una serie de consideraciones para llevar a cabo el diseño del reactor R-101. Previamente, es necesario realizar una explicación genérica acerca de la naturaleza de la reacción para poder tomar dichas consideraciones.

En la reacción participa una fase gas definida como aire enriquecido al 50%: está formada por un inerte, el nitrógeno; y un gas reaccionante, el oxígeno. Parte del oxígeno se disuelve en el medio líquido y reacciona. Se considera que el líquido no es soluble en el gas por lo que la reacción tiene lugar únicamente en la fase líquida. [4]

En consecuencia, la reacción que tiene lugar en el interior del reactor es de tipo heterogénea fluido-fluido (gas-líquido), en la cual existe transferencia de materia desde la fase gas a la fase líquida. En este tipo de reacciones hay que tener en cuenta las siguientes etapas: [5]

- Difusión de los reactivos unos hacia otros.
- Reacción química.
- Difusión de los productos.

4.1. Teoría de la doble capa

Para determinar cómo se produce el contacto entra las fases en el reactor se hace uso de la *teoría de la doble capa de Lewis y Whitman (1924)*.

Inicialmente, es necesario indicar que las reacciones gas-líquido están formadas por una fase gas, una fase líquida y una interfase en la que tiene lugar la reacción. El modelo de la doble capa establece que la transferencia de materia del gas al líquido en la interfase se divide en dos zonas denominadas capas; en las que hay una resistencia al paso de las moléculas de una fase a la otra. Existe una capa para cada fase: la película gaseosa y la película líquida, en las que la transferencia del gas hasta la fase líquida se produce por difusión (régimen laminar). [5] [6] [7]

En el resto de la masa (fase líquida y fase gas) se considera con una agitación suficiente (régimen turbulento) que permite la difusión de las moléculas. En la *Figura 1* se describen gráficamente las distintas zonas en las que se produce el transporte entre fases. [5] [6] [7]

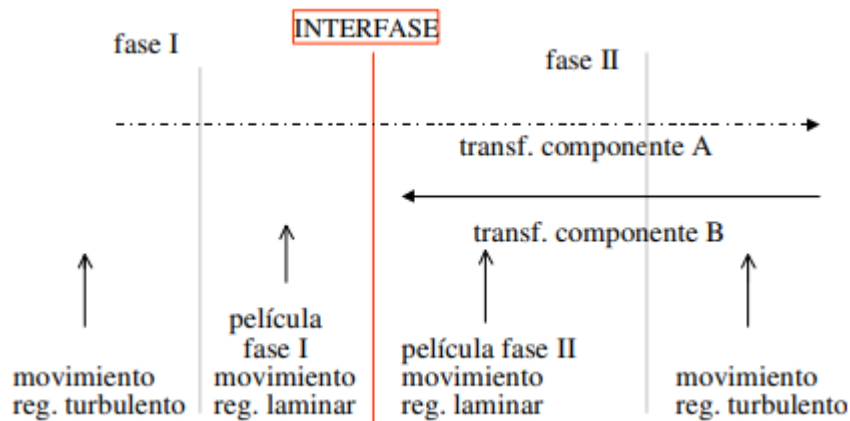


Figura 1. Modelo de la doble capa de Lewis y Whitman. Fuente: [5]

El transporte entre las fases es el siguiente: [7]

1. El gas se difunde desde la fase gas a la película de la fase gas. Existe resistencia a la transferencia del gas hacia la interfase.
2. El gas se transfiere desde la película del gas hasta la película del líquido. Esta resistencia suele ser despreciable.
3. El gas se transfiere desde la película del líquido hacia la fase líquida.
4. El gas se difunde a través de la fase líquida donde se encuentra la zona de reacción.

Una vez determinadas las zonas en las que puede haber resistencia a la transferencia de materia, se realizan las siguientes suposiciones para poder llevar a cabo el diseño del reactor en el siguiente apartado 4.2. *Etapa limitante*.

4.2. Etapa limitante

Entre los distintos casos establecidos para describir los regímenes cinéticos para el transporte de materia y para la reacción [4]; y con objeto de asumir una simplificación que permita realizar un correcto diseño de ámbito académico, se toman las siguientes consideraciones en base a lo establecido en la bibliografía.

- Se desprecia la resistencia a la película del gas debido a la agitación de la fase gas. [8]
- Comportamiento ideal de la fase gas. [8]
- Se considera que el oxígeno disuelto está en equilibrio con la interfase. [9]
- Se desprecia la resistencia a la transferencia de materia desde la película del líquido. [8]

En base a las consideraciones establecidas, se selecciona el caso H (*Figura 2*). Para reacciones lentas, en el cual es despreciable la resistencia a la transferencia de materia y la velocidad es la que establece la cinética química. Es decir, se considera como etapa más lenta la reacción química la cual pasa a ser la etapa limitante en el proceso. [4]

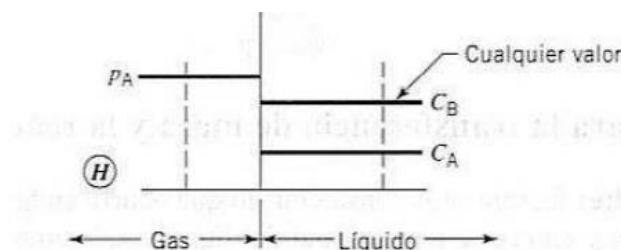


Figura 2. Caso H. Reacción lenta sin considerar la resistencia a la transferencia de materia. Fuente: [4]

4.3. Modelo para la fase líquida.

En los experimentos descritos en bibliografía, se escoge el modelo de flujo de dispersión axial para caracterizar la fase líquida [9]. El flujo axial es un modelo que define el flujo del fluido en un reactor de flujo pistón, cuando se producen desviaciones del flujo ideal: difusión molecular, distribución no uniforme del flujo como derivación, flujos de fuga, flujo estancado y retromezcla, etc. Es usado comúnmente para representar el flujo a través de reactores de lecho empacado. [10]

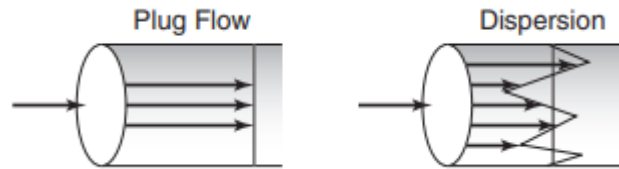


Figura 3. Perfiles de concentración en un flujo pistón ideal y un flujo pistón con dispersión axial. Fuente: [11]

Sin embargo, cuando están presentes fenómenos como la transferencia de materia o se tienen en cuenta las reacciones que ocurren en el reactor (fenómenos que no tienen lugar en otros equipos, por ejemplo, en intercambiadores de calor), el diseño aumenta notablemente su dificultad. [12]

A pesar de que el modelo de flujo pistón no logra describir el flujo real en su totalidad; para realizar un diseño simplificado, asequible a nivel académico, a la vez que riguroso, se decide optar por seguir el modelo de flujo pistón para hallar el volumen de reacción.

Para mitigar los posibles efectos no ideales del flujo en el reactor, el relleno estructurado situado en el interior del reactor contribuye a evitar las posibles desviaciones del flujo ya que evita la coalescencia de las burbujas.

4.4. Modelo para la fase gas

De acuerdo con lo indicado en la bibliografía y con lo expresado en el apartado 4.2 *Etapas limitantes del diseño del reactor R-101*, se considera un comportamiento ideal de la fase gas y el equilibrio del gas con la interfase. También se indica que la reacción tiene lugar únicamente en la fase líquida, por lo que es de vital importancia garantizar la máxima solubilidad del oxígeno a lo largo del volumen del reactor para obtener la mayor conversión posible.

La concentración del gas disuelta en la fase líquida, es decir, la solubilidad del oxígeno en el líquido se puede expresar mediante la siguiente correlación experimental propuesta por Mathías (1993). (Ecuación (11)):

$$[O_2] = \left(3,559 - 6,659 \cdot 10^{-3} \cdot T - 5,606 \cdot P_{O_2} + 1,594 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 + 1,498 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{P_{O_2}}{T} \right) \cdot (10^{-0,144I}) \quad (11)$$

En la que:

[O₂]: concentración de oxígeno disuelta en la fase líquida (mol/m³).

T: temperatura de operación (K).

P_{O2}: presión parcial de oxígeno en el reactor (bar).

I: fuerza iónica del medio líquido (mol/L) y toma un valor de 2. [2]

Para garantizar una concentración constante de oxígeno en todo el medio de reacción se decide alimentar la corriente de gas en exceso (aire enriquecido al 50% de oxígeno). Se toma como referencia los caudales de fase líquida y fase gas empleados en los experimentos de la bibliografía y se determina el caudal molar necesario de O₂ y N₂.

Así, se considera que dicho caudal es suficiente para que la concentración de oxígeno disuelta sea la máxima en cualquier punto de la sección longitudinal del reactor. [9]

En la siguiente *Tabla 3* se recoge la relación de caudales usados en el experimento y el caudal volumétrico y molar necesario en base al caudal de fase líquida real que entra al reactor.

Tabla 3. Relación entre caudales del experimento y cálculo del caudal de gas real. Elaboración propia. Fuente: [9]

Experimento			Real	
Caudal (L/min)	Valor	Relación caudal	Caudal (m ³ /s)	Valor
Caudal líquido	0,035	57,1	Caudal líquido	0,01
Caudal gas	2		Caudal gas	0,587

En el apartado 7 *Cálculos previos* del presente anexo se realizará el cálculo de los moles alimentados al reactor de cada compuesto de la fase gas, así como el exceso expresado en términos molares, teniendo en cuenta el oxígeno reaccionado estequiométricamente.

5. Selección del tipo de reactor

Es de vital importancia determinar el reactor más adecuado para albergar la oxidación de lignina a vainillina. Se trata de una reacción heterogénea gas-líquido, en la que la fase líquida está formada por lignina en disolución alcalina y la fase gas se compone de oxígeno y nitrógeno en igual proporción (aire enriquecido al 50% en O₂).

Este apartado es clave para el diseño del reactor. Se debe seleccionar la configuración adecuada para cumplir con los siguientes parámetros:

- Factores químicos. El reactor debe garantizar el tiempo de residencia necesario para obtener la conversión deseada.
- Factores de transferencia de materia. Se aplica a reacciones de carácter heterogéneo en las que se debe determinar el mecanismo que controla la difusión de las especies reaccionantes.
- Factores de transferencia de calor. Se debe tener en cuenta la necesidad de aportar o retirar calor en función de las características energéticas de la reacción.
- Factores de seguridad. El reactor debe garantizar las condiciones de seguridad necesarias en función de la peligrosidad de los reactantes y también debe asegurar el control de las condiciones de proceso. [13]

Se decide seleccionar un reactor tipo columna para llevar a cabo la reacción, gracias a que permite una mayor distribución de los tiempos de residencia frente a un reactor tipo tanque. Dentro de los reactores de tipo columna, existen numerosas configuraciones para las reacciones gas-líquido, tal y como se muestra en la *Figura 4*:

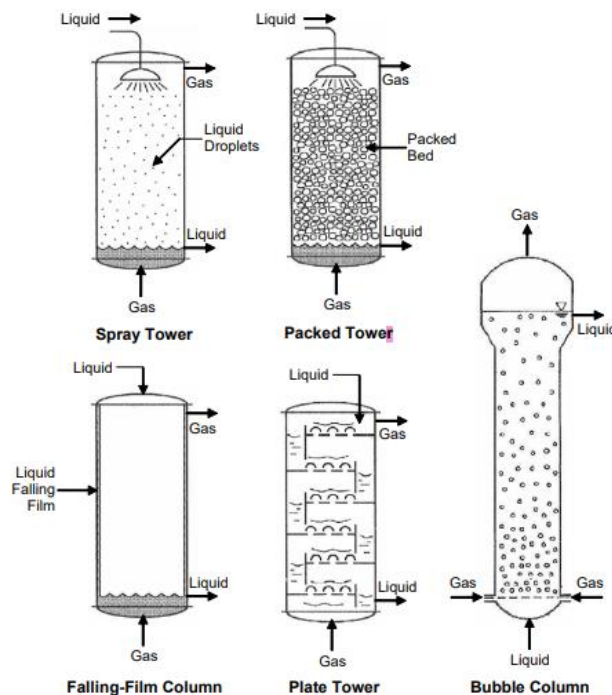


Figura 4. Tipos de reactores de columna. Fuente: [2]. Adaptación de Missen, Mims y Saville (1997); Levenspiel (1999) y Schluter y al. (1992)

A continuación, se recogen las características más importantes para cada configuración de columna (*Tabla 4*).

Tabla 4. Características de los tipos de columna. Elaboración propia. Fuente [2] [15]

Tipo de columna	Modelo de flujo	Características
Espray	Goteo de líquido a través de un flujo de gas en contracorriente	<ul style="list-style-type: none"> – Bajo tiempo de residencia – Gran interfase gas-líquido
Película ascendente	Fase líquida cae por la pared en forma de película en contracorriente con la fase gas	<ul style="list-style-type: none"> – Baja área interfacial – Bajo coeficiente de transferencia de materia
Relleno	Flujo continuo en contracorriente	<ul style="list-style-type: none"> – Sólidos para aumentar el contacto gas-líquido – Caída de presión variable en función del tipo de relleno y del flujo
Platos	Flujo en contracorriente. Líquido baja por gravedad. En cada plato el gas se dispersa en la fase líquida	<ul style="list-style-type: none"> – Gran área interfacial gas-líquido – Gran transferencia de materia – Uso en destilación o absorción
Burbujeo	Dispersión del gas en una fase líquida continua. Flujo en contracorriente o paralelo	<ul style="list-style-type: none"> – Alta área interfacial gas-líquido – Adecuada para reacciones lentas en las que la limitación está en la fase líquida – Fluidos con impurezas sólidas – Uso reacciones isotérmicas

En base a las características para cada configuración se decide adoptar el modelo de columna de burbujeo. Este modelo presenta una alta relación área volumen y permite operar con una fracción volumétrica de líquido (hold-up de líquido) alto; necesario para contrarrestar la baja solubilidad del oxígeno en el líquido. Su diseño y mantenimiento es sencillo con respecto a otros tipos de columnas y se recomienda su uso para reacciones exotérmicas como es el caso de la oxidación de lignina. [2]

Un parámetro muy importante en las columnas de burbujeo es el régimen de flujo ya que determina la hidrodinámica y el rendimiento de la columna. Este se clasifica en función de la velocidad de la fase gas a través de la columna. Hay tres tipos de flujos distintos, tal y como se observa en la *Figura 5*:

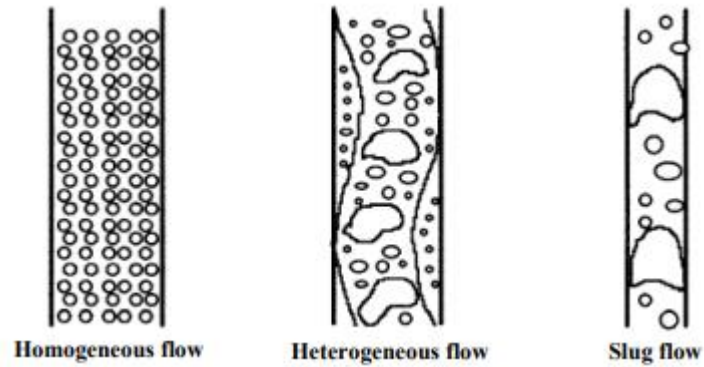


Figura 5. Flujo a través de la columna de burbujeo. Fuente: [14]

- Flujo homogéneo. Se produce para bajas velocidades de gas. Las burbujas están uniformemente distribuidas en el líquido. La distribución del tamaño de las burbujas está definida de forma relativamente nítida y asciende uniformemente a través de la columna. [14] [15]
- Flujo heterogéneo. Ante velocidades de gas más altas, las burbujas se unen y forman burbujas de mayor tamaño que ascienden a mayor velocidad a través de la columna. El flujo heterogéneo es muy común en la industria. [14] [15]
- Flujo globular (Slug Flow). Se forman burbujas que llegan a ocupar prácticamente toda la sección de la columna. Su uso se suele limitar a laboratorio y se produce en columnas de gran relación L/D. [14] [15]

Dentro de las columnas de burbujeo existen varias configuraciones (página siguiente):

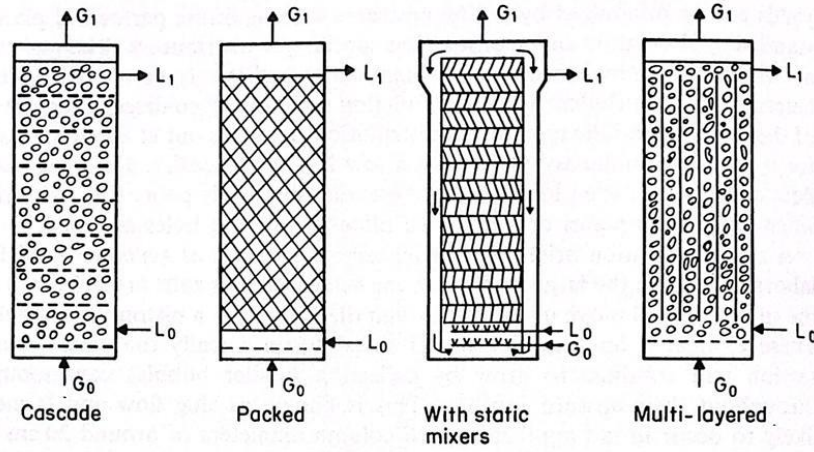


Fig. 1.4 Modified bubble column reactors

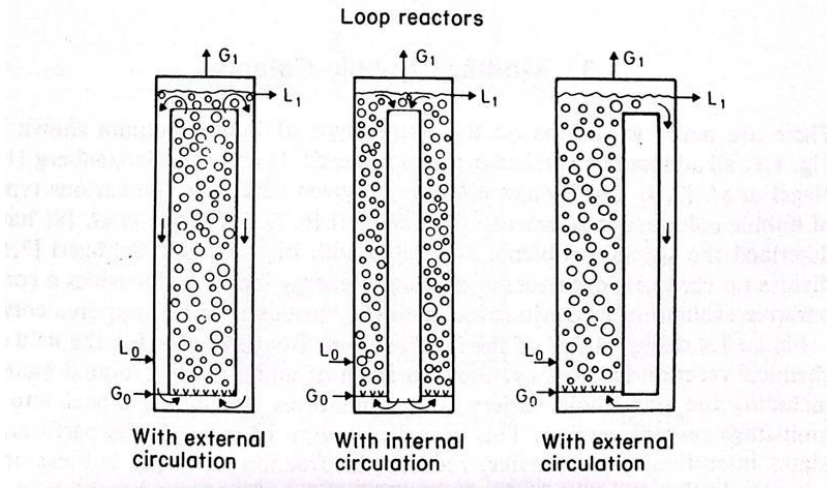


Figura 6. Tipos de columnas de burbujeo parte 1. Fuente: [14]

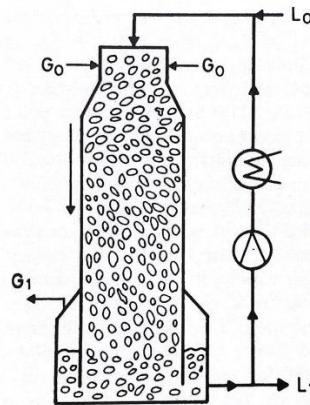


Fig. 1.8 Downflow bubble column

Figura 7. Tipos de columnas de burbujeo parte 2. Fuente [14]

De entre las configuraciones mostradas en la *Figura 6* y *Figura 7*, se escoge la columna de burbujeo empacada para el diseño del reactor R-101 (*Packed*). Esta configuración permite mantener mojado todo el relleno situado en el interior, lo que favorece el contacto entre fases y aumenta transferencia de materia. El estructurado también permite el control de la coalescencia de burbujas en el interior del reactor al disminuir la mezcla de la fase líquida (flujo de líquido muy aproximado a flujo pistón tal y como se establece en el apartado 4.3. *Modelo para la fase líquida.*)

Se descartaron el resto de las configuraciones por los siguientes motivos: Las columnas *downflow* necesitan velocidades de paso de líquido muy altas (>21 cm/s) para evitar la coalescencia de las burbujas, por lo que no es adecuado para el sistema presente en el proyecto debido a la caída de presión que podría originarse a esa velocidad. Por otro lado, su configuración es más costosa. Las columnas *loop* o de recirculación no son recomendables para obtener productos intermedios como es el caso de la vainillina. [2] [14]

En cuanto a columnas en cascada (*cascade*), están dispuestas de platos para disminuir la fracción de burbujas de gran tamaño, aumentar la transferencia de masa y evitar la retromezcla. Estas características son similares a las que ofrece la columna de burbujeo empacada. No obstante, se descarta esta opción por su mayor complejidad de construcción y un mantenimiento más complicado. [2] [14]

6. Selección del tipo de relleno

Las principales aportaciones que presenta el relleno en un reactor son: [13]

- Proporcionar una gran área superficial entre las fases.
- Presentar una estructura abierta para evitar la resistencia al paso del gas.
- Distribución uniforme del líquido en la superficie del relleno.
- Flujo uniforme de gas a través de la sección de la columna.

A nivel industrial, los dos tipos de relleno más usados son los rellenos aleatorios y rellenos estructurados. En sistema de reacción a diseñar, se desea evitar la caída de presión en el reactor para no afectar así a la solubilidad del oxidante en la fase líquida (depende de la presión parcial de O_2 , ergo depende de la presión en el interior del reactor). Por este motivo, se decide optar por un relleno estructurado para el diseño del reactor R-101, lo que se ve reflejado en un aumento de la transferencia de masa del oxidante a la fase líquida. También permite reducir la influencia negativa de la retromezcla en la conversión final del reactor. [2] [9] [15]

En concreto, se selecciona el relleno comercial de tipo estructurado *Mellapak 750Y*, el cual presenta las siguientes características recogidas en la *Tabla 5*:

Tabla 5. Características del relleno estructurado Mellapak 750Y. Elaboración propia. Fuente: [16]

Parámetro	Valor
Nombre comercial	MellapakPlus 750Y
Fabricante	Sulzer Chemtech Ltd.
Material	Acero inoxidable ASTM 316
Densidad material (kg/ m ³) [17]	7980
Superficie específica del relleno (m ² /m ³)	750
Fracción hueca del relleno, ϵ	0,95
Ángulo de inclinación de las hojas respecto del eje axial (° sexagesimal)	45

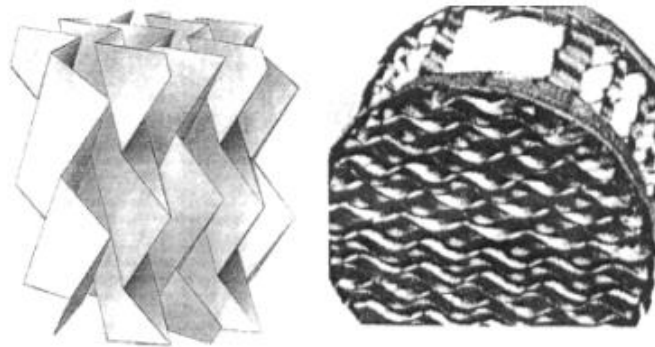


Figura 8. Relleno estructurado Mellapak 750Y. Fuente: [18]

7. Cálculos previos

7.1. Constantes cinéticas a la temperatura de operación

Las reacciones se producen en condiciones isotermas, por lo que es posible determinar la constante cinética para cada reacción en esas condiciones. La temperatura de operación es de 160°C (433K). Para ello se emplean las Ecuaciones (6), (8) y (10) recogidas en el Apartado 3. Modelo cinético. Los valores de las constantes se recogen en la siguiente Tabla 6:

Tabla 6. Constantes cinéticas a 433K. Fuente: [Elaboración propia]

Constante cinética a 433K	Valor
K ₁	3,98·10 ⁻⁴
K ₂	2,05·10 ⁻⁴
K ₃	1,51·10 ⁻⁴

7.2. Solubilidad del oxígeno

Se calculan los moles de oxígeno por cada m^3 de líquido empleando la correlación descrita en el apartado 4.4. *Modelo para la fase gas. (Ecuación (11))*. El cálculo se presenta en la *Tabla 7*.

Tabla 7. Cálculo de la concentración de oxígeno disuelta en la fase líquida. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Presión de operación (bar)	10
Temperatura (K)	433
Fuerza iónica (mol/L)	$1,51 \cdot 10^{-4}$
$[\text{O}_2]$ (mol/L)	0,0252
$[\text{O}_2]$ (mol/ m^3)	2,52

7.3. Exceso de oxígeno

Para determinar el caudal molar de oxígeno y de nitrógeno (aire enriquecido) alimentado en el experimento, se aplica la ley de los gases ideales.

El caudal volumétrico de gas está expresado en SLPM, correspondiente a las siglas en inglés *Standard liter per minute*. Es una unidad del flujo volumétrico en condiciones estándar de presión y temperatura (0°C de temperatura y 1 bar de presión). Como el caudal alimentado es el mismo tanto para oxígeno como para nitrógeno, y la presión se considera constante en todo el volumen de reacción; la presión parcial es la mitad de la presión total a la que fueron medidos: 0,5 bar.

Se calculan ambos caudales molares y se determina el exceso alimentado al reactor del oxígeno con respecto a los moles reaccionados de oxígeno. Los resultados se presentan en la *Tabla 8*.

Tabla 8: Oxígeno alimentado al reactor y exceso de oxígeno. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Caudal gas (L/s)	5870
Presión parcial (atm)	0,5
Temperatura (K)	273
R (atm L/K·mol)	0,082
Caudal molar O_2 (mol/s)	13,11
Caudal molar N_2 (mol/s)	13,11
Oxígeno reaccionado (mol/s)	0,605
Exceso O_2	21,65

8. Balances de materia

Es necesario calcular las dimensiones del reactor R-101 que permitan alcanzar el punto óptimo en el que se maximiza la conversión de vainillina. Para ello, se debe analizar la variación del flujo molar para cada componente a lo largo de un reactor de flujo pistón tal y como se ha indicado en el apartado 4.3. *Modelo para la fase líquida*. del presente anexo I.

Se parte del balance molar global, *Ecuación (12)*, tomando como suposición inicial la variación de la concentración (ergo, del caudal molar) en la dirección axial a lo largo del reactor. Como consecuencia, también varía la cinética de la reacción. Se supone un reactivo A para el desarrollo de las siguientes ecuaciones: [11]

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación} \quad (12)$$

$$F_A(V) + r_A \cdot \Delta V = F_A \cdot (V + \Delta V) + 0$$

Se halla la forma diferencial del balance molar en estado estacionario para un reactor de flujo pistón calculando el límite cuando $\Delta V \rightarrow 0$ (*Ecuación (13)*) [11]

$$\frac{dF_A}{dV} = -r_A \quad (13)$$

Se definen así los balances molares para cada compuesto presente en el mapa de reacciones recogido en el Apartado 2.1. *Química del proceso* del presente anexo. Se deben tener en cuenta las cinéticas de las *Reacciones (1), (2) y (3)* y la relación estequiométrica entre los compuestos.

$$\frac{dF_L}{dV} = -0,51 \cdot r_1 - 0,61 \cdot r_3 \quad (14)$$

$$\frac{dF_O}{dV} = -1,56 \cdot r_1 - r_2 - 1,5 \cdot 6r_3 \quad (15)$$

$$\frac{dF_V}{dV} = r_1 - r_2 \quad (16)$$

$$\frac{dF_{Sy}}{dV} = r_3 \quad (17)$$

$$\frac{dF_{VA}}{dV} = r_2 \quad (18)$$

$$\frac{dF_X}{dV} = 6,5 \cdot r_1 + 6,5 \cdot r_3 \quad (19)$$

$$\frac{dF_A}{dV} = -r_A \quad (20)$$

Por último, se define la *Ecuación (21)* de diseño para un reactor de flujo pistón a partir del balance molar de componente en un elemento de volumen (*Ecuación (13)*). [11]

$$\frac{dV}{F_{A0}} = \frac{dX_A}{-r_A} \quad (21)$$

En la que:

F_{A0} : caudal molar (mol/s)

X_A : conversión de la reacción referida a la lignina

$-r_A$: velocidad de consumo de la especie (mol/m³·s)

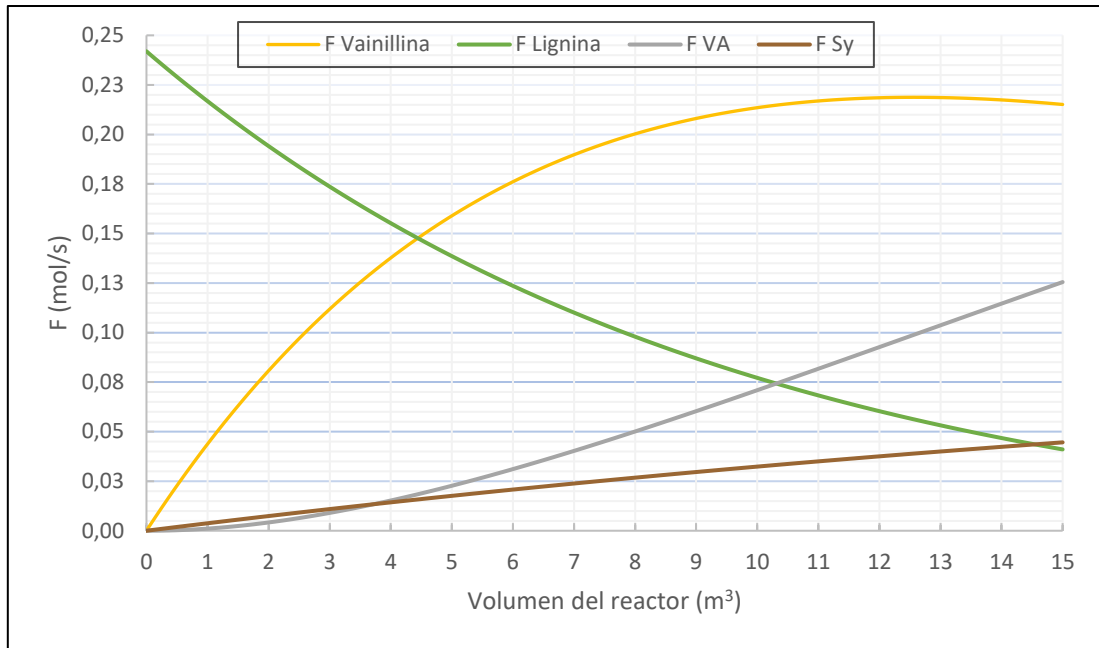
dV : volumen de reacción (m³)

En el sistema, no hay variación de flujo molar ni de NaOH ni de nitrógeno al no intervenir en la reacción, por lo tanto, el caudal molar es constante. La reacción es en fase líquida por lo que se considera un caudal de entrada constante.

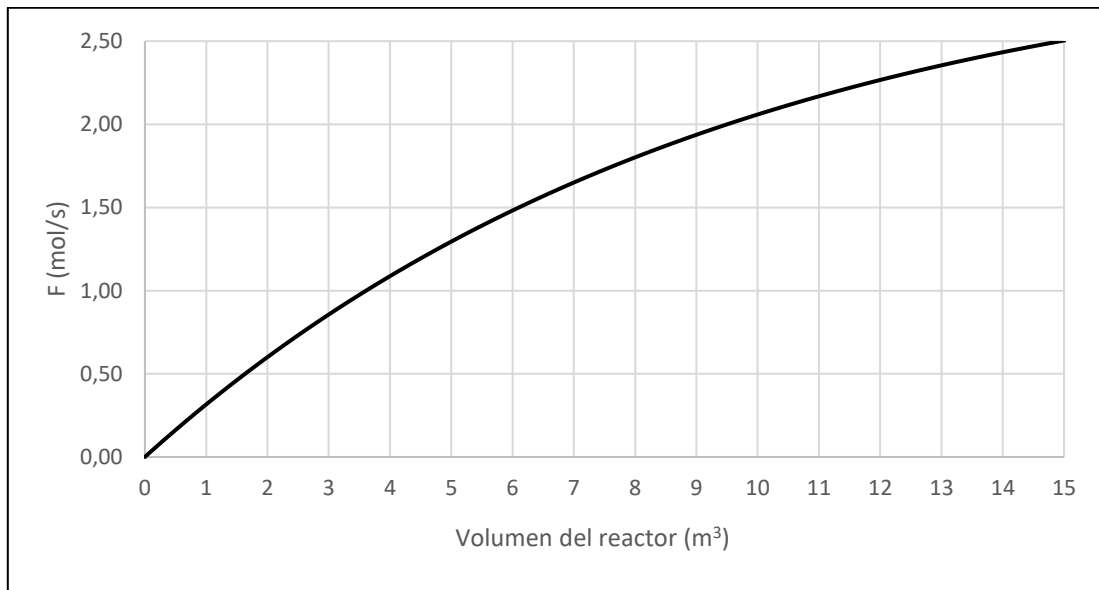
Mediante el uso del software Excel, se realiza un análisis numérico mediante el método de integración de la regla del trapecio, estableciendo un tamaño de paso (step) muy pequeño. Esto permite hallar una solución numérica de la integral definida en el balance molar para cada componente.

Se determina así la evolución de los caudales molares de cada compuesto a lo largo del reactor, en base a las condiciones de operación establecidas a través de las cinéticas definidas para cada reacción en el apartado 3. *Modelo cinético*. Esto permite determinar la conversión alcanzada por el sistema y las selectividades correspondientes a cada reacción con respecto a la lignina alimentada.

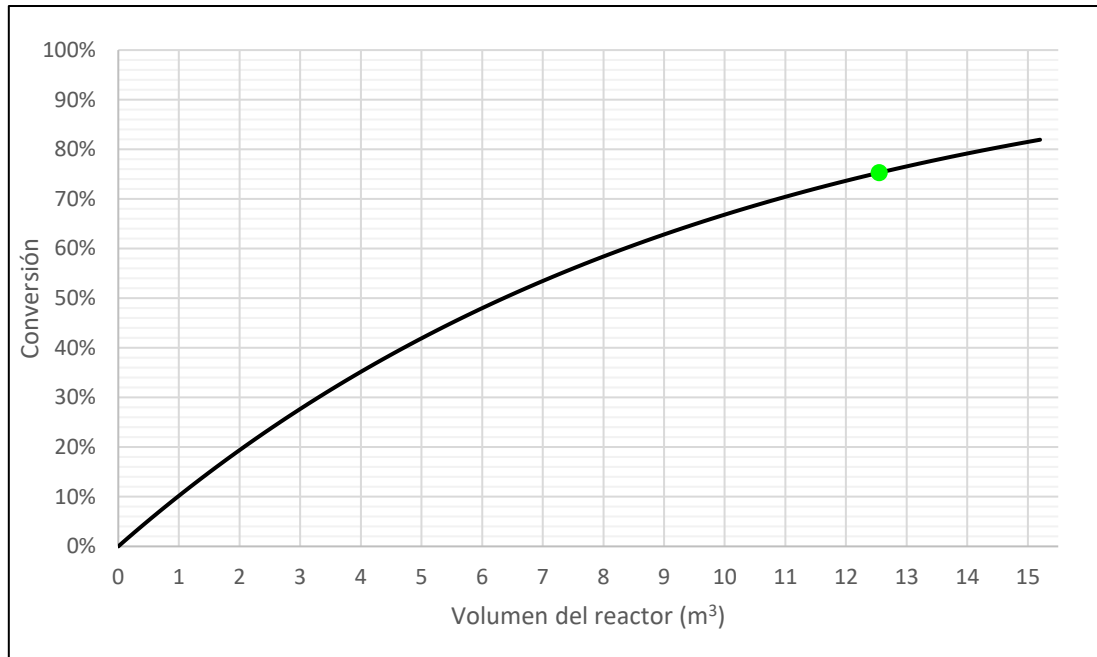
La evolución de los caudales molares de vainillina, siringaldehído, Ácido vainillínico y Lignina se presenta en la *Gráfica 1*. El caudal molar de los compuestos X se presenta en la *Gráfica 2*. Se opta por presentar dos gráficos para poder observar con claridad la evolución de cada flujo molar, ya que el caudal de compuestos equivalentes formados es mucho mayor, por lo que no permitiría apreciar correctamente el gráfico.



Gráfica 1. Variación de los caudales molares a lo largo del reactor. Fuente: [Elaboración propia].



Gráfica 2. Variación del caudal molar de X a lo largo del reactor. Fuente: [Elaboración propia].



Gráfica 3. Conversión de lignina a lo largo del reactor. Fuente: [Elaboración propia].

Se alcanza un pico de caudal molar de vainillina en la *Gráfica 1*, el cual determina el punto óptimo, es decir, la máxima cantidad de vainillina obtenida. Se determina así la conversión alcanzada (*Gráfica 3*) en ese punto tanto para la lignina como para la vainillina, las selectividades que permiten hallar los caudales molares de VA y Sy, y el volumen de reactor necesario para poder obtener estos valores.

Se obtienen los siguientes valores recogidos en la *Tabla 9*.

Tabla 9. Conversión y volumen obtenidos en el reactor R-101 para las condiciones de operación establecidas. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
Caudal vainillina (mol/s)	0,317
Conversión alcanzada lignina (%)	76,62
Conversión alcanzada vainillina (%)	31,10
Volumen de reacción (m³)	12,55

Por último, se recogen los caudales máxicos de entrada y salida al reactor R-101 en la *Tabla 10* en los que se puede comprobar que se cumple la ley de conservación de materia.

Tabla 10. Balance de materia en el reactor R-101. Fuente: [Elaboración propia].

	Entradas		Salidas	
	Fujo másico (kg/h)		Fujo másico (kg/h)	
Corrientes/ compuestos	C. 8 (líquido)	C. 15 (gas)	C.16 (gas)	C. 19 (líquido)
Vainillina	-	-	-	119,81
Siringaldehido	-	-	-	25,51
Agua	33.649,91	-	-	33.649,91
Lignina	2.025,07	-	-	471,37
NaOH	2.700,09	-	-	2.700,09
Ácido vainillínico	-	-	-	59,76
Compuestos X	-	-	-	1.418,35
Oxígeno	-	1.510,04	1.440,32	-
Nitrógeno	-	1.321,88	1.321,88	-
TOTAL	41207,00		41207,00	

9. Balance de Energía

Tras determinar el flujo molar para cada componente en el reactor, lo que permite calcular la conversión y el volumen de reacción necesario, se deben calcular los flujos energéticos presentes en el reactor R-101. Las tres reacciones que tienen lugar son de carácter altamente exotérmico.

Para la reacción de oxidación de lignina a vainillina, *Ecuación (1)* y la posterior degradación de vainillina a ácido vainillínico, *Ecuación (2)*, se dispone de los valores de la entalpía de reacción en los experimentos realizados en la bibliografía [1]. Ambas entalpías se recogen en la siguiente *Tabla 11*.

Tabla 11. Entalpías de formación de las reacciones 1 y 2. Fuente: Elaboración propia a partir de [9]

Reacción	ΔH (J/mol)
R1	$-2,97 \cdot 10^7$
R2	$-2,67 \cdot 10^5$

Fuente: [9]

9.1. Cálculo de la entalpía de la reacción 3 (L-Sy)

No se dispone del valor de entalpía de reacción de lignina para formar siringaldehído (*Ecuación (3)*), por lo que debe ser calculado. Se usa la siguiente expresión (*Ecuación (22)*):

$$\Delta H_R = \Delta H^\circ_R + \Delta C_P \cdot (T - R_R) \quad (22)$$

En la que:

ΔH_R : entalpía de la reacción (J/mol)

ΔH°_R : entalpía estándar de reacción (J/mol)

ΔC_P : variación de la capacidad calorífica (J/mol·K)

T: temperatura de operación del reactor, 433 (K)

T_R : temperatura de referencia (K)

Es necesario determinar previamente la entalpía de formación estándar de la reacción (298 K). Se calcula como la diferencia entre la entalpía de reacción de los productos menos la entalpía de formación de los reactivos, multiplicados por su respectivo coeficiente estequiométrico. Se muestra en la *Ecuación (23)*:

$$\Delta H^\circ_{R,j} = (\sum v_i \cdot H^\circ_{f,i})_{\text{reactivos}} - (\sum v_i \cdot H^\circ_{f,i})_{\text{productos}} \quad (23)$$

En la que:

$\Delta H^\circ_{R,j}$: entalpía de formación estándar (J/mol)

v_i : coeficiente estequiométrico de cada compuesto i en la reacción j

$H^\circ_{f,i}$: entalpía de formación de cada compuesto i

En la *Tabla 12* se muestran las entalpías de formación de cada compuesto, el coeficiente estequiométrico y la entalpía de formación estándar. [19] [20]

Tabla 12. Cálculo de la entalpía de formación estándar. Fuente: [Elaboración propia]

Compuesto	v_i	H° (J/mol)
Lignina [20]	0,61	-309.387,75
Oxígeno	1,56	0
Siringaldehído [19]	1	-596.000,00
Compuestos X [19]	6,5	-800
	ΔH°_3	-789.926,53

También se calcula la variación de la capacidad calorífica como la diferencia entre la capacidad calorífica de los productos y los reactivos. Se expresa según la *Ecuación (24)*:

$$\Delta C_{P,j} = (\sum v_i \cdot C_{P,i})_{\text{reactivos}} - (\sum v_i \cdot C_{P,i})_{\text{productos}} \quad (24)$$

En la que:

$C_{P,j}$: capacidad calorífica de cada compuesto a la temperatura media (J/mol · K)

v_i : coeficiente estequiométrico de cada compuesto i en la reacción j

En la *Tabla 13* se recogen las C_P para cada compuesto calculado a la temperatura media entre T_R y $T_{\text{operación}}$.

Tabla 13. Cálculo de la capacidad calorífica de la reacción. Fuente: [Elaboración propia]

Compuesto	v_i	C_P (J/mol·k)
Lignina [2]	0,61	4.515,68
Oxígeno [21]	1,56	29,842
Siringaldehido [19]	1	353,4
Compuestos X [2]	6,5	334,6
	ΔC_P	-4.012,58

Con estos datos calculados se halla la entalpía de formación de la *Reacción (3)* mediante la *Ecuación (22)*:

Tabla 14. Entalpía de la reacción 3 (L-Sy). Fuente: [Elaboración propia]

Reacción	ΔH_3 (J/mol)
R3	$-2,26 \cdot 10^6$

9.2. Cálculo del calor de reacción

Una vez determinadas las entalpías para las tres reacciones, se puede obtener el calor total liberado en el reactor haciendo uso de las masas reaccionantes. Éstas se pudieron determinar tras realizar el balance molar a cada componente con el que se determinó la conversión y las selectividades de cada reacción.

Se debe tener en cuenta que, para la masa reaccionante de la reacción 1, se deben sumar las selectividades de la reacción 1 (L-V) y la reacción 2 (V-VA). Esto se debe a que la selectividad está referida a la vainillina final formada, la cual es menor a la inicial ya que

parte de la vainillina formada se degrada en la reacción 2, en la que se produce la oxidación de vainillina a ácido vainillínico.

Los resultados se presentan en la *Tabla 15*.

Tabla 15. Cálculo del calor de reacción liberado por el reactor. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
ΔH_1 (kJ/kmol)	$-2,97 \cdot 10^7$
ΔH_2 (kJ/kmol)	$-2,67 \cdot 10^5$
ΔH_3 (kJ/kmol)	$-2,26 \cdot 10^6$
Conversión Lignina (%)	76,72
Selectividad L-V total formada (%) (S1+S2)	72,88
Selectividad L-VA (%) (S2)	27,12
Selectividad L-Sy (%) (S3)	12,78
F1 reaccionante (kmol/h)	0,487
F2 reaccionante (kmol/h)	0,355
F3 reaccionante (kmol/h)	0,085
Q1 (kJ/h)	$-1,45 \cdot 10^7$
Q1 (kJ/h)	$-9,49 \cdot 10^4$
Q1 (kJ/h)	$-1,923 \cdot 10^5$
Calor reacción (kJ/h)	$-1,47 \cdot 10^7$
Calor reacción (W)	$-4,10 \cdot 10^6$

En el apartado 12. *Sistema de refrigeración*, se explica detalladamente el sistema necesario para absorber todo el calor liberado por el reactor y mantener las condiciones isotermas de operación.

10. Dimensionamiento del reactor

Como se trata de una reacción heterogénea en la que intervienen dos fases (gas y líquido) el volumen de reacción calculado en el apartado 8. *Balances de materia* no se corresponde con el volumen total del reactor (V_T).

Es necesario determinar el volumen que ocupa el gas dentro de la columna de burbujeo empacada (V_G) al mismo tiempo que se debe tener en cuenta el volumen que ocupa el relleno estructurado Mellapak 750Y presente en el interior del reactor (V_R).

Por lo tanto, el volumen total del reactor se expresa mediante la *Ecuación (25)*.

$$V_T = V_L + V_R + V_G \quad (25)$$

En el que:

V_L : volumen de líquido o volumen de reacción (m^3)

V_R : volumen de relleno (m^3)

V_G : volumen que ocupa el gas: hold-up de gas (m^3)

V_T : volumen total del reactor (m^3)

10.1. Volumen del líquido

El volumen del líquido o volumen químico ha sido calculado en el apartado 8. *Balances de materia* de este anexo en el que se ha aproximado fase líquida a un modelo de flujo pistón. Para obtener el flujo molar de vainillina óptimo, el volumen del líquido, V_L es de $12,55 m^3$.

En base a lo establecido en las heurísticas, se selecciona una relación Longitud-Diámetro (L/D) de 4 por lo que el tanque en el que se llevaría a cabo esta reacción tendría las siguientes dimensiones especificadas en la *Tabla 16*:

Tabla 16. Dimensiones del volumen de reacción. Fuente: [Elaboración propia]

Volumen líquido (m^3)	12,55
Longitud (m)	6,3468
Diámetro (m)	1,5867
Sección (m^2)	1,9774

10.2. Volumen del relleno Mellapak 750Y

Se determina el volumen del estructurado presente en el interior del reactor. Se hace uso de una característica de este tipo de relleno: la fracción hueca o porosidad. Considerando inicialmente como volumen total el volumen de reacción, se obtiene la *Ecuación (26)*:

$$V_R = \frac{V_T}{\varepsilon_R} - V_T \quad (26)$$

En la que:

ε_R : fracción hueca del relleno, 0,95.

V_T : volumen total del reactor (m^3)

V_R : volumen que ocupa el relleno (m^3)

Como valor inicial se considera V_T igual a V_L y se obtiene un **volumen de relleno de $0,66 m^3$** .

También es necesario definir el cálculo de la sección transversal del relleno estructurado ya que será necesario para determinar la velocidad del gas. Se presenta en la *Ecuación (27)*:

$$S_R = S_T \cdot (1 - \varepsilon_R) \quad (27)$$

En la que:

- S_R es la sección transversal que representa el relleno (m^2).
- S_T es la sección del reactor (m^2).

Al igual que para el cálculo del volumen del relleno, inicialmente se toma la sección total del V_L con $L/D = 4$ como la sección del volumen del reactor. Se obtiene así una **sección de $0,09 m^2$** .

10.3. Volumen del gas (hold-up gas)

El volumen del gas, expresado como hold-up del gas (fracción volumétrica que ocupa el gas en el reactor), en columnas de lecho empacado suele ser pequeño debido a que el líquido moja una superficie importante del reactor, ocupando gran parte del su volumen. Se define en la *Ecuación (28)*:

$$\varepsilon_G = \frac{V_G}{V_G + V_L} \quad (28)$$

Existen gran cantidad de correlaciones desarrolladas por numerosos investigadores que permiten determinar el hold-up del líquido en una columna; pero pocos estudios se centran en determinar el hold-up del gas. Para este cálculo, se seleccionó la siguiente correlación propuesta por Yang et al. (1990) (*Ecuación (29)*) presente en la bibliografía. [2]

$$\varepsilon_G = 0,16 \cdot \frac{u_G}{u_G + u_L} \quad (29)$$

En la que:

ε_G : hold-up del gas

u_G : velocidad superficial del gas (m/s)

u_L : velocidad superficial del líquido (m/s)

Se define la velocidad superficial del gas y del líquido con las siguientes *Ecuaciones (30)* y *(31)*:

$$u_G = \frac{v_G}{S_T + S_R} \quad (30)$$

$$u_L = \frac{v_L}{S_T + S_R} \quad (31)$$

En las que:

S_T : sección transversal del reactor (m^2).

S_R : sección transversal que ocupa el relleno. Se calcula como la sección total por la fracción hueca del relleno (m^2).

Se parte de las dimensiones iniciales del volumen de reacción recogidas en la *Tabla 16* y se obtienen estos valores iniciales de velocidad de gas y líquido. Con la *Ecuación (29)* se halla el hold-up del gas y despejando de la *Ecuación (28)* se determina el volumen que ocupa el gas.

Tabla 17. Hold-up de gas y volumen de gas en el reactor R-101. Fuente: [Elaboración propia]

Fluido	Velocidad superficial (m/s)
Gas	0,312
Líquido	0,0055
Hold-up gas	0,182
Volumen gas (m^3)	2,786

Una vez calculados los volúmenes, se determina el volumen total del reactor. Los resultados se muestran en la *Tabla 18*.

Tabla 18. Volúmenes calculados iteración 1. Fuente: [Elaboración propia].

Volumen	Valor (m^3)
Líquido	12,55
Relleno	0,661
Gas	2,786
Total	15,552

10.4. Dimensiones del reactor

Se deben recalcular las dimensiones teniendo en cuenta una relación L/D de 4. Con estos nuevos datos se inicia un proceso iterativo en el que se calculan de nuevo todos los parámetros explicados anteriormente con el volumen total calculado en la primera iteración y sus dimensiones (longitud, diámetro, sección). El proceso de iteración finaliza en el momento en que el volumen recalculado coincida con el volumen de partida de la iteración. Se necesitaron cuatro iteraciones hasta que converger el proceso. Los resultados obtenidos se muestran en la *Tabla 19*.

Tabla 19. Dimensiones finales del reactor. Fuente: [Elaboración propia]

Datos iniciales iteración 4		Datos finales	
Volumen (m ³)	15,719	Volumen (m ³)	15,719
Longitud (m)	6,841	Longitud (m)	6,842
Diámetro (m)	1,710	Diámetro (m)	1,710
Sección (m ²)	2,300	Sección (m ²)	2,300

Como se puede comprobar, el volumen final obtenido en la 4ª iteración coincide con el volumen usado como dato inicial, es decir, el cálculo ha convergido y se da la iteración por finalizada.

11. Caída de presión

Un parámetro muy importante a tener en cuenta es la caída de presión en la columna de burbujeo, debida a la fricción entre el líquido y el relleno estructurado situado en su interior. Para tener en cuenta la presencia de dos fases en la columna, el flujo de ambas, y también las características del relleno, se decide usar la siguiente correlación para reactores de flujo bifásico con relleno empacado. [22]

$$f(th) = \frac{\Delta P}{h} \cdot \left(\frac{2\varepsilon}{3(1-\varepsilon)} d_p \right) \frac{\rho_G}{2G^2} \quad (32)$$

$$\ln f(th) = 8 - 1,12(\ln z) - 0,0769(\ln z)^2 + 0,0152(\ln z)^3 \quad (33)$$

$$z = \frac{Re_G^{1,167}}{Re_L^{0,767}} \quad (34)$$

En las que:

F: factor de fricción (ad).

Re_G y Re_L: número de Reynolds teniendo en cuenta el diámetro de la partícula (ad).

h: altura del reactor (m)

ε : porosidad del relleno: 0,95.

G: mass flux, resultado de la multiplicación de la densidad por la velocidad del gas: 2,24 kg/m²·s

ρ_G : densidad del gas (kg/m³)

d_p : diámetro de partícula (m)

Para estimar el diámetro de partícula equivalente al relleno del que se dispone en la columna, se usa la *Ecuación (35)*. [2]

$$d_p = \frac{4 \cdot \varepsilon}{a_p} \quad (35)$$

En la que:

a_p : superficie específica del relleno, 750 (m⁻¹)

d_p : diámetro de partícula (m).

ε : porosidad del relleno: 0,95.

El diámetro de partícula equivalente hallado es el siguiente.

Tabla 20. Diámetro equivalente del Mellapak 750Y. Fuente: [Elaboración propia]

d_p (m)	0,0051
-----------------------------	---------------

Se determinan los números de Reynolds de partícula mediante las *Ecuaciones (36) y (37)*

$$Re_L = \frac{\rho_L \cdot u_L \cdot d_p}{\mu_L} \quad (36)$$

$$Re_G = \frac{\rho_G \cdot u_G \cdot d_p}{\mu_G} \quad (37)$$

En las que:

P: densidad del fluido (kg/m³)

u: velocidad del fluido (m/s)

d_p : diámetro de partícula

μ : viscosidad del fluido (kg/m·s)

En la *Tabla 21* se presentan las propiedades del gas y del líquido junto con el Reynolds para cada uno de ellos y el parámetro z, propio de la correlación empleada. La viscosidad del gas se determinó a partir de la ecuación de los gases ideales para las condiciones de operación del reactor (10 bar, 160°C)

Tabla 21. Parámetros necesarios para determinar la caída de presión en la columna de burbujeo. Fuente: [Elaboración propia]

Líquido		Gas	
ρ (kg/m ³)	1037,83	ρ (kg/m ³)	8,40
u (m/s)	0,004	u (m/s)	0,269
μ (kg/m·s) [2]	0,00134	μ (kg/m·s)	$2,44 \cdot 10^{-5}$
Re	18,51	Re	466,25
Parámetro z		138,71	

Con estos valores se determina la caída de presión en la columna (*Tabla 22*):

Tabla 22. Caída de presión en el reactor R-101. Fuente: [Elaboración propia].

Caída de presión (Pa)	1458,7
------------------------------	---------------

El valor hallado es inferior al proporcionado por la bibliografía (5300 Pa) [2], calculado con otra correlación, pero se encuentra dentro del mismo orden de magnitud por lo tanto se toma como válido y coherente en referencia al dato bibliográfico.

En base a los resultados obtenidos, se desprecia la caída de presión en la columna debido a su bajo valor con respecto a la presión de operación de 10 bar (**1.000.000,00 Pa >>> 1458,7 Pa**).

12. Sistema de refrigeración

12.1. Tipo de camisa

Existen dos configuraciones típicas para las camisas de refrigeración tal y como se observa en la *Figura 9*.

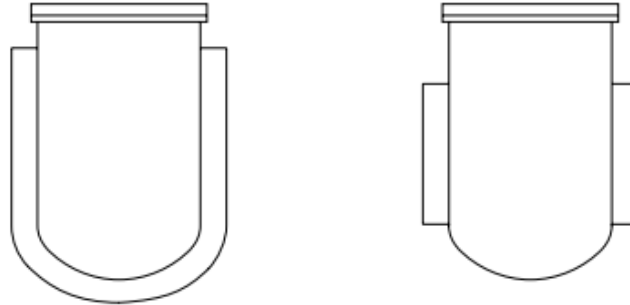


Figura 9. Configuraciones típicas de las camisas. Fuente: [13]

Para el reactor R-101 se escoge la segunda configuración en la que la camisa solo rodea al área lateral del reactor. El flujo a través de la camisa puede ser de varios tipos:

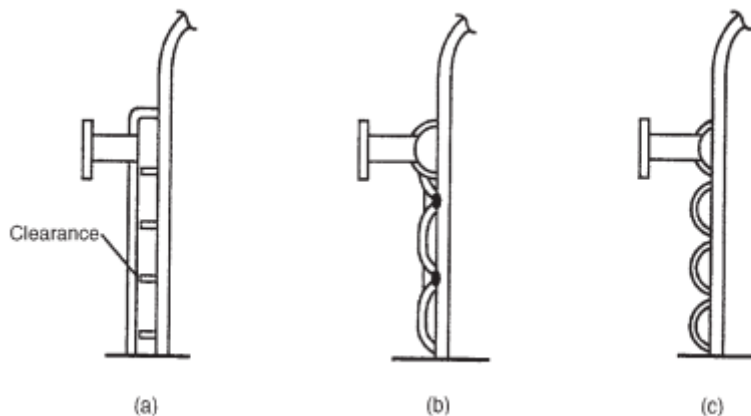


Figura 10. Tipos de camisas. Fuente: [13]

- Camisas convencionales.** Consisten en un cilindro exterior que rodea al reactor a través del cual circula el fluido refrigerante o calefactor. Pueden estar dispuestas de deflectores para aumentar la velocidad del líquido y mejorar la transferencia de calor. [13]
- Camisas con hoyuelos (*dimpled*).** Similares a las convencionales, pero con un espesor menor y están dispuestas de hoyuelos para aumentar el contacto y así mejorar la transferencia. [13]
- Camisas de media tubería (*half pipe*).** Tubería cortada a la mitad de su eje longitudinal, soldada a la pared del reactor. [13]

Se decide seleccionar la camisa de refrigeración de media tubería debido a las altas condiciones exotérmicas de las reacciones que participan en el proceso.

12.2. Cálculo del caudal de refrigerante

Para determinar el caudal de refrigerante en primer lugar se debe seleccionar el tipo de refrigerante utilizado. Para poder retirar todo el calor liberado en la reacción, el área de intercambio de calor debe coincidir con el área de la pared lateral del reactor.

El área se calcula según la *Ecuación (38)*.

$$\dot{Q} = U \cdot A \cdot \Delta T_{ml} \quad (38)$$

En la que:

Q: flujo de calor (W)

U: coeficiente global de transmisión de calor ($\text{W}/\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$)

A: área de intercambio de calor (m^2)

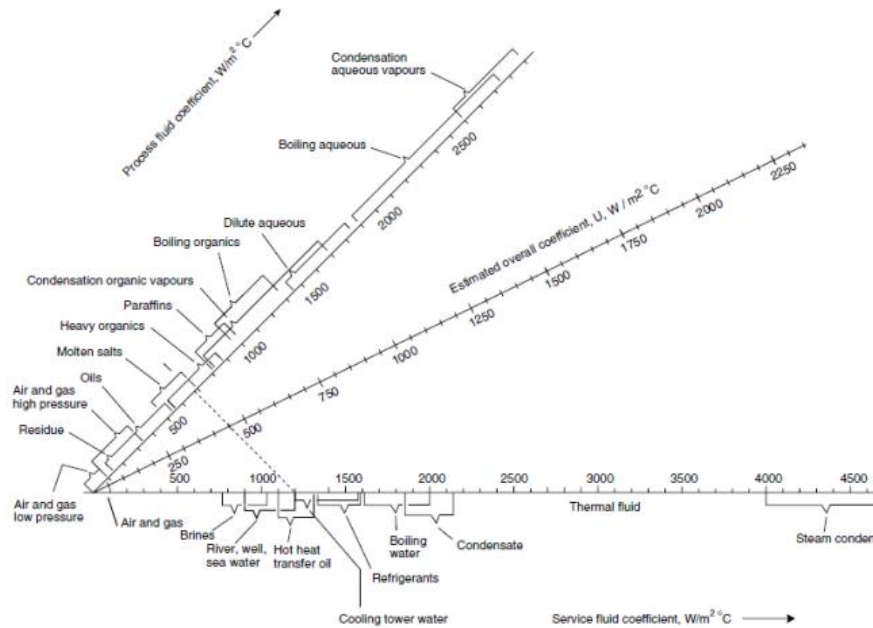
ΔT_{ml} : temperatura media logarítmica ($^\circ\text{C}$)

El fluido más común es el agua de refrigeración, debido a su bajo coste y su alta disponibilidad. No obstante, las características energéticas del mapa de reacciones, altamente exotérmicas, pueden sugerir el uso de otro tipo de fluido refrigerante. Los cálculos realizados confirman las predicciones teóricas, haciendo imposible el empleo de agua de refrigeración y teniendo que buscar otro fluido alternativo. Se decide optar por un fluido térmico, en concreto el DowTherm A, cuyas propiedades se presentan en la *Tabla 23*. [23]

Tabla 23. Propiedades del fluido refrigerante DowTherm A. Fuente: Elaboración propia a partir de [23].

Parámetro	Valor
Densidad (kg/m^3).	1003,2
Cp a 90°C ($\text{J}/\text{kg} \cdot \text{K}$).	1772

El coeficiente U, dato necesario para hallar el área en la *Ecuación (38)*, se puede estimar empleando la *Figura 36*, en la que el valor de U depende del fluido de proceso y del fluido de servicio (calefactor o refrigerante).



ΔT_{ml} se puede determinar según la *Ecuación (39)*:

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln\left(\frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1}\right)} \quad (39)$$

En la que:

T_1 : temperatura de entrada del fluido caliente (K)

T_2 : temperatura de salida del fluido caliente (K)

t_1 : temperatura de entrada del fluido frío (K)

t_2 : temperatura de salida del fluido frío (K)

Se debe determinar la variación de temperatura del fluido frío (refrigerante) para que el área de intercambio de calor coincida con el área externa de la carcasa. Dichas temperaturas están limitadas a causa de la integración energética que se realiza para enfriar el circuito cerrado de caudal de refrigerante:

La corriente 6 de entrada al intercambiador E-101 se encuentra a 25°C. Con la energía liberada por el reactor, su temperatura asciende hasta los 115,42 °C por lo que el fluido refrigerante debe entrar en el intercambiador a una temperatura superior a 115,42°C y salir a una temperatura superior a 25°C para así poder calentar el fluido de la corriente 6 desde su temperatura de entrada hasta su temperatura de salida. Esto define un ΔT mínimo de al menos 90°C. Otra limitación es la temperatura del fluido caliente (T en el reactor) la cual debe ser constante para garantizar las condiciones isotermas.

Mediante una iteración se determinan las temperaturas de entrada salida del DowTherm A que cumple estas condiciones. Se considera un error a la unidad para determinar temperaturas absolutas (sin decimales) de entrada y salida de refrigerante. Los resultados obtenidos se recogen en la *Tabla 24*:

Tabla 24. Condiciones necesarias para mantener la temperatura del reactor constante. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
Q (W)	$4,1 \cdot 10^6$
U (J/mol K)	1400
T1 (°C)	433
T2 (°C)	433
t1 (°C)	28
t2 (°C)	118
ΔT_{ml} (°C)	78,59
A intercambio de calor (m ²)	≈ 37
A externa reactor (m ²)	≈ 37

Una vez determinada la ΔT_{ml} se puede calcular el caudal de fluido refrigerante gracias a la Ecuación (40) del balance de energía:

$$\dot{Q} = m \cdot C_p \cdot \Delta T \quad (40)$$

En la que:

m: caudal de DowTherm (kg/s)

C_p: capacidad calorífica a la temperatura media (J/kg·K)

ΔT : variación de temperatura que experimenta el fluido (°C)

Se obtiene un **caudal de refrigerante de 25,68 kg/s.**

13. Distribuidor de gas

13.1. Tipos y selección

Para el correcto burbujeo del gas a través del reactor, es necesario introducir un distribuidor de gas que reparta el flujo de gas de manera uniforme. Se dividen principalmente en dos tipos de distribuidores:

- Toberas y tapas: Se emplean para condiciones de operación extraordinarias como pueden ser altas temperaturas o atmosferas muy reactivas. Existen varias configuraciones en función de si se busca una buena distribución del gas, evitar que las partículas sólidas taponen las toberas de salida del gas, etc.
- Platos de perforados o multiorificio. Son muy usados a nivel industrial gracias a su sencilla construcción y bajo coste. En la *Figura 11*, se recogen varios tipos:

Figura 11. Tipos de platos perforados. Fuente [24]



- a) Plato de perforados tipo sándwich.
- b) Plato perforado escalonado.
- c) Plato perforado cóncavo.
- d) Barras de rejilla.

Para el reactor diseñado se decide instalar un **plato de perforados tipo sándwich**, debido a su bajo coste y a que no se desarrollan condiciones de operación extremas en cuanto a presión y temperatura. Se descarta el uso de distribuidores de toberas debido a su alto coste y a que el reactor ya dispone de un relleno estructurado para garantizar la correcta distribución de gas y su contacto con la fase líquida.

13.2. Diseño y dimensionamiento del distribuidor de gas

13.2.1. Cálculo de la velocidad del gas a través del plato y del número de orificios.

De acuerdo con la bibliografía [24], se realizan los siguientes cálculos para determinar los parámetros del distribuidor de platos perforados. En un primer lugar se debe calcular la velocidad de paso del gas a través de los orificios. Para ellos se hace uso de la *Ecuación* (41).

$$u_0 = \frac{\pi}{4} \cdot d_{or}^2 \cdot u_{or} \cdot N_{or} \quad (41)$$

En la que:

u_0 : velocidad del gas a través del orificio (m/s)

d_{or} : diámetro del orificio (m)

u_{or} : velocidad en el orificio (m/s)

N_{or} : número de orificios

La velocidad del orificio es un valor arbitrario basado en la experiencia que establece que una velocidad u_0 para platos perforados oscila entre 30-60 m/s. Se decide seleccionar el valor más bajo ya que no es necesario que el flujo de gas sostenga el relleno como ocurre en los lechos fluidizados o cuando se dispone de relleno común.

Se selecciona un diámetro de orificio en la *Tabla 25*. Para cada diámetro hay un número de orificios por unidad de superficie, el cual será recalculado posteriormente para hallar

los orificios reales totales en la sección superficial del plato (coincidente con la sección interna del reactor).

Tabla 25. Relación entre el diámetro y el número de orificios. Fuente: Elaboración propia a partir de [24]

Diámetro del orificio (m)	Número de orificios (m ⁻²)
0,001	16900
0,002	4200
0,004	1060

Se supone un diámetro de orificio de 0,002 m y 4200 orificios por m². Los resultados obtenidos se presentan en la *Tabla 26*.

Tabla 26. Resultado de la velocidad del gas a través de los orificios del plato. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
u _{or} (m/s)	30
d _{or} (m)	0,002
N _{or} (m ⁻²)	4200
u₀ (m/s)	0,3958

Se determina el área del plato con el diámetro interno del reactor, por lo que coincide con la sección transversal del mismo. Conocida el área del plato y el número de orificios por unidad de superficie, se determina el número de orificios totales para un diámetro de 2 mm mediante la *Ecuación (42)*.

$$N_{\text{orificios totales}} = A_{\text{plato}} \cdot N_{\text{or}} \quad (42)$$

El resultado obtenido se muestra en la *Tabla 27*.

Tabla 27. Número de orificios en el plato de perforados. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
A _{plato} (m ²)	2,30
N _{or} (m ⁻²)	4200
Norificios totales	9650

13.2.2. Cálculo de la caída de presión en el plato

Conocida la velocidad a través del orificio, se puede determinar el número de Reynolds, parámetro necesario para determinar la caída de presión en el plato. Su expresión es la *Ecuación (43)*.

$$Re = \frac{d_i \cdot u_0 \cdot \rho_g}{\mu_g} \quad (43)$$

En la que:

Di: diámetro interno del reactor (m)

u_0 : velocidad del gas a través del reactor (m/s)

ρ_g : densidad del gas (kg/m^3)

μ_g : viscosidad del gas ($\text{Pa}\cdot\text{s}$)

El valor del Reynolds permite hallar el coeficiente del orificio $C_{d,or}$. En la *Tabla 28* se presentan los valores del coeficiente para valores de Reynolds.

Tabla 28. Distintos valores del coeficiente en función del Re. Fuente: [Elaboración propia].

Reynolds a través del plato	$C_{d,or}$
1000	0,64
2000	0,61
>3000	0,60

Con el coeficiente del orificio se puede calcular la caída de presión en el orificio despejando la variable $\Delta P_{orificio}$ de la *Ecuación (44)*.

$$u_{or} = C_{d,or} \cdot \sqrt{\left(\frac{2 \cdot \Delta P_{orificio}}{\rho_g}\right)} \quad (44)$$

La caída de presión total en el plato es el resultado de la multiplicación de la caída de presión en el orificio por el número de orificios calculado en el apartado anterior (*Ecuación (45)*):

$$\Delta P_{orificio} = N_{orificios\ totales} \cdot \Delta P_{orificio} \quad (45)$$

Se obtienen los siguientes resultados recogidos en la *Tabla 29*.

Tabla 29. Caída de presión en el plato de perforados. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
Re	231.691,43
C _{d,or}	0,6
$\Delta P_{\text{orificio}}$ (Pa)	1,815
N _{orificios} totales	9650
ΔP_{total} (Pa)	17.513,95
ΔP_{total} (bar)	0,0175

14. Diseño mecánico del reactor R-101

El reactor del presente proyecto opera a una presión constante de 10 bar, por lo que su diseño se basa en un recipiente a presión según el código ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VII, Rules for the Construction of Pressure Vessel (ASME BPV Sec. VIII. D.1.)

14.1. Presión de diseño

La presión de diseño del recipiente a presión en el que se aloja la reacción debe contemplar un cierto margen por encima de la presión de operación máxima (10 bar). Se establece en el máximo entre un 10% por encima de dicha presión o 25 psi. [13]

Si se considera un 10% se obtiene una presión de diseño de 1,1 bar. En el caso de 25 psi que se corresponden con 1,7237 bar, se obtiene una presión de diseño de 11,73 bar. Calculadas ambas presiones, se decide que la presión de diseño del reactor es de **11,72 bar**.

14.2. Temperatura de diseño

En base al código ASME BPV Sec. VIII. D.1 la temperatura máxima de diseño de un tanque a presión es la temperatura de operación más alta esperada más 50°F. También se puede determinar en función de la temperatura mínima esperada; no obstante, para el reactor R-101 se debe aplicar la máxima al producirse varias reacciones exotérmicas.

Para una temperatura de operación de 160°C la temperatura más alta de diseño es ese valor más 50°F (10°C). El resultado muestra una temperatura de diseño de **170°C**.

14.3. Selección del material de operación

El material seleccionado para el reactor R-101 se fundamenta en la metodología Ashby. Los recipientes a presión siguen dos criterios de diseño. [25]

- Deformación antes de ruptura (Yield before break). Usualmente empleado para recipientes de pequeño tamaño.
- Vertido antes de ruptura (Leak Before Break). La grieta que se forma tiene una longitud mayor al espesor del tanque; por lo que puede ser fácilmente detectada y la fuga generada libera la presión de forma progresiva, es decir, se mantiene estable, lo que es más seguro.

Al tratarse de un recipiente de gran tamaño se decide aplicar a la selección del material del reactor R-101 el segundo criterio. El parámetro clave que debe ser maximizado es el índice del material, expresado en la siguiente *Ecuación* (46). [25]

$$M_1 = \frac{K_{1c}^2}{\sigma_f} \tag{46}$$

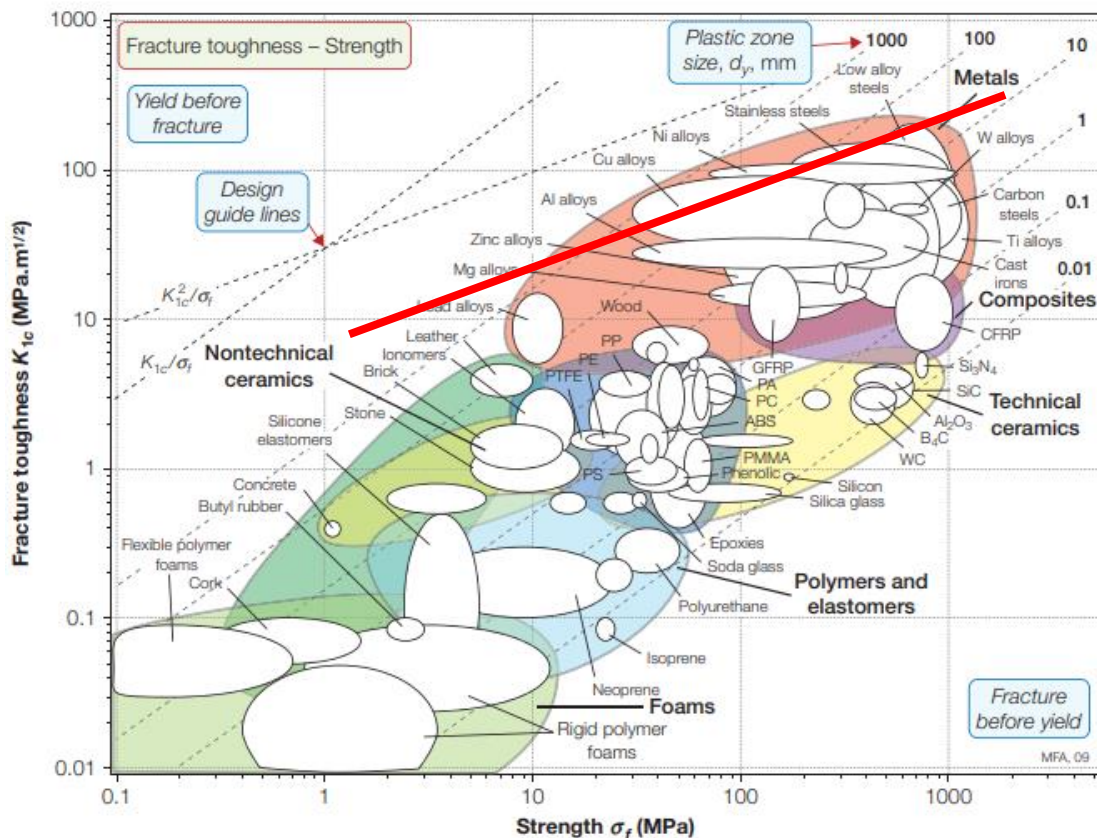
En la que:

K_{1c}^2 : tenacidad de fractura

σ_f : límite elástico

Se emplea este índice en la *Figura 12*, en la que se relaciona el módulo de Young con la densidad de varios materiales. Se traza una paralela a la recta diagonal de puntos cuya pendiente es M_1 , para así hallar el material de construcción que maximice el índice de material. [25]

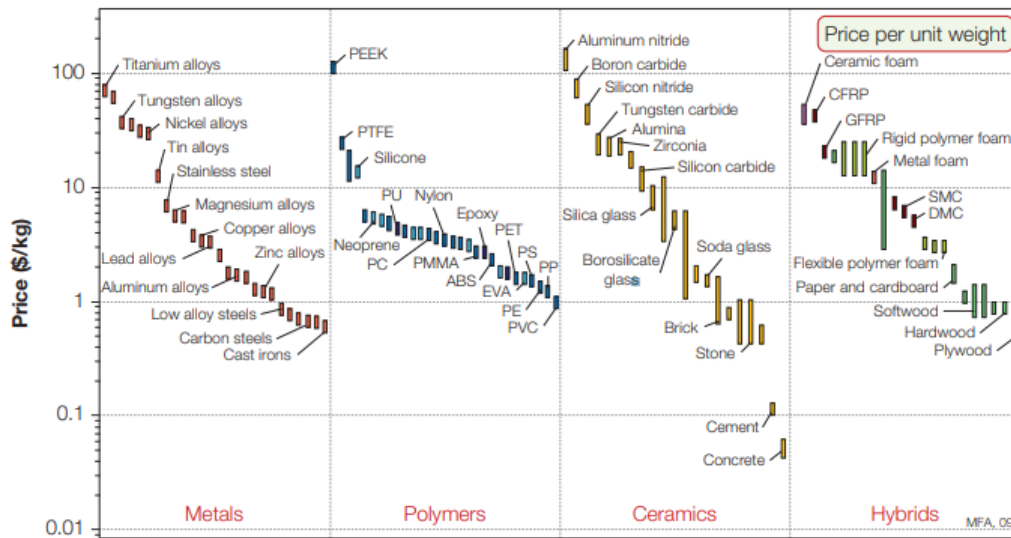
Figura 12. Diagrama de lóbulos: Tenacidad vs límite elástico. Fuente: [26]



Los materiales que maximizan M_1 son aquellos que se encuentran en la zona superior delimitada por la línea roja (paralela a la recta del índice de material del criterio seleccionado). Se corresponden con aleaciones de cobre (*Cu alloys*), níquel (*Ni alloys*), aceros inoxidable (*Stainless steels*) y aceros con bajo contenido en carbono (*Low Alloy steels*).

Se decide determinar el material de construcción en función de su coste y de la resistencia a la corrosión. En la *Figura 13* se muestran los precios por unidad de masa para cada material. Se trata de una estimación ya que el precio varía en función de la inflación para cada año.

Figura 13. Precio por kilogramo (\$/kg) de materiales de uso común en el diseño de equipos de proceso. Fuente: [25]



Tal y como se puede observar, de los materiales que maximizan M_1 , las aleaciones de acero al carbono presentan el precio más bajo. No obstante, es necesario comprobar la compatibilidad del material con el fluido. A través del reactor R-101 circula en fase líquida una disolución en medio muy básico. La fase gas está formada por oxígeno y nitrógeno por lo que se trata de una atmósfera oxidante. El reactor opera a presión de 10 bar.

De acuerdo con lo indicado en la bibliografía [13], los aceros inoxidable y las aleaciones con níquel y cobre son más resistentes a la corrosión y presentan mayor resistencia que los aceros al carbono. En base a las condiciones en el reactor y las propiedades de cada material, se decide seleccionar el **Monel 400**. Está recomendado para equipos en el que se opere con condiciones alcalinas, como es el caso de este proyecto. Su precio es superior al del acero inoxidable y se sitúa en 5000 £/t. [13]

14.4. Espesor de la carcasa

14.4.1. Cálculo del espesor de la carcasa del reactor R-101

De acuerdo con el código ASME BPV Code Sec. VIII D.1, el espesor debe ser calculado en función de la tensión radial que soporta, y la longitudinal correspondiente. Se debe escoger el máximo entre ambos valores para así garantizar que el tanque es capaz de soportar ambas cargas. Ambos espesores se pueden calcular con las siguientes Expresiones (47) y (48).

$$t_{radial} = \frac{P_i \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 1,2 \cdot P_i} \quad (47)$$

$$t_{longitudinal} = \frac{P_i \cdot D_i}{4 \cdot S \cdot E - 0,8 \cdot P_i} \quad (48)$$

En las que:

t_{radial} : espesor mínimo que es capaz de soportar la tensión radial (mm)

$t_{longitudinal}$: espesor mínimo que es capaz de soportar la tensión longitudinal (mm)

P_i : presión interna de operación del reactor (bar)

D_i : diámetro interno del reactor (mm)

S : esfuerzo máximo permisible (bar)

E : eficacia de la unión soldada

De acuerdo con el código ASME BVP Sec. VIII D1, se debe considerar un espesor mínimo de pared sin tener en cuenta la corrosión permisible, independientemente de las dimensiones del tanque y del material de construcción. Así se garantiza la rigidez del tanque para soportar su propio peso y posibles incidentes por carga. Los valores típicos en función del diámetro son los que se muestran en la *Tabla 30*:

Tabla 30. Espesor mínimo con corrosión de 2 mm en función del diámetro del tanque. Fuente: Elaboración propia. a partir de [13]

Diámetro del tanque (m)	Espesor mínimo (mm)
1	5
1 - 2	7
2 - 2,5	9
2,5 - 3	10
3 - 3,5	12

Se debe añadir un espesor adicional denominado tolerancia de corrosión. Existen dos medidas: 2 mm para condiciones de corrosión comunes y 4 mm para condiciones de corrosión severas. El pH muy básico de la corriente de entrada al reactor y la atmósfera

oxidante presente en el interior son causas justificadas para seleccionar la tolerancia máxima: 4 mm de espesor por corrosión. Se selecciona el esfuerzo máximo permisible para Monel 400 a la temperatura de diseño de 170 °C. En la *Tabla 31* se recoge dicho valor.

Tabla 31. Esfuerzo máximo permisible para el material Monel 400. Fuente: Elaboración propia a partir de [27]

Máximo esfuerzo permisible (interpolado a 170 °C) (ksi)	Máximo esfuerzo permisible (bar)
21,4	1475,48

Por último, se determina una eficacia de soldadura en función del tipo de unión y de la calidad de soldadura. Se establece una doble soldadura a tope o equivalente con un grado de radiografía del 100% por lo que la eficacia de soldadura es de 1. Los resultados se expresan en la *Tabla 32*. Se obtiene el espesor mínimo requerido y el diámetro externo final del reactor R-101.

Tabla 32. Espesor del reactor R-101. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Presión interna (bar)	11,72
Diámetro interno (mm)	1710,38
Eficacia soldadura	1
Máximo esfuerzo permisible Monel (bar)	1475,48
Espesor mínimo por tensión radial (mm)	6,82
Espesor mínimo por tensión longitudinal (mm)	3,40
Tolerancia por corrosión (mm)	4
Espesor del tanque (mm)	10,82
Diámetro externo del reactor (mm)	1732,02

Dado que el espesor de pared más alto junto con el sobredimensionamiento por corrosión es superior al espesor mínimo requerido para tanques con diámetro entre 1 -2 m (10,82 mm > 7 mm) (*Tabla 30*), se considera que dicho espesor calculado es suficiente y cumple con los mínimos establecidos.

14.4.2. Cálculo del espesor de la camisa de refrigeración

El espesor de la camisa de refrigeración, en base a lo indicado en la bibliografía [13] oscila entre 50 y 300 mm en función del tamaño del tanque al que rodea. Para este sistema se selecciona un espesor de camisa de 200 mm. Se decide escoger como material de

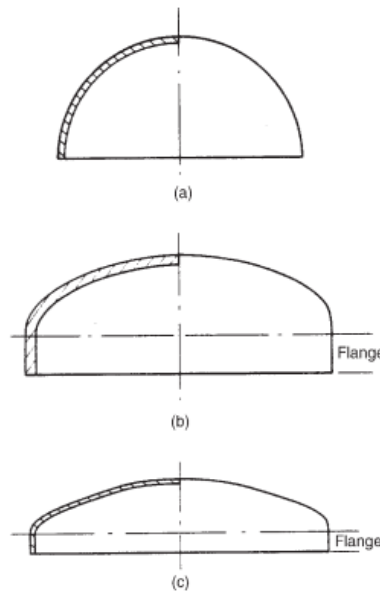
fabricación el acero inoxidable AISI 304 al ser un material resistente a la corrosión y de bajo coste con respecto a otras aleaciones.

14.5. Selección y dimensionamiento de los cabezales superior e inferior

Los cabezales cierran la zona superior e inferior del reactor. Se clasifican en varios tipos en función de las condiciones de operación. La principal clasificación diferencia dos tipos de cabezales para recipientes verticales. [13]

- Cabezales planos o de forma plana. Son la opción más económica a la hora de su fabricación, pero sus características solo permiten ser usados en condiciones de baja presión y para tanques pequeños (serían necesarios espesores altos para soportar la presión)
- Cabezales abombados. Se dividen en tres tipos (*Figura 14*):
 - a) Hemisféricos. Se trata del cabezal más resistente a las altas presiones lo que también supone un coste superior del mismo. Su espesor puede ser la mitad del espesor del tanque.
 - b) Elípticos. Su coste es inferior al del cabezal hemisférico. Se suele utilizar para presiones superiores a 15 bar y su espesor debe coincidir con el del tanque.
 - c) Torisférico. Es la opción más económica y se usa para soportar presiones inferiores a 15 bar.

Figura 14. Tipos de cabezales abombados. Fuente: [13]



A pesar de que la presión de operación es de 10 bar y la presión de diseño de 11,72 bar, lo que hace indicar que el cabezal torisférico es el más adecuado para el equipo, se decide calcular los espesores para cada uno de los tres cabezales detallados anteriormente. Se presentan a continuación las *Ecuaciones (49), (50), (51)* para cada tipo de cabezal:

$$t_{hemisférico} = \frac{P_i \cdot D_i}{4 \cdot S \cdot E - 0,4 \cdot P_i} \quad (49)$$

$$t_{elíptico} = \frac{P_i \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P_i} \quad (50)$$

$$t_{torisférico} = \frac{0,885 \cdot P_i \cdot R_c}{S \cdot E - 0,1 \cdot P_i} \quad (51)$$

En la que:

R_c : radio de la corona el cual se puede tomar el mismo valor que el radio interno del tanque (m)

Los resultados obtenidos se presentan en la *Tabla 33*:

Tabla 33. Espesor de los cabezales del reactor R-101. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Presión interna (bar)	11,73
Diámetro interno (mm)	1710,38
Eficacia soldadura	1
Máximo esfuerzo permisible Monel 400 (bar)	1475,48
Radio corona	1
Espesor mínimo cabezal hemisférico (mm)	3,40
Espesor mínimo cabezal elíptico (mm)	6,80
Espesor mínimo cabezal torisférico (mm)	12,04
Tolerancia por corrosión (mm)	4
Espesor cabezal elíptico (mm)	10,823

Con los resultados obtenidos, se deben analizar dos casos:

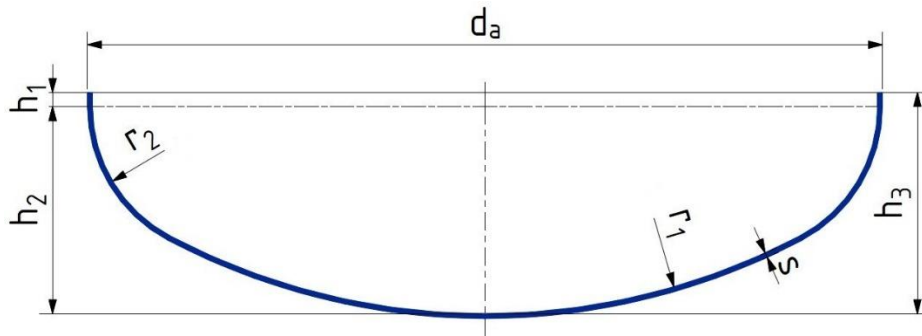
El espesor obtenido para el cabezal elíptico, para que coincidan tanto el espesor del reactor como el espesor de los cabezales, solo es necesario aumentar en 0,02 mm el espesor del cabezal ya que ambos espesores son prácticamente iguales. Si se selecciona el cabezal torisférico (el de menor coste de los tres) el espesor del reactor debería aumentar en 6 mm aproximadamente.

Se decide escoger la primera opción ya que no supondría un aumento significativo en el espesor del reactor lo que no supone un aumento de coste. Para seleccionar el cabezal más barato, habría que aumentar el espesor del reactor en más de un 30%. También se tiene en cuenta para la selección la refrigeración en el reactor. Tienen lugar tres reacciones exotérmicas, por lo que la refrigeración es un parámetro muy importante, ya que la transferencia de calor más favorable para un menor espesor de pared.

Analizadas las casuísticas, se selecciona el **cabezal elíptico con un espesor de 10,82 mm** con sobredimensionamiento por corrosión.

Se dimensiona el cabezal elíptico de relación 2:1 de acuerdo con la bibliografía y se hace uso de las ecuaciones [28] para hallar los parámetros indicados en el siguiente esquema (Figura 15):

Figura 15. Dimensionamiento del cabezal elíptico 2:1. Fuente: [28]



$$d_i = d_a - 2 \cdot t_{\text{elíptico}} \quad (52)$$

$$r_1 = 0,9 \cdot d_i \quad (53)$$

$$r_2 = 0,17 \cdot d_i \quad (54)$$

$$h_1 = 3,5 \cdot t_{\text{elíptico}} \quad (55)$$

(relación del cabezal elíptico)

$$h_2 = 0,25 \cdot d_i \quad (56)$$

$$h_3 = h_1 + h_2 \quad (57)$$

En las que:

d_a : diámetro exterior del reactor (m)

d_i : diámetro interior del fondo (m)

r_1 : radio de bombeado (m)

r_2 : radio de reborde (m)

h_1 : altura del borde cilíndrico (m)

h_2 : altura del bombeado (m)

h_3 : altura total del fondo interior (m)

Los resultados obtenidos se presentan en la *Tabla 34*.

Tabla 34 Parámetros del dimensionamiento del cabezal elíptico. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
d_i (mm)	1710,38
r_1 (mm)	1539,34
r_2 (mm)	290,76
h_1 (mm)	37,88
h_2 (mm)	427,59
h_3 (mm)	465,47

14.6. Análisis de cargas

De acuerdo con lo indicado en bibliografía, los tanques a presión están sometidos a diferentes cargas además de a la propia presión interna. Por ello, su diseño debe considerar todas las cargas para poder ser soportadas en caso de fallo.

14.6.1. Cargas por peso

14.6.1.1. Peso del recipiente

El peso de un recipiente cilíndrico de espesor constante se puede estimar con la *Ecuación (58)*.

$$W_v = C_v \cdot \pi \cdot \rho_m \cdot D_m \cdot g \cdot (H_v + 0,8 \cdot D_m) \cdot t \cdot 10^{-3} \quad (58)$$

En la que:

W_v : peso total de la carcasa (N)

C_v : factor que tiene en cuenta accesorios internos. Para un número pequeño de accesorios toma un valor de 1,08.

H_v : altura o longitud de la sección cilíndrica (m)

g : aceleración de la gravedad (m/s^2)

t : espesor de la pared del recipiente (mm)

ρ_m : densidad del material (kg/m^3)

D_m : diámetro expresado como $D_i + t \cdot 10^{-3}$ (m)

Los parámetros usados y el peso del recipiente se recogen en la *Tabla 35*.

Tabla 35. Determinación del peso del recipiente. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
Factor C_v	1,08
H_v (m)	6,84
g (m/s^2)	9,81
t (mm)	10,82
ρ_m (kg/m^3)	8.800,00
D_i (m)	1,710
D_m (m)	1,721
W_v (kN)	44,84

14.6.1.2. Peso del estructurado Mellapak 750Y

Se determina el peso del relleno estructurado siguiendo la *Ecuación (59)*. Se toma el volumen del estructurado calculado en el apartado 10.2 *Volumen del relleno Mellapak 750Y* y la densidad del material correspondiente; acero ASTM 316.

$$W_{\text{estructurado}} = V_{\text{estructurado}} \cdot \rho_{\text{estructurado}} \cdot g \quad (59)$$

El resultado se recoge en la *Tabla 36*.

Tabla 36. Determinación del peso del estructurado. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
$V_{\text{estructurado}}$ (m^3)	0,8273
$\rho_{\text{ASTM 316}}$ (kg/m^3)	7980
g (m/s^2)	9,81
W_v (kN)	64,76

14.6.1.3. Peso del distribuidor de gas

El distribuidor de gas es necesario para generar un burbujeo constante y homogéneo de la fase gas en el reactor. El peso que ejerce el distribuidor sobre el equipo se puede calcular mediante una aproximación de la carga que supone un plato, tal y como se muestra en la *Ecuación (60)*. [13]

$$W_{DG} = 1,2 \cdot A_{DG} \quad (60)$$

En la que:

W_{DG} : carga que ejerce el distribuidor de gas (N)

A_{DG} : área del distribuidor de gas (m^2)

1,2 es un factor para platos de contacto de acero (kN/ m^2)

El resultado se muestra en la *Tabla 37*.

Tabla 37. Determinación del peso del distribuidor de gas (DG). Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
A_{DG} (m^2)	2,3
W_{DG} (kN)	2,76

14.6.1.4. **Peso del contenido del recipiente**

En el interior del reactor están presentes dos fases. Para el cálculo del peso del contenido interno del reactor R-101 se decide despreciar el peso de la fase gas debido a la baja densidad que presenta con respecto a la fase líquida. Los cálculos realizados previamente muestran la carga que ejerce la masa de gas alojado en el interior del reactor representa un porcentaje despreciable con respecto al resto de cargas consideradas.

La fase líquida está definida a través del volumen (hold-up) de líquido en el reactor, calculado en el apartado *10.1 Volumen del líquido*. La densidad de la fase líquida se aproxima a la densidad de la corriente de entrada. La *Ecuación (61)* expresa el cálculo del peso.

$$W_L = V_{líquido} \cdot \rho_{líquido} \cdot g \quad (61)$$

El resultado se recoge en la *Tabla 38*.

Tabla 38. Determinación del peso del contenido del reactor. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
$V_{líquido}$ (m^3)	12,55
Densidad del líquido, $\rho_{líquido}$ (kg/m^3)	1037,83
Aceleración de la gravedad, g (m/s^2)	9,81
W_L (kN)	127,77

14.6.1.5. **Peso de la camisa refrigerante y del refrigerante**

No se tienen en consideración el peso de la camisa de refrigeración ni del refrigerante que circula por su interior ya que no se han determinado valores como diámetro o longitud de la conducción de la camisa; y se desconoce la carga de refrigerante que circula por el sistema.

14.6.1.6. Carga total

La carga total del reactor R-101 es la suma de los pesos de recipiente ($W_{\text{recipiente}}$), distribuidor de gas (W_{DG}), estructurado ($W_{\text{estructurado}}$) y contenido líquido en su interior (W_L). El cálculo se recoge en la *Ecuación (62)*.

$$W_{R-201} = W_{\text{recipiente}} + W_{\text{DG}} + W_{\text{estructurado}} + W_L \quad (62)$$

El peso total al que está sometido el reactor se muestra en la *Tabla 39*.

Tabla 39. Carga total del Reactor R-101. Fuente: [Elaboración propia].

W_{R-101} (kN)	240,14
------------------------------------	---------------

14.6.2. Cargas por viento

El reactor R-101 está situado en una zona exterior dentro de la planta de producción de vainillina. Dicha localización, la disposición vertical y la altura del reactor hacen necesario determinar las cargas que tiene que soportar a causa del viento. En un primer paso, se debe calcular la carga ejercida por el viento por unidad de longitud en la columna, F_w , definida en la *Ecuación (63)*.

$$F_w = P_w \cdot D_{\text{eff}} \quad (63)$$

Ésta depende de la presión dinámica del viento, P_w , y del diámetro efectivo, D_{eff} . Ambos parámetros están expresados en la *Ecuación (64)* y *(65)*.

$$P_w = 0,05 \cdot u_w^2 \quad (64)$$

$$F_w = P_w \cdot D_{\text{eff}} \quad (65)$$

De acuerdo con lo indicado en la fuente bibliográfica [13], se toma como velocidad del viento, u_w , de 160 km/h. El diámetro efectivo es el diámetro externo de la carcasa más una tolerancia por aislante y conducciones. El reactor no presenta aislante por lo que se decide seleccionar el diámetro externo, D_{ext} .

Por otro lado, el momento flector al que está sometido el reactor debido a la carga por viento viene dada por la *Ecuación (66)*. El reactor es considerado una viga en voladizo.

$$M_x = \frac{F_w \cdot x^2}{2} \quad (66)$$

En la que:

x: altura entre las líneas tangentes: altura de la sección cilíndrica (m)

Los parámetros empleados y los resultados obtenidos se recogen en la *Tabla 40*.

Tabla 40. Carga por unidad de longitud en el reactor R-101. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
uw (km/h)	160
Pw (N/m ²)	1280
Fw (N/m)	2216,99
x (m)	6,84
M_x (N·m)	51.884,33

14.6.3. Otras cargas

No se tendrán en consideración otras cargas como es el caso de las cargas sísmicas, al no considerar la zona en la que está situada la instalación como susceptible de que se produzcan movimientos sísmicos significativos; cargas excéntricas, etc.

14.7. Análisis de tensiones

En este apartado se van a analizar las tensiones o esfuerzos derivados de las cargas que soporta el reactor calculadas anteriormente.

Los esfuerzos primarios están definidos por el esfuerzo longitudinal y el esfuerzo circunferencial o radial que soporta el reactor debido a la presión interna. Dichos esfuerzos vienen dados por la Ecuación (67) y (68).

$$\sigma_L = \frac{P_i \cdot D_i}{4 \cdot t} \quad (67)$$

$$\sigma_R = \frac{P_i \cdot D_i}{2 \cdot t} \quad (68)$$

En las que:

σ_L : tensión longitudinal (N/m²)

σ_R : tensión radial o circunferencial (N/m²)

P_i: presión interna o de diseño (N/m² = Pa)

D_i: diámetro interno del reactor (m)

T: espesor del tanque (m)

El esfuerzo directo, σ_w , debido al peso total del tanque, es considerado un esfuerzo compresivo y, de acuerdo con lo indicado en la fuente bibliográfica, negativo; ya que se calcula para los puntos situados sobre el soporte del tanque. Viene definido por la Ecuación (69).

$$\sigma_w = \frac{-W_{R-201}}{\pi \cdot (D_i + t) \cdot t} \quad (69)$$

En la que:

σ_w : tensión directa (N/m²)

W_{R-101} : peso total que soporta el reactor (N)

Por último, el esfuerzo de flexión, σ_b , debido al momento flector al que está sometido el reactor, tiene las Expresiones (70) y (71).

$$\sigma_b = \pm \frac{M_x}{I_v} \cdot \left(\frac{D_i}{2} + t\right) \quad (70)$$

$$I_v = \frac{\pi}{64} \cdot (D_i D_0^4 - D_i^4) \quad (71)$$

En las que:

σ_w : esfuerzo de flexión (N/m²)

M_x : momento flector al que está sometido el reactor (N·m)

I_v : segundo momento del área del tanque respecto al plano de flexión (m⁴)

D_0 : diámetro externo del reactor (m)

En la *Tabla 41* se recogen los parámetros usados para los cálculos de los esfuerzos y sus valores correspondientes.

Tabla 41. Resultados análisis de tensiones. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
P_i (Pa)	1.172.370
t (m)	0,01082
D_i (m)	1,7104
σ_R (N/m ²)	9,26·10⁷
σ_L (N/m ²)	4,63·10⁷
W_{R-101} (N)	239.472,11
σ_w (N/m ²)	-4,10·10⁶
D_0 (m)	1,7317
I_v (m ⁴)	0,0213
σ_b (N/m ²)	-1,64·10⁸

15. Válvula de alivio

Se procede a realizar el dimensionamiento de la válvula de alivio PSV-110 situada en el reactor R-101. Se define válvula de alivio como un dispositivo de seguridad cuyo objetivo es el de proteger a recipientes que alberguen presión ante una posible sobrepresión no

prevista. En este proyecto, desempeña la función de proteger al reactor ante un posible aumento de la presión en el interior del tanque.

El dimensionamiento de la válvula se basa en el código de diseño *ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII, Pressure Vessels* y se sigue el estándar *API 520 Sizing, Selection, and Installation of Pressure-relieving Devices in Refineries Part I*. [29]

15.1. Dimensionamiento de la válvula

Se usa la *Ecuación (72)* de acuerdo con lo indicado en el código.

$$A = \frac{11,78 \cdot Q}{K_d \cdot K_w \cdot K_c \cdot K_v} \cdot \sqrt{\frac{G}{P1 - P2}} \quad (72)$$

A es el área efectiva de descarga (mm^2).

Q es el caudal volumétrico de drenado (L/min). Caudal de líquido que fluye por el reactor.

K_d es el coeficiente de descarga nominal, proporcionado por el fabricante de la válvula.

K_w es el factor de corrección por contrapresión.

K_c es el factor de corrección para instalaciones con discos de ruptura aguas arriba de la válvula.

K_v es el factor de corrección por viscosidad.

G es la gravedad específica del líquido respecto al agua en condiciones estándar. $P1$ es la presión de diseño (bar).

$P2$ es la presión de alivio (bar).

Se determina una presión de apertura de válvula considerando una sobrepresión de 1,1 ($P1$) con respecto a la presión de operación en el reactor. $P2$ toma el valor de la presión atmosférica. G se calcula como el cociente entre la densidad del fluido en el interior del reactor y la densidad del agua. Se establece un caudal de descarga que permita vaciar el reactor en un tiempo aproximado de 1 minuto. El volumen de líquido en el reactor es de $12,55 \text{ m}^3$. Se asume un coeficiente de descarga K_d de 0,65. El factor de contrapresión K_w es 1 ya que la presión es la atmosférica. No se opta por un disco de ruptura para la instalación por lo que el factor K_c es 1. El factor de corrección por viscosidad K_v se considera 1. Se calcula el área de descarga y los resultados se recogen en la *Tabla 42*:

Tabla 42. Cálculo del área de descarga. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
Q (L/min)	616,27
K_d	0,65
K_w	1

Parámetro	Valor
K _c	1
K _v	1
G	1,04
P1 (bar)	10
P2 (bar)	1
Área de descarga, A (mm ²)	3.796,63

Una vez calculada el área, es necesario determinar el número de Reynolds para determinar que el valor del coeficiente que se ha asumido previamente es válido. El Re se define mediante la *Ecuación (73)*:

$$Re = \frac{18800 \cdot G \cdot Q}{\mu \cdot \sqrt{A}} \quad (73)$$

En la que:

μ: viscosidad de la mezcla reaccionante (cP)

El factor de corrección por viscosidad K_v se presenta en la *Ecuación (74)*.

$$Kv = \left(0,9935 + \frac{2,878}{Re^{0,5}} + \frac{342,75}{Re^{1,5}} \right)^{-1} \quad (74)$$

Tabla 43. Comprobación de la suposición del factor de corrección de viscosidad Kv. Fuente: [Elaboración propia].

Parámetro	Valor
Q (L/min)	616,27
G	1,04
Área de descarga, A (mm ²)	3.796,63
Viscosidad líquido-entrada (cP)	1,34
Re	145934,59
K_v	1,001

No se observa variación en el factor de corrección de viscosidad (su valor sigue siendo la unidad) por lo que se cumple la suposición establecida anteriormente. Se estandariza el área de descarga para determinar en el catálogo de válvulas de la bibliografía el modelo. Se escoge el orificio Tipo P para un área estandarizada de 4416 mm². El modelo óptimo de válvula es el de JTL-JOS/JBS de Bonete cerrado para líquidos.

PARTE B:
COLUMNA DE
ADSORCIÓN T-201/T-202

En este apartado se llevará a cabo el proceso de diseño riguroso y mecánico de la columna de adsorción T-201/T-202 para la separación de los compuestos vainillina y siringaldehído, contenidos en la corriente procedente del tanque V-201. Este equipo se encuentra duplicado con el objetivo de realizar un proceso cíclico que permita realizar un proceso continuo de separación.

En una primera parte, se realizará una introducción al proceso de separación por adsorción y a los conceptos básicos para su entendimiento. A continuación, se procederá con las sucesivas partes, donde se explicará la metodología seguida para la realización de dicho diseño.

1. Introducción

El proceso de adsorción consiste en la concentración de uno o más componentes, denominados con el término “adsorbato” y que se encuentran presentes en un gas o un líquido, en la superficie de un sólido, denominado con el término “adsorbente”. [30] Típicamente, la operación se lleva a cabo en un equipo denominado “columna de adsorción”. Dicha columna cuenta en su interior con un lecho de partículas que, si bien este puede ser un lecho de tipo fluidizado, habitualmente en la industria se utilizan las columnas de adsorción de lecho empacado fijo, contenido en el interior de la columna sustentado mediante soportes o mallas en la parte superior e inferior del lecho. El empaque estará constituido por un material adsorbente, cuya selección será clave para un buen rendimiento del proceso, la cual se realiza principalmente en función de las necesidades y propiedades de los compuestos que se desean separar, así como del equilibrio de adsorción entre el adsorbente y el adsorbato. Del tipo de material del que esté hecho el sólido adsorbente dependerá si es posible su regeneración para uso en sucesivas etapas o, si directamente, se descartará en cada ciclo, sustituyéndolo por una cantidad de adsorbente nueva. [30] [31]

La concentración de uno o más compuestos en el sólido se produce gracias a la mayor atracción de dichos componentes a la superficie del sólido frente al resto de compuestos que presentan una menor atracción. Este es el mecanismo en el que se basa el proceso de separación mediante adsorción, ya que hace posible la separación entre compuestos de una corriente de entrada.[31] La atracción de los compuestos a la superficie del sólido se produce debido a las distintas fuerzas de atracción entre las moléculas de fluido y la superficie sólida. En función del tipo de interacciones que se establecen entre las moléculas del fluido y la superficie del adsorbente, se puede distinguir dos tipos de adsorción. La *fisisorción* se produce cuando las fuerzas de Van der Waals son las que establecen interacciones débiles entre las moléculas y la superficie del sólido. El segundo mecanismo es la *quimisorción*, en la cual se establecen enlaces químicos entre las moléculas y el adsorbente. [30]

Una vez los compuestos se encuentran adsorbidos y, por tanto, separados del resto de la corriente de entrada, pueden ser recuperados mediante un proceso de desorción, en el cual los compuestos desacomplan de la superficie del sólido.

Existen una variedad de métodos de desorción, los cuales serán analizados posteriormente. La reversibilidad del proceso de adsorción dependerá del tipo de mecanismo por el cual las moléculas se han adherido a la superficie del sólido. El mecanismo de fisisorción reporta una energía de adsorción menor que en el caso de la quimisorción, debida a los enlaces débiles de tipo Van der Waals. Por ello, la fisisorción garantiza una mayor reversibilidad del proceso, siendo por tanto más sencillo de recuperar los compuestos adsorbidos por medio de los distintos procesos de desorción. [30]

Se debe tener en cuenta además que un proceso mediante fisisorción tiene carácter exotérmico. Este fenómeno se debe a la disminución de la energía libre de Gibbs provocada por un proceso espontáneo como es la adsorción de una molécula con gran afinidad por el adsorbente. Esta adsorción también conlleva a una disminución de la entropía, lo que hace que, siguiendo la ecuación de la energía libre de Gibbs, la entalpía también disminuya, indicativo de dicho carácter exotérmico. [32]

1.1. Equilibrio de adsorción

Uno de los parámetros más importantes a la hora de llevar a cabo un proceso de adsorción es el equilibrio de adsorción establecido entre el adsorbente y adsorbato. El estudio de dicho equilibrio permite establecer las condiciones de operación tales como presión o temperatura. Por otra parte, el equilibrio de adsorción permite establecer las características materiales que debe poseer el adsorbente para ser empleado en la columna de adsorción.[30] Habitualmente, el equilibrio de adsorción se representa a través de las isotermas de adsorción, las cuales muestran la relación existente entre la concentración de equilibrio de adsorbato en un adsorbente en concreto, y la presión (vapores o gases) o concentración (líquidos), a una temperatura determinada y constante. [30][31]

De manera general, para el caso de líquidos se pueden establecer 5 tipos de isotermas de adsorción, en función de lo favorable que sea el proceso de adsorción de un adsorbato en un adsorbente determinado y a unas condiciones de operación establecidas.

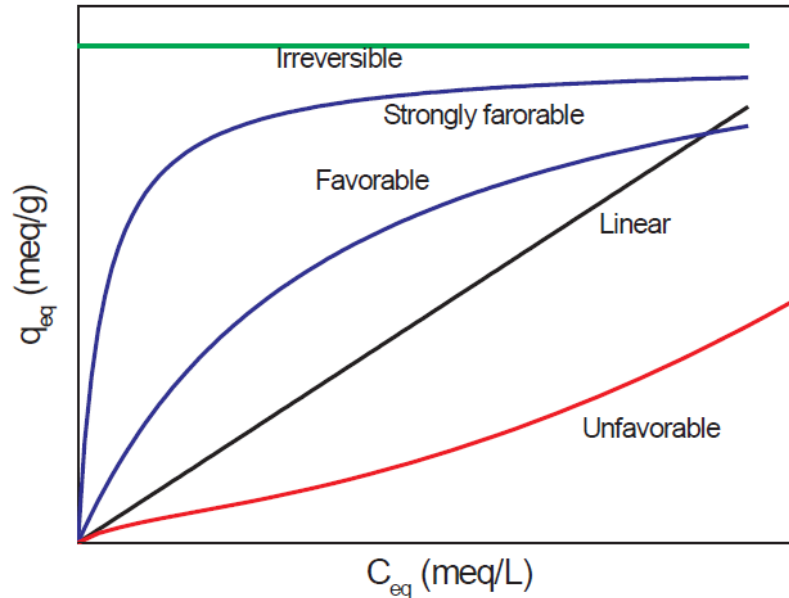


Figura 16: Tipos de isoterma de adsorción. Fuente: [33]

La *Figura 16* muestra los distintos tipos de isoterma de adsorción para casos en los que el proceso sea de tipo sólido-líquido. Se representa la concentración de compuesto adsorbido en el equilibrio frente a la concentración de compuesto en la disolución en el equilibrio. En dicha representación se puede observar la forma que adopta una isoterma de adsorción en función de lo favorable que sea la adsorción del compuesto (adsorbato) en el sólido (adsorbente). Un comportamiento desfavorable implica una mala adsorción del adsorbato en el adsorbente. Todo lo contrario sucede en el caso de la isoterma de tipo irreversible, que muestra un comportamiento en el que el adsorbato es adsorbido fuertemente la superficie del sólido, de manera irreversible. Cabe destacar que, en procesos en los que se lleve a cabo una regeneración del lecho mediante la desorción del adsorbato, lo más recomendable es que se dé un comportamiento de tipo favorable, ya que, de lo contrario, no sería posible la regeneración. [33]

1.1.1. Correlaciones para el equilibrio de adsorción

A lo largo del tiempo se han ido desarrollando distintas teorías para el análisis y modelización del equilibrio de adsorción. Estos proporcionan un modelo de los procesos reales y ayudan a comprender su comportamiento. [34]

Existen numerosas correlaciones que representan el comportamiento de los procesos de adsorción. Para aquellos que involucran un sistema de tipo sólido-líquido (adsorbato en fase líquida y adsorbente sólido), existen principalmente 3 correlaciones que ayudan a modelizar el comportamiento de dicho proceso.

1.1.1.1. Modelo de Langmuir

El modelo de Langmuir describe que la adsorción de una capa simple de adsorbato se produce sobre la superficie homogénea del adsorbente. Dicha superficie posee un número de terminado de posiciones libres, también llamados sitios de adsorción, en los cuales no se producen interacciones entre las moléculas de adsorbato próximas entre sí adheridas en posiciones libres de la superficie del sólido. [35]

$$q_{i,e} = \frac{q_{m,i} K_{L,i} C_{i,e}}{1 + K_{L,i} C_{i,e}} \quad (75)$$

Donde:

$q_{i,e}$: Capacidad máxima de adsorción para el componente i en equilibrio con $C_{i,e}$
(g/g_{resina seca})

$q_{m,i}$: Capacidad máxima de adsorción de compuesto i (g/g_{resina seca})

$C_{i,e}$: Concentración en equilibrio del compuesto i en la disolución (g/L)

$K_{L,i}$: Constante de equilibrio de Langmuir para el componente i (L/g)

La capacidad de adsorción descrita por este modelo presenta un máximo, correspondiente a la saturación, en el que no existen más posiciones libres en la superficie del sólido para adsorber moléculas de adsorbato.

El fenómeno de saturación puede observarse de manera gráfica, en la que se aprecia una meseta correspondiente al punto de saturación de equilibrio. La *Ecuación (75)* describe el modelo de Langmuir. [35]

1.1.1.2. Modelo de Bi-Langmuir

El modelo de Bi-Langmuir describe que la adsorción de las moléculas en el sólido se realizará sobre dos superficies homogéneas en el adsorbente y que tienen un comportamiento independiente una de la otra. En cada una de las superficies que albergan los sitios libres se aplicarán los mismos principios descritos en el modelo de Langmuir. La *Ecuación (76)* describe el modelo de Bi-Langmuir. [35]

$$q_{i,e} = \frac{q_{m1,i} K_{L1,i} C_{i,e}}{1 + K_{L1,i} C_{i,e}} + \frac{q_{m2,i} K_{L2,i} C_{i,e}}{1 + K_{L2,i} C_{i,e}} \quad (76)$$

Donde:

$q_{i,e}$: Capacidad máxima de adsorción para el componente i en equilibrio con $C_{i,e}$
(g/g_{resina seca})

$q_{m1,i}$ $q_{m2,i}$: Capacidad máxima de adsorción de compuesto i para las dos superficies de sitios (g/g_{resina seca})

$C_{i,e}$: Concentración en equilibrio del compuesto i en la disolución (g/L)

$K_{L1,i}$ $K_{L2,i}$: Constante de equilibrio de Langmuir para el componente i para la respectiva superficie (L/g)

El modelo de Langmuir y el modelo de Bi-Langmuir hacen uso de la ecuación de Van't Hoff para calcular los datos relacionados con la energía de adsorción, tal y como describe la *Ecuación (77)*. [35]

$$K_x = K_x^0 \exp\left(-\frac{\Delta H_x}{RT}\right) \quad (77)$$

Donde:

K_x : Parámetros de energía de adsorción correspondientes al modelo de Langmuir (K_L) y modelo de Bi-Langmuir (K_{L1} , K_{L2}) (L/g)

K_x^0 : Constante de equilibrio respectiva a K_L^0 K_{L1}^0 K_{L2}^0 (L/g)

ΔH_x : Entalpía de adsorción respectiva a ΔH_L , ΔH_{L1} , ΔH_{L2} (kJ/mol)

R : Constante de los gases ideales (kJ/mol·K)

T : Temperatura absoluta (K)

1.1.1.3. Modelo de Freundlich

Se trata de un modelo empírico que describe el proceso de adsorción en superficies heterogéneas y considera que existen distintas energías de adsorción distribuidas en áreas de la misma magnitud y que no interaccionan entre sí. Considera además la formación de múltiples capas, lo cual se expresa a través de la *Ecuación (78)*. [35]

$$q_{i,e} = K_{F,i} C_{i,e}^{1/n} \quad (78)$$

Donde:

$q_{i,e}$: Capacidad máxima de adsorción para el componente i en equilibrio con $C_{i,e}$
(g/g_{resina seca})

$K_{F,i}$: Constante sobre la relación de capacidad del adsorbente sobre los compuestos i
(g/g_{resina seca})

$C_{i,e}$: Concentración en equilibrio del compuesto i en la disolución. El exponente n corresponde a la constante empírica que indica la curvatura y pendiente de la isoterma (g/L)¹⁻ⁿ

1.2. Materiales adsorbentes

El empleo de un lecho de adsorción para llevar a cabo la separación de compuestos requiere la selección de un material adsorbente adecuado para las condiciones del proceso y las características de los compuestos. El material adsorbente también debe presentar una serie de características que garantice que el proceso se realice de manera eficaz. A continuación, se comentarán las principales características que se deben analizar a la hora de seleccionar un material para su uso como adsorbente en un lecho de adsorción. [30]

La capacidad de adsorción resulta ser un parámetro crítico para la selección del material ya que muestra la cantidad de adsorbato que puede adsorber el sólido. Ello dependerá de la superficie específica y del volumen de poros, siendo la superficie total del material adsorbente la que incluye la superficie externa y la superficie debida a los poros; y el volumen de adsorbato que puede ser adsorbido por unidad de masa, respectivamente. La capacidad de adsorción tendrá una repercusión directa en los costes de proceso, por lo que este parámetro debe ser analizado con rigor. [30]

La capacidad de regeneración es el parámetro que muestra la capacidad que tiene el material adsorbente de mantener sus características y propiedades después de una serie de ciclos de adsorción-desorción. Cuanto menor sea este parámetro, menor será el tiempo que podría ser usado el adsorbente antes de que su rendimiento empezase a degradarse. [30]

La selectividad de un adsorbente indica la tasa entre la capacidad de adsorción de un compuesto con respecto a otro contenido en la misma mezcla a tratar. Un adsorbente con una alta selectividad por un compuesto contribuye a una alta eficacia en el proceso de separación. [30]

Teniendo estas consideraciones en cuenta, puede realizarse una correcta selección del material adsorbente. A continuación, la *Tabla 44* recoge alguno de los materiales más utilizados en la industria como adsorbentes.

Tabla 44: Materiales adsorbentes más utilizados en la industria. Fuente: [30][32]

Material adsorbente	Descripción
Zeolitas	<p>Aluminosilicatos cristalinos que formado por conjuntos de tetraedros de SiO_4 y AlO_4.</p> <p>Alta porosidad interna → Adsorción interna</p> <p>Adsorción-Desorción de moléculas basado en diferencias de tamaño, forma molecular y polaridad</p> <p>Usada en procesos de secado de gases, purificación de hidrógeno, recuperación de CO_2.</p>
Gel de sílice	<p>Material amorfo formado por partículas esféricas agregadas de 2-20nm.</p> <p>Tamaños de poro 6-25 nm.</p> <p>Naturaleza polar</p> <p>Usada en procesos de adsorción de agua, alcoholes o compuestos fenólicos. Separación de compuestos aromáticos de parafinas.</p>
Alúmina activada	<p>Estructura porosa del óxido de aluminio</p> <p>Elevada área superficial</p> <p>Altas temperaturas: Superficie más polar que la del gel de sílice</p> <p>Secado de corrientes gaseosas. Compuestos como Cl_2 o NH_3</p>
Carbón activo	<p>Forma microcristalina, no gráfica</p> <p>Alto grado de porosidad y superficie específica</p> <p>Tamaños de partícula 0.4-2.4 mm</p> <p>Superficie fundamentalmente apolar. Ligera polaridad debido a grupos oxigenados en la superficie</p> <p>Purificación de helio, separación nitrógeno del aire, etc</p>

Material adsorbente	Descripción
Resinas poliméricas	<p data-bbox="804 300 1198 365">Habitualmente copolímeros de estireno/divinilbenceno</p> <p data-bbox="699 439 1305 504">Elevada área superficial ($>1000 \text{ m}^2/\text{g}$) y buena distribución del tamaño de poros.</p> <p data-bbox="847 546 1155 575">Amplio abanico de usos</p> <p data-bbox="671 618 1332 683">Recuperación de solutos de fase acuosa: Pesticidas, antibióticos, benceno, tolueno, etc.</p>

1.3. Métodos de desorción y regeneración del lecho

En aquellos procesos en los que no sea considerado el descarte del material adsorbente después de la etapa de adsorción será necesaria la realización de una etapa de desorción y regeneración del lecho, preparándolo así para un nuevo ciclo de adsorción. Existen diversos procesos, tanto físicos como químicos, para llevar a cabo dicha operación de desorción y regeneración.

1.3.1. Oscilación de temperatura (TSA)

En el proceso de desorción por oscilación de temperatura (TSA) se hace uso de un método de regeneración físico, empleado más habitualmente en sistemas gaseosos. El principio de funcionamiento de este método para la desorción del adsorbato del lecho es la reducción de la constante de equilibrio por medio de un aumento de temperatura. Para ello, se hace pasar un gas de regeneración a alta temperatura a contracorriente con respecto a la alimentación. Con este método de oscilación térmica se permite recuperar el adsorbato concentrado en la corriente de salida del gas regenerante. En muchos casos es habitual el uso de una corriente de enfriamiento después de esta etapa con el fin de evitar que los compuestos de la corriente de alimentación puedan reaccionar con el material adsorbente debido a la alta temperatura. [31]

A pesar de su eficacia, la TSA presenta varias desventajas relacionadas con la oscilación de temperatura. Se trata de un proceso normalmente lento y que requiere grandes cantidades de energía, en especial para el caso de lechos de gran tamaño, haciendo que la regeneración del lecho por este método pueda llegar a ser lenta y costosa. [31]

1.3.2. Oscilación de presión (PSA y VSA)

Dentro de este tipo de procesos de desorción se encuentran la desorción por oscilación de presión (PSA) y la desorción por oscilación de vacío (VSA). Ambas opciones se emplean normalmente para sistemas gaseosos. Ambos son usados en situaciones en las que el adsorbato no se encuentra fuertemente unido al adsorbente. El principio de funcionamiento de estos sistemas se basa en la reducción de presión del lecho hasta alcanzar un valor suficientemente inferior en comparación a la presión de alimentación. Al reducir la presión de la columna, se reduce también la presión parcial, contribuyendo a la desorción. Se realiza un barrido con una corriente de gas y una purga con una parte del gas producto del proceso de adsorción, a contracorriente con la alimentación, logrando la retirada del adsorbato adherido al lecho. [31]

A pesar de que los procesos de desorción por oscilación de presión no son tan eficaces como los procesos de desorción con oscilación de temperatura, estos presentan la ventaja de que los tiempos para la lograr las condiciones de desorción son mucho más cortos, además de que resulta más sencillo y rápido llevar a cabo un proceso de cambio de presión de la columna que un cambio de temperatura, lo que se traduce en un menor coste. [31]

1.3.3. Fluido desplazante y cambio de pH

La desorción de los compuestos puede llevarse a cabo mediante el uso de un fluido de desplazamiento. Dicho fluido, normalmente un líquido, debe poseer la característica de adsorberse con una mayor fuerza que los compuestos adsorbidos, lo que provoca su desplazamiento. Sin embargo, dicha fuerza no debe ser excesiva ya que, de ser así, podría mantenerse adsorbido en la superficie del sólido, afectando al rendimiento de las posteriores etapas de adsorción.

Por otra parte, el empleo de un fluido que cambie las condiciones, como el pH, con respecto a las existentes en la etapa de adsorción, es uno de los métodos más usados para llevar a cabo la desorción de los compuestos previamente adsorbidos. [32]

2. Características de la alimentación a la columna

El empleo de columnas de adsorción en este proceso tiene como objetivo fundamental la separación de los compuestos de interés de la corriente de alimentación que los alberga junto al resto de componentes.

La entrada de alimentación se realiza por la parte superior de la columna, en dirección descendente y está formada por una amalgama de compuestos, productos de la oxidación llevada a cabo en el reactor R-101 de la sección 100.

La *Tabla 45* y la *Tabla 46* recoge los caudales máxicos de los compuestos que forman la corriente de entrada, así como otras condiciones tales como temperatura, presión y pH.

Tabla 45: Caudales máxicos de los compuestos que conforman la alimentación. Fuente:[Elaboración propia]

Compuesto	Caudal máxico (kg/h)
Vainillina	119,81
Siringaldehído	25,51
Agua	18.928,08
Hidróxido de sodio	1.518,80
Lignina	3,54
Ácido vainillínico	59,76
Compuestos ácidos	1.418,35
TOTAL	22.073,84

Tabla 46: Características y propiedades de la corriente de alimentación. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Temperatura (°C)	25
Presión (bar)	2,4
pH	>11
Densidad (kg/m ³)	1.029,14
Viscosidad (kg/m·s)	1,12·10 ⁻³

3. Elección del sólido adsorbente

Tal y como se analizó anteriormente, la selección del material del lecho que alberga la columna de adsorción es un paso crítico. Parámetros como la capacidad de adsorción, capacidad de regeneración y selectividad son claves para obtener un buen rendimiento de separación. Para este proyecto han sido analizadas varios tipos de adsorbentes a partir de documentos de investigación [35][36][37], en los que se analizan las características y desempeño de varios materiales en el proceso de adsorción de compuestos fenólicos, entre los que se encuentran la vainillina y el siringaldehído.

Las resinas candidatas, “Amberlite XAD-16”, “H103”, “Sepabeads SP206” y “Sepabeads SP700”, se caracterizan por ser resinas poliméricas no polares.

Todas ellas han sido testadas en la separación de compuestos fenólicos a distintas condiciones de temperatura, concentraciones de compuestos, caudal de alimentación y pH.

De estas investigaciones, se concluye que la resina “Sepabeads SP700” es la más adecuada para su uso como adsorbente en la columna de adsorción del presente proyecto.

“Sepabeads SP700” es una resina de tipo polimérica no polar, cuya matriz es de estireno-divinilbenceno/etilvinilbenceno, comercializada por la empresa *Mitsubishi Chemical Corporation*. [38] Presenta el mayor área superficial y volumen de poros de entre el resto de las resinas analizadas. Además, las investigaciones concluyen que se trata de una resina con una alta selectividad hacia la vainillina y alta capacidad de adsorción por cada gramo de adsorbente. [35] Es ampliamente utilizada en la industria alimentaria, farmacéutica, cosmética, para la separación y purificación de proteínas y oligonucleótidos, así como para la adsorción de vitaminas, antibióticos o enzimas de soluciones de fermentación.

Este tipo de resina se caracteriza por su gran polivalencia, ya que soporta condiciones de operación ácidas y básicas, con un rango de pH de operación de 0-14. Presenta buena resistencia mecánica y puede operar hasta un máximo de temperatura de 130°C. Gracias a sus características, pueden emplearse diversos compuestos para su regeneración, tales como agua, solventes orgánicos, compuestos básicos o ácidos. [38]

A pesar de que los estudios demuestran que su rendimiento no varía con el número de ciclos de adsorción, es de esperar que a largo plazo pueda deteriorarse su rendimiento debido a las fuerzas de arrastre del fluido a su paso por el lecho, lo cual puede acabar causando con el tiempo una compactación de la resina. Por este motivo y a modo de precaución, se realizará la sustitución anual del lecho adsorbente, aprovechando la parada técnica de la planta.

Tabla 47: Datos técnicos resina SP700. Fuente: [37]

Parámetro	Valor
D_p (μm)	450
r_{poro} (nm)	9
$A_{\text{superficial}}$ específica (m^2/g)	1.200
V_{poros} (mL/g)	2,1
Contenido humedad (%)	60-70
pH operación	0-14
Temperatura máxima de operación ($^{\circ}\text{C}$)	130

4. Diseño del equipo: Método de Longitud de lecho no usado (LUB)

El diseño de una columna de adsorción de lecho fijo puede realizarse siguiendo dos metodologías. La primera de ellas hace uso de ecuaciones rigurosas que establecen los balances completos de materia y energía. A pesar de ser el método de mayor rigor, en la mayoría de los casos, no es posible obtener soluciones analíticas, más concretamente en los procesos de adsorción que no siguen un comportamiento lineal.

Por este motivo, se han desarrollado métodos de cálculo para el diseño de columnas de adsorción, los cuales se basan en datos experimentales obtenidos en el laboratorio o planta piloto, pudiendo ser empleados para sistemas que no siguen un comportamiento lineal. [31]

Dentro de esta segunda metodología, se encuentra el método de *Longitud de lecho no usado* o *LUB*, siendo este el más empleado a nivel industrial. Dicho método se basa en los datos experimentales, obtenidos a nivel de laboratorio, para un proceso concreto a unas determinadas condiciones, para, posteriormente, escalar a nivel industrial la columna de adsorción. Para que el empleo de este método de diseño sea válido el sistema debe ser isotérmico y presentar una onda de pauta constante, también denominado como patrón constante. Será necesario introducir una serie de conceptos teóricos para comprender la base sobre la que se sustenta este método, así como para proceder con los cálculos de diseño. [31]

4.1. Estudio dinámico experimental de lechos fijos de adsorción

El proceso de diseño comienza con un estudio dinámico del proceso a nivel de laboratorio, en el cual se empleará una columna de pequeño tamaño, que alberga el material adsorbente con el que se pretende realizar el estudio para luego llevar a escala industrial.

El experimento comienza con la alimentación de una disolución de cierta concentración y bajo una serie de condiciones de operación, tales como temperatura, presión o caudal, concretas, análogas a las que estará sometido el modelo a escala industrial. En el momento del comienzo del experimento se empieza a medir la concentración del compuesto a separar, contenido en la disolución, en la salida de la columna. En un primer momento, la mayor parte de la adsorción o zona transferencia de materia (MTZ, región donde se produce la mayor parte de la transferencia de materia) se lleva a cabo en la zona más cercana a la alimentación y, debido a que el sólido adsorbente se encuentra completamente libre, no se detectará concentración de adsorbato a la salida de la columna. Con el desarrollo de la operación, la zona de lecho más próxima a la entrada se va colmatando, lo que se traduce en que la zona de transferencia de masa avance a lo largo del lecho, produciéndose el fenómeno de adsorción en una zona cada vez más alejada del punto de alimentación. Sin embargo, llegado a cierto punto del proceso de adsorción, la zona de transferencia de materia excede a la zona disponible de adsorbente sin colmatar.

Es en ese momento en el que se detectan notables variaciones en la concentración de salida de la columna. A la curva obtenida de la representación de la relación entre la concentración de la salida (C_s) y la concentración de entrada (C_o) a la columna, frente al tiempo se le denomina curva de ruptura. De manera estándar, los puntos que representan el momento temporal en el que se detecta en la salida un 5% y un 95% de la concentración de entrada se les denomina tiempo de ruptura (t_r) y tiempo de saturación (t_s), respectivamente. [33]

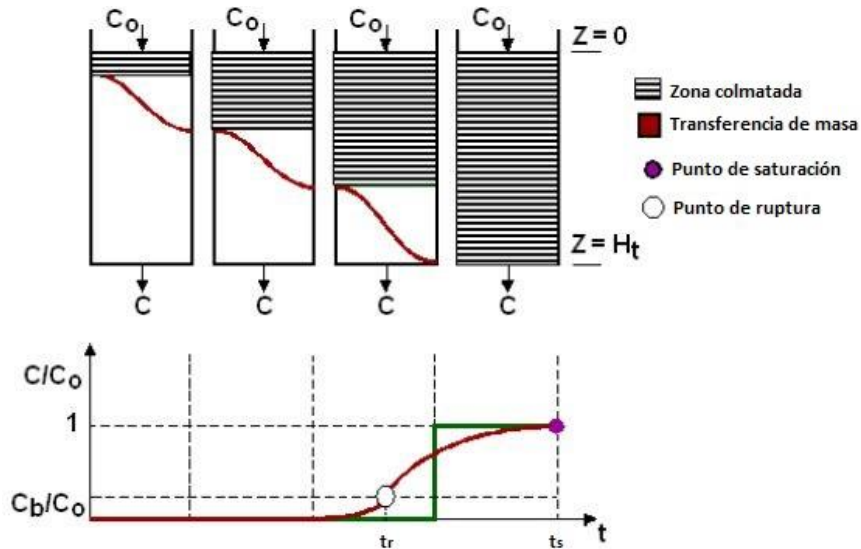


Figura 17: Representación de la evolución de MTZ en el interior de la columna de adsorción y su curva de ruptura.
Fuente: Adaptado de [33]

El comportamiento real de la mayoría de los procesos de adsorción hace que la forma que adopta la curva de ruptura varíe a lo largo del lecho debido a cambios en la longitud de la zona de transferencia de materia (L_{MTZ}). Estos cambios se producen principalmente en los primeros momentos del proceso de adsorción o en las inmediaciones de la entrada de alimentación. A medida que avanza la MTZ, esta tiende a estabilizarse. En la aplicación de métodos de escalamiento a partir de datos experimentales, es válido asumir una L_{MTZ} constante, lo que se traduce en una forma constante de la curva de ruptura. A este comportamiento se le denomina como patrón constante.

Por otra parte, sería deseable que la forma de la curva fuese lo más simétrica posible, tal y como sería de manera ideal. En las curvas que presentan buena simetría, se puede localizar el punto que determina el tiempo en el que el centro de la curva, o frente de onda, sale de la columna. Este punto se corresponde con la intersección de la curva con la recta que marca el punto del 50% de C_s/C_0 , y es denominado como tiempo de centro de onda (t_{centro}). El tiempo existente entre el tiempo de ruptura (t_r) y el tiempo de saturación (t_s) recibe el nombre de tiempo equivalente de transferencia de masa (t_{MTZ}).

Por último, al área sobre la curva C_s/C_0 desde el instante inicial hasta el tiempo de saturación (t_s) se le denomina como tiempo de ruptura idealizado (t_{ideal}) y representa el tiempo en el que se alcanzaría la ruptura en un proceso ideal, en el que fuese posible la colmatación de todo el lecho de adsorción.

En un proceso de adsorción ideal la velocidad de transferencia de masa sería tan sumamente alta que no existiría una zona de transferencia de masa, ya que el equilibrio entre la fase sólida y líquida se alcanzaría en el acto. Este hecho conllevaría a que fuese posible el uso hasta la saturación del todo el lecho de adsorción.

El fenómeno se representa con la forma de escalón que se muestra en color verde en la *Figura 17*, pasando de la no detección de concentración de compuesto en la salida de la columna a detectar la concentración de entrada de manera muy rápida. Siguiendo esta explicación, cuanto más se asemeje una curva de ruptura a dicha forma en escalón, más favorable será el proceso de adsorción del compuesto, tal y como se muestra en la *Figura 18*.

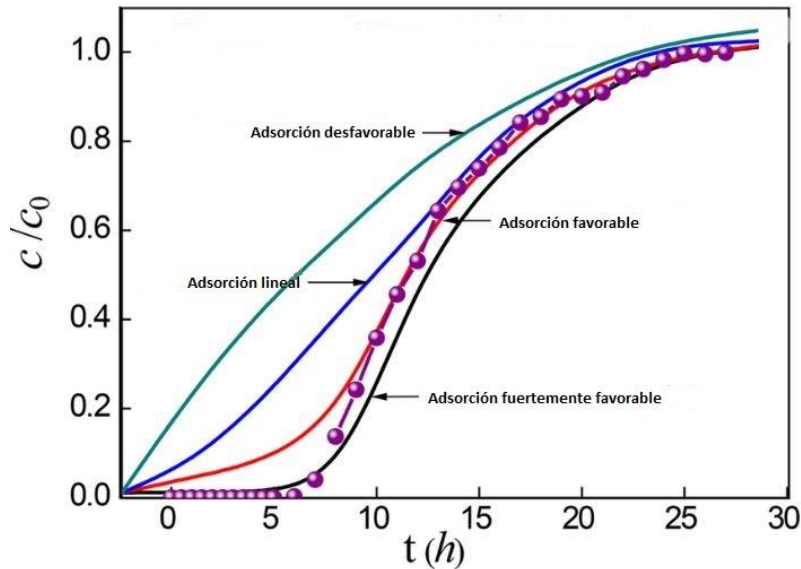


Figura 18: Modelos de curva de ruptura. Fuente: Adaptado de [39]

Tal y como se acaba de describir, en un proceso real existe una zona de transferencia de materia en la que el sólido adsorbente se encuentra parcialmente saturado. El tiempo de ruptura indicará el momento en el que el lecho no podrá adsorber de manera eficaz más soluto, por lo que, a nivel industrial, este representa el tiempo en el que se debe detener el proceso de adsorción, con el objetivo de no perder una gran cantidad de compuesto en la corriente de salida.

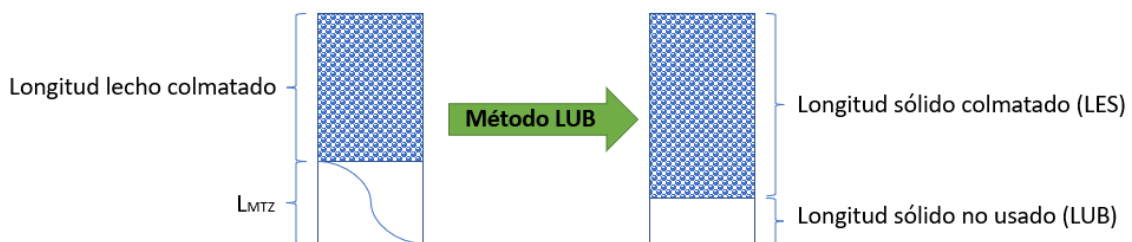


Figura 19: Método LUB para el diseño de columnas. Fuente: [Elaboración propia]

El método LUB para el escalado de columnas de adsorción a partir de datos de laboratorio se basa en realizar una columna equivalente para el momento en el que se da el punto de ruptura, considerando una redistribución del soluto en el adsorbente parcialmente colmatado, de tal manera que en dicha columna equivalente solo existan dos zonas: Una zona de lecho completamente colmatado, denominado como longitud de lecho colmatado (LES), y una zona de lecho completamente libre, denominado como longitud de lecho no usado (LUB). La suma de longitudes de LES y LUB es igual a la altura del lecho de adsorción, por lo que, en los siguientes puntos se abordará el cálculo de dichos parámetros. [31]

4.2. Análisis de la parte experimental

La realización del diseño de la columna de adsorción por el método LUB estará basado en los artículos de investigación [35][37].

De manera ideal, se busca la separación de la vainillina, producto de interés, del resto de compuestos de la corriente de alimentación. En un proceso de adsorción la separación entre dos compuestos es más eficaz cuando la forma de las respectivas curvas de ruptura de los compuestos difiere en gran medida. Este fenómeno se muestra claramente en el artículo [37], el cual será utilizado para la realización de los cálculos por aproximarse más fielmente a las condiciones del proceso de producción de vainillina planteado en este proyecto.

La bibliografía muestra pautas de la curva de ruptura distintas para los compuestos del proceso. Sin embargo, existe una excepción. Dicha excepción se halla entre la vainillina y el siringaldehído, los cuales presentan curvas de ruptura muy similares en las condiciones de operación del proceso, tal y como se muestra en la *Figura 20*. Este fenómeno implica que la separación entre estos dos compuestos sea muy complicada, por lo que el objetivo será su separación conjunta de la corriente de alimentación a la columna de adsorción, para proceder, en una etapa posterior del proceso, a dicha separación entre ellos. [35]

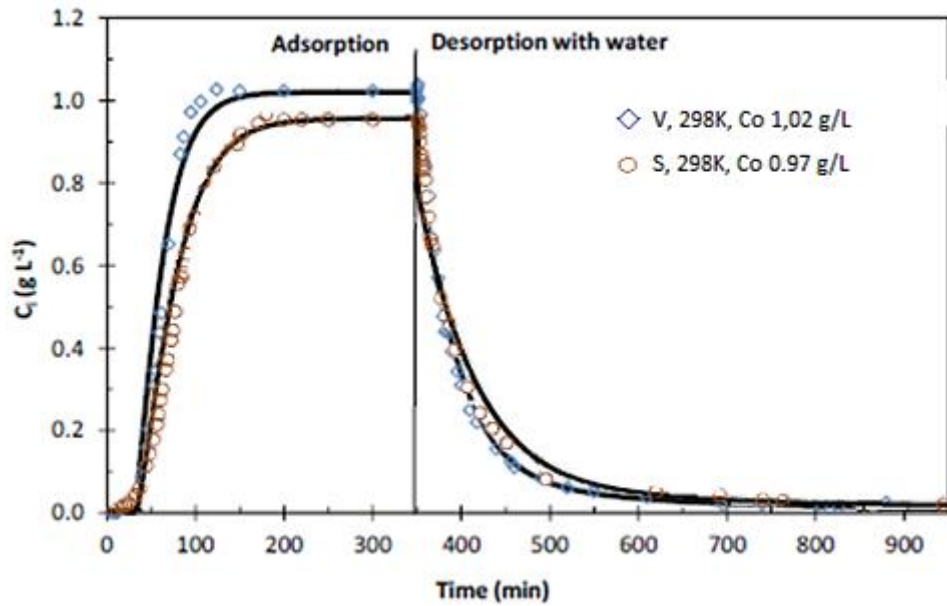


Figura 20: Curvas de adsorción experimentales de vainillina y siringaldehído. Experimento con caudal de alimentación 5mL/min, columna de 5,6x1 cm y porosidad 0,35. Fuente: Adaptado de [35]

El artículo proporciona además las isotermas de adsorción para unas condiciones de operación prácticamente idénticas a las de la alimentación de entrada a la columna del presente proceso. Serán por ello utilizadas para analizar en qué medida es favorable el proceso de adsorción. En la *Figura 21* y *Figura 22* se muestran las isotermas de adsorción obtenidas con datos experimentales y su respectivo ajuste siguiendo los modelos previamente descritos de Langmuir, Bi-Langmuir y Freundlich.

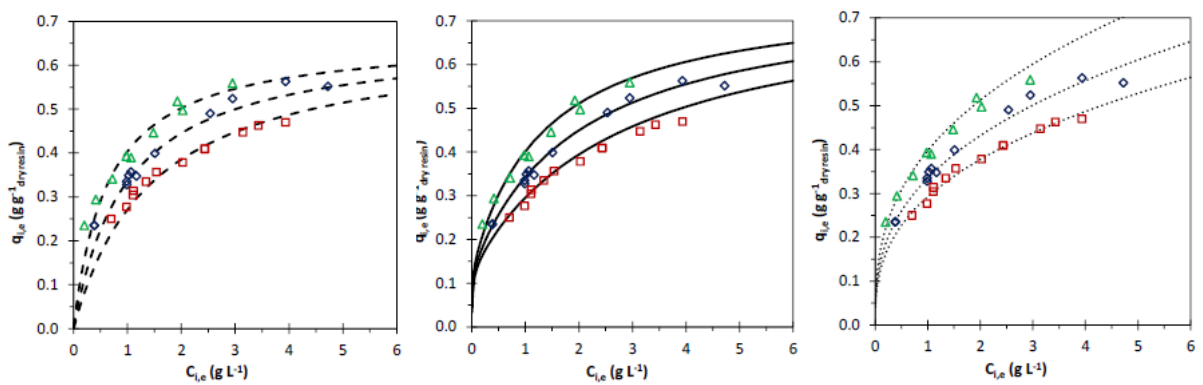


Figura 21: Isotermas de adsorción para Vainillina. Puntos representan datos experimentales (verde a 288K, azul a 298K, rojo a 313K). Líneas discontinuas representan el ajuste por el modelo de Langmuir, rectas sólidas el modelo de Bi-Langmuir y puntos discontinuos el modelo de Freundlich. Fuente:[35]

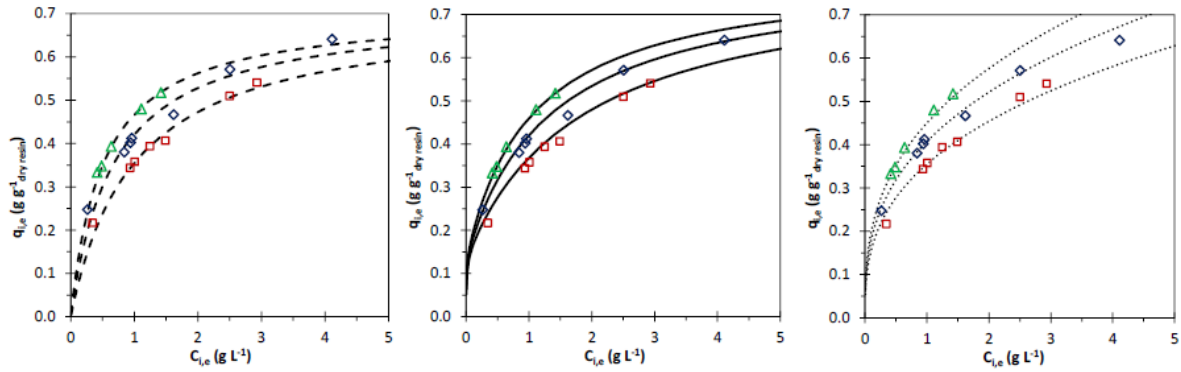


Figura 22: Isotermas de adsorción para siringaldehído. Puntos representan datos experimentales (verde a 288K, azul a 298K, rojo a 313K). Líneas discontinuas representan el ajuste por el modelo de Langmuir, rectas sólidas el modelo de Bi-Langmuir y puntos discontinuos el modelo de Freundlich. Fuente:[35]

Analizando las isotermas de adsorción anteriores para el caso de la vainillina y el siringaldehído, se puede concluir que el proceso de adsorción de ambos compuestos es favorable, dado que se ajusta al modelo de isoterma de adsorción con comportamiento favorable. Por otra parte, cabe destacar que el modelo que mejor se ajusta a los datos experimentales es el modelo de Bi-Langmuir.

Tal y como se ha mencionado anteriormente, en los experimentos reportados por la bibliografía empleada para la realización de los cálculos de diseño a partir de los datos experimentales obtenidos, se ha empleado el mismo material adsorbente que el seleccionado para este diseño (resina SP700). Además, dichos experimentos se han llevado a cabo bajo unas condiciones de operación prácticamente idénticas a las de la entrada de alimentación a la columna de adsorción objeto de diseño en este Anexo. Concretamente, en dicha experimentación, el proceso de adsorción se realiza bajo unas condiciones de alcalinidad muy extremas, de la misma manera que se ocurre en la columna a diseñar. El efecto que tiene la operación bajo estas condiciones de alcalinidad será analizado posteriormente.

4.2.1. Cálculos experimentales

El experimento que expone el artículo de la bibliografía [37] se ha realizado en una columna a escala de laboratorio empleando como material adsorbente la resina SP700 y bajo unas condiciones de operación que recoge la *Tabla 48*. Se ha preparado una corriente de alimentación acuosa con los distintos compuestos formados en el proceso de oxidación de la lignina Kraft, empleando NaOH para la alcalinización de dicha corriente.

El objetivo de esta parte será la determinación de la capacidad máxima de adsorción ($q_{A,Máx}$) de la vainillina en las condiciones de operación, así como la determinación del LES y LUB de la columna experimental. Se analizarán también otros parámetros como la velocidad superficial, intersticial y la LMTZ.

Cabe destacar que dicho experimento analiza la adsorción de la vainillina. Sin embargo, tal y como se explicó en el punto anterior, debido a que la curva de ruptura de la vainillina y siringaldehído para estas condiciones de operación puede asumirse como idéntica, los cálculos realizados en esta sección serán equivalentes a la adsorción de vainillina y siringaldehído. Este fenómeno será clave a la hora de realizar los cálculos del escalamiento.

Tabla 48: Características de la columna y condiciones experimentales para la vainillina. Fuente: [37]

Parámetro	Valor
L (m)	0,446
D (m)	0,026
Área columna (m ²)	5,31·10 ⁻³
Caudal volumétrico (L/h)	0,6
Co (g/L)	2,7
T (°C)	25
pH	13,48
Masa de sólido (g)	151,6
Porosidad lecho, ε	0,37
Peclet	555
ρ _{lecho} (kg/m ³)	1010

El proceso de adsorción fue analizado bajo las condiciones descritas anteriormente durante un período de 8 horas, en las cuales se ha realizado la medición de la concentración de salida.

La Figura 23 alberga las curvas de ruptura de los distintos compuestos evaluados, entre los que se encuentra la vainillina.

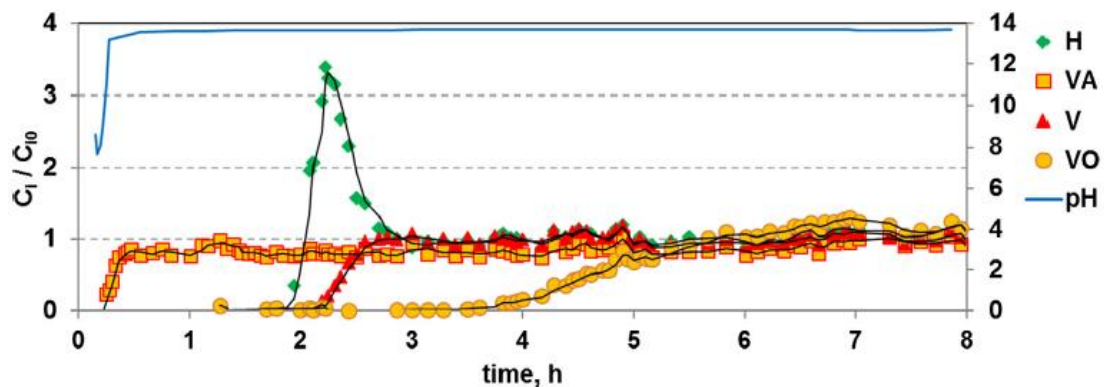


Figura 23: Relación de concentración de entrada y salida de los compuestos a lo largo del tiempo experimental. Vainillina representada como triángulo rojo. Condiciones: 25°C y pH 13,48. Fuente:[37]

Los resultados obtenidos de la experimentación permiten observar ciertos comportamientos. Por una parte, se concluye que otros compuestos presentes en la corriente de alimentación, tales como NaOH, lignina y otros compuestos ácidos presentes, como el ácido vainillínico, no son adsorbidos en el proceso, eluyendo directamente de la columna en la etapa de adsorción. Este fenómeno puede explicarse debido al pH de operación, ya que, al operar a un $\text{pH} > 10$ se provoca que las moléculas de los compuestos pasen de estar en estado neutro a presentar una carga negativa, lo cual hace a los compuestos más solubles y, por tanto, que experimenten una menor capacidad para adsorberse, en comparación con su estado neutro. Este fenómeno afecta a todos los compuestos, pero sobre todo al ácido vainillínico, que presentará dos cargas negativas, haciendo por tanto que eluya directamente de la columna sin ser adsorbido. Además, cabe destacar el fenómeno por el cual la vainillina es capaz provocar el desplazamiento de algunos compuestos que hayan podido ser adsorbidos, para ocupar de esta manera la posición en la superficie del sólido adsorbente. Este fenómeno se conoce como efecto *roll-up*, debido a la mayor atracción entre el sólido y la vainillina, en comparación con el resto de compuestos. [37]

Como conclusión, a pesar de que operar en estas condiciones de pH provoca una disminución de la cantidad de compuestos adsorbidos, se consigue que la adsorción sea más selectiva hacia la vainillina y el siringaldehído. [37]

Por otro lado, de la *Figura 23* se puede observar que la forma de las curvas de cada compuesto difiere entre ellas en gran medida, lo cual es un indicativo favorable sobre el proceso de separación.

Haciendo uso de programas informáticos como *WebPlotDigitalizer* y *SciDAVis*, se han extraído los datos de la *Figura 23* para la vainillina, con los que ha sido posible elaborar la curva de ruptura de este compuesto.

Tabla 49: Datos obtenidos experimentalmente para la elaboración de la curva de ruptura de la vainillina. Fuente: [Elaboración propia]

Tiempo (h)	Csal (g/L)	Csal/Co	1-Csal/Co		
0	0	0	1		
0,06007509	0	0	1		
0,1902378	0	0	1		
0,28035044	0	0	1		
0,39048811	0	0	1		
0,49061327	0	0	1		
0,59073842	0	0	1		
0,68085106	0	0	1		
0,84105131	0	0	1		
0,97121402	0	0	1		
1,26157697	0	0	1		
1,59198999	0	0	1		
1,73216521	0	0	1		
1,83229036	0	0	1		
1,922403	0	0	1		
2,00250313	0	0	1		
2,07259074	0	0	1		
2,12265332	0	0	1		
2,16270338	0,04202335	0,0155642	0,9844358		
2,20275344	0,08404669	0,0311284	0,9688716		
0,05Co	2,21489361	0,135	0,05	0,95	tr
2,22277847	0,16809339	0,06225681	0,93774319		
2,23279099	0,21011673	0,07782101	0,92217899		
2,2428035	0,25214008	0,09338521	0,90661479		
2,25281602	0,33618677	0,12451362	0,87548638		
2,28285357	0,5463035	0,20233463	0,79766537		
2,3028786	0,71439689	0,26459144	0,73540856		

Tiempo (h)	Csal (g/L)	Csal/Co	1-Csal/Co		
2,33291615	0,90291362	0,33441245	0,66558755		
2,35294118	1,05058366	0,38910506	0,61089494		
2,38297872	1,24027704	0,45936187	0,54063813		
2,40300375	1,34474708	0,49805447	0,50194553		
50%	2,40394242	1,35	0,5	0,5	tcentro
2,4330413	1,51284047	0,56031128	0,43968872		
2,46307885	1,68093385	0,62256809	0,37743191		
2,4931164	1,89105058	0,70038911	0,29961089		
2,52315394	2,05914397	0,76264591	0,23735409		
2,55319149	2,22723735	0,82490272	0,17509728		
2,58322904	2,35330739	0,87159533	0,12840467		
2,61326658	2,47937743	0,91828794	0,08171206		
2,65331665	2,56342412	0,94941634	0,05058366		
0,95Co	2,65400244	2,565	0,95	0,05	ts
2,68335419	2,63244747	0,97498054	0,02501946		
2,71339174	2,67059416	0,98910895	0,01089105		
2,74342929	2,68949416	0,99610895	0,00389105		
2,76345432	2,69430163	0,99788949	0,00211051		
2,78347935	2,69570416	0,99840895	0,00159105		
2,82352941	2,69624416	0,99860895	0,00139105		
2,87359199	2,69678416	0,99880895	0,00119105		
2,91364205	2,69729716	0,99899895	0,00100105		
2,9436796	2,69735116	0,99901895	0,00098105		
2,99374218	2,69786416	0,99920895	0,00079105		
3,10387985	2,69840416	0,99940895	0,00059105		
3,20400501	2,69894416	0,99960895	0,00039105		

Los datos experimentales mostrados en la *Tabla 49* son representados gráficamente, obteniendo la curva de ruptura, tal y como se muestra a continuación en la *Figura 24* y *Figura 25*.

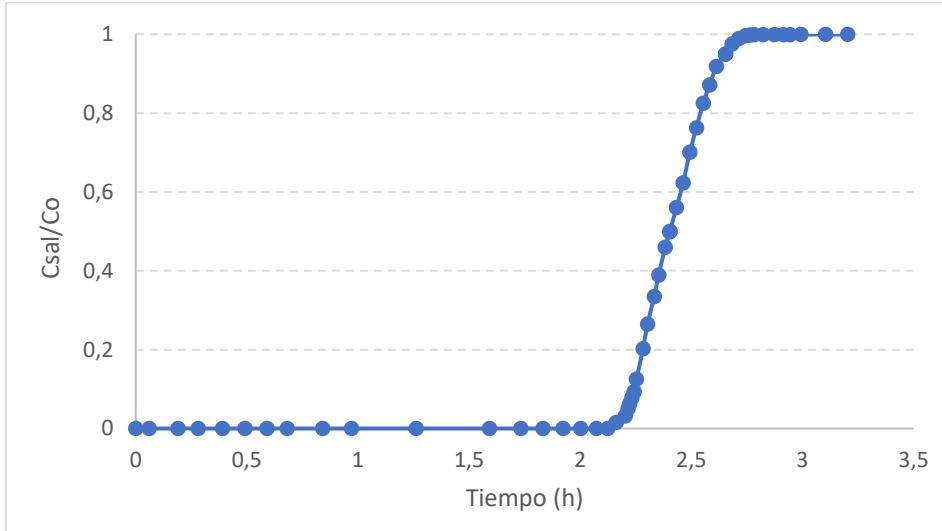


Figura 24: Curva de ruptura experimental de la vainillina. Fuente: [Elaboración Propia]

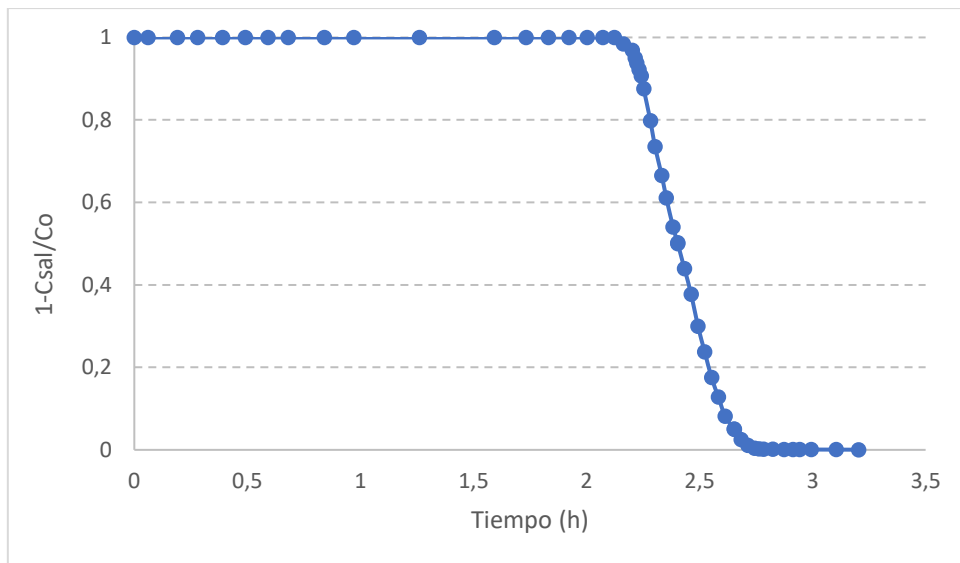


Figura 25: Curva de ruptura experimental de la vainillina. Fuente: [Elaboración propia]

Como puede observarse, se trata de una curva que presenta una forma simétrica, y que, además, se aproxima en buena medida a la forma en escalón que tendría la gráfica si el proceso fuese ideal. Esto es un indicativo de que una gran fracción de lecho está siendo completamente utilizado (fracción de lecho útil).

Se debe aclarar además que, tal y como se describió en el punto 4.1 *Estudio dinámico experimental de lechos fijos de adsorción*, el método LUB permite asumir la condición de patrón constante, lo cual significa que la longitud de la zona de transferencia de materia (L_{MTZ}) será constante y, por tanto, también lo será la forma de la curva de ruptura obtenida.

A partir de la *Figura 24* y *Tabla 49* de datos experimentales se pueden extraer directamente los datos de tiempo de ruptura (t_r), tiempo de centro de onda (t_{centro}), tiempo de saturación (t_s) y tiempo equivalente de transferencia de masa (t_{MTZ}). El valor del tiempo de ruptura idealizado (t_{ideal}) corresponderá, de manera rigurosa, al área bajo la curva de la *Figura 25* entre el tiempo inicial e infinito, pero que puede ser aproximada al área bajo la curva entre el tiempo inicial y final de los valores tomados, tal y como se muestra en la *Ecuación (79)*.

$$t_{ideal} = \int_0^{\infty} 1 - \frac{C_s}{C_o} dt \approx \int_0^{t_{final}} 1 - \frac{C_s}{C_o} dt \quad (79)$$

Habiendo obtenido estos datos, se procederá a calcular otros parámetros de relevancia necesarios caracterizar la columna de adsorción experimental y realizar posteriormente el escalado.

En primer lugar, se procederá a calcular aspectos dinámicos tales como la velocidad superficial y la velocidad intersticial, definiéndose esta última como la velocidad con la que el fluido discurre a través de los huecos del lecho.

$$V_{superficial} = \frac{F}{A_C} \quad (80)$$

$$V_{intersticial} = \frac{V_{superficial}}{\epsilon_{lecho}} \quad (81)$$

Siendo:

$V_{superficial}$: Velocidad superficial del fluido (m/s)

$V_{intersticial}$: Velocidad intersticial del fluido (m/s)

F : Flujo volumétrico (m^3/s)

A_C : Área de columna (m^2)

ϵ_{lecho} : Porosidad del lecho

La velocidad con la que avanza la zona de transferencia de masa o MTZ se denomina velocidad de frente de onda (U_{sh}). Una vez calculado este parámetro, es posible obtener la longitud de la zona de transferencia de masa (L_{MTZ}). Ambos parámetros se determinan a partir de las *Ecuaciones* (82) (83). [31]

$$U_{sh} = \frac{L}{t_{centro}} \quad (82)$$

$$L_{MTZ} = U_{sh} \cdot t_{MTZ} \quad (83)$$

Siendo:

U_{sh} : Velocidad de frente de onda (m/s)

L : Longitud del lecho (m)

L_{MTZ} : Longitud zona de transferencia de materia (m)

t_{centro} , t_{MTZ} : Tiempo de centro y tiempo equivalente de transferencia de materia, respetivamente (s)

A continuación, se procederá a calcular la capacidad de adsorción del adsorbente en el tiempo de ruptura ($q_{A,ruptura}$) y en el momento de saturación total ($q_{A,Máx}$). Este último parámetro resultará clave para el posterior escalamiento de la columna, ya que se trata de un parámetro intrínseco del adsorbente para las condiciones de operación. El cálculo se realiza a partir de la *Ecuación* (84) (85).

$$q_{A,ruptura} = \frac{F \cdot C_0}{m_{sólido}} \cdot \int_0^{t_{ruptura}} \left(1 - \frac{C_S}{C_0}\right) dt \quad (84)$$

$$q_{A,Máx} = \frac{F \cdot C_0}{m_{sólido}} \cdot t_{idealizado} \quad (85)$$

Siendo:

$q_{A,ruptura}$: Capacidad máxima de adsorción en el punto de ruptura (g/g_{sólido adsorbente})

$q_{A,Máx}$: Capacidad máxima de adsorción en el momento de saturación total (g/g_{sólido adsorbente})

F : Flujo volumétrico (L/s)

C_0 : Concentración de soluto a la entrada de alimentación (g/L)

$m_{sólido}$: Masa de sólido adsorbente contenido en la columna (g)

$t_{idealizado}$: Tiempo de ruptura idealizado (s)

Finalmente, podrá ser calculado el valor del LES y LUB para el lecho de adsorción experimental, previo cálculo de la fracción útil y no útil del mismo. Para ello, se hará uso de la Ecuación (86),(87),(88),(89).

$$f_{\text{útil}} = \frac{q_{A,ruptura}}{q_{A,Máx}} \approx \frac{t_{ruptura}}{t_{idealizado}} \quad (86)$$

$$f_{NO \text{ útil}} = 1 - f_{\text{útil}} \quad (87)$$

$$LES = L \cdot f_{\text{útil}} \quad (88)$$

$$LUB = L \cdot f_{NO \text{ útil}} \quad (89)$$

Siendo:

LES : Longitud de lecho completamente saturado o colmatado (m)

LUB : Longitud de lecho no usado (m)

L : Longitud de lecho (m)

Aplicando las ecuaciones y expresiones anteriormente descritas, se han obtenido los siguientes resultados para la columna experimental, mostrados en la *Tabla 50*.

*Tabla 50: Parámetros calculados para la columna experimental operando bajo las condiciones descritas.
Fuente:[Elaboración Propia]*

Parámetro	Valor
$t_{ruptura}$ (h)	2,21
t_{centro} (h)	2,40
$t_{saturación}$ (h)	2,65
t_{MTZ} (h)	0,44
$t_{idealizado}$ (h)	2,41

Parámetro	Valor
$V_{\text{superficial}}$ (cm/s)	0,031
$V_{\text{intersticial}}$ (cm/s)	0,085
U_{sh} (cm/s)	0,005
L_{MTZ} (m)	0,081
$q_{\text{A, ruptura}}$ (mg/g sólido adsorbente)	23,67
$q_{\text{A, Máx}}$ (mg/g sólido adsorbente)	25,79
f_{util}	0,92
f_{NOutil}	0,08
LES (m)	0,41
LUB (m)	0,036

Quedan, de esta manera, concluidos los cálculos relacionados con la columna experimental y cuyos datos serán usados en el siguiente punto para la realización del escalamiento de la columna de adsorción.

4.2.2. Escalamiento de la columna de adsorción

Una vez realizados los cálculos para la columna experimental, se procede a realizar el escalamiento de dicha columna. En primer lugar, se debe remarcar que las condiciones de operación de la columna a escala, tales como presión, temperatura y pH, y tipo de resina usada, serán iguales a las condiciones de operación a los que fueron obtenidos los datos de la columna experimental. Esta condición será crítica ya que, de no cumplirse, ciertos valores obtenidos de la columna experimental, tales como la capacidad máxima de adsorción ($q_{\text{A,Máx}}$) o LUB experimental, no serían válidos para la realización de los cálculos de escalamiento.

Se debe recordar que en este proceso a escala se adsorberán vainillina y siringaldehído al sólido adsorbente. Por este motivo, para la realización de los cálculos de escalamiento se considerarán ambos compuestos como si fuera un solo compuesto equivalente, el cual se denominará a partir de este momento como “mezcla”. Se tendrán en cuenta las concentraciones de ambos compuestos en la corriente de entrada para el cálculo de caudal másico de mezcla. Los valores de densidad y peso molecular de mezcla se han obtenido mediante el simulador *Aspen HYSYS* y *Aspen PLUS* a las condiciones de operación.

Tabla 51: Caudales másicos y volumétricos de vainillina, siringaldehído y mezcla. Datos de densidad y PM obtenidos del simulador Aspen HYSYS y ASPEN PLUS. Fuente: [Elaboración propia]

ρ_{mezcla} : 1211 kg/m ³ PM_{mezcla} : 156,7 kg/kmol	Vainillina	Siringaldehído	Mezcla
F_{másico} escala (kg/h)	119,81	25,51	145,32
F_{volumétrico} escala (m³/h)	0,10	0,019	0,120

Tabla 52: Caudales másicos y volumétricos de la corriente de alimentación y concentración de mezcla a la entrada. Dato de densidad obtenido del simulador Aspen HYSYS. Fuente: [Elaboración propia]

$\rho_{alimentación}$: 1029 kg/m ³	Alimentación a la columna
F_{másico} total (kg/h)	22.073,84
F_{volumétrico} total (m³/h)	21,60
C_o mezcla (g/L)	6,72

Se deben realizar una serie de consideraciones para realizar el escalamiento siguiendo el método LUB. En primer lugar, se considerará el modelo de flujo en pistón con dispersión axial dentro de la columna, sin que exista dispersión radial. Segundo, no existirán gradientes de temperatura, siendo la operación de tipo isotérmico. Por último, se asumirá que la porosidad será constante a lo largo de lecho de adsorción. [35]

Los cálculos se dividirán en dos partes. En primer lugar, se realizarán los cálculos para obtener el valor de LES a escala. A continuación, se realizarán los cálculos para obtener el valor de LUB a escala. La longitud de lecho será la suma de estos dos parámetros.

CÁLCULO DEL LES_{escala}

El cálculo del LES a escala comienza con la determinación de la cantidad de sólido que forma parte de dicha zona de la columna, a partir de la *Ecuación (90)*.

$$m_{sólido\ LES} = \frac{F_{esc} \cdot t_{ruptura\ esc}}{q_{A,Máx}} \quad (90)$$

Siendo:

$m_{\text{sólido LES}}$: Masa de sólido adsorbente correspondiente al LES a escala (kg)

F_{esc} : Caudal másico de mezcla (kg/h)

$t_{\text{ruptura esc}}$: Tiempo de ruptura a escala (h)

$q_{a,\text{Máx}}$: Capacidad máxima de adsorción en el momento de saturación total (kg/kg_{sólido adsorbente})

La capacidad máxima de adsorción en el momento de saturación total ($q_{A,\text{Máx}}$) es una característica intrínseca del sólido a las condiciones de operación determinadas. Por ello, teniendo en cuenta que las condiciones de operación son iguales a las del experimento, el valor de este parámetro no varía.

Por otra parte, el tiempo de ruptura a escala será un parámetro de diseño a fijar, y que se determina teniendo en cuenta la curva de ruptura y el balance de materia, en función de la cantidad de soluto adsorbido.

Una vez determinada la masa de sólido, el valor de LES de escala podrá ser calculado a partir de la *Ecuación (91)*.

$$LES_{\text{esc}} = \frac{m_{\text{sólido LES}_{\text{esc}}}}{A_{C,\text{esc}} \cdot \rho_{\text{lecho}}} \quad (91)$$

Siendo:

LES_{esc} : Longitud de lecho completamente colmatado o “ideal” a escala (m)

$A_{C,\text{esc}}$: Área de la columna a escala (m²)

ρ_{lecho} : Densidad del lecho (kg/m³)

El LES_{esc} hace referencia a la longitud de lecho que haría falta para llevar a cabo la adsorción de una cantidad de masa de soluto si el proceso fuese ideal. Sin embargo, dado que esto no ocurre, para lograr obtener esa masa de soluto adsorbido calculado será necesario añadir una longitud extra de lecho, correspondiente al LUB_{esc} .

Cabe destacar que, debido a que para el diseño se está aplicando un método de escalamiento, la densidad de lecho a escala no variará con respecto a la del experimento.

CÁLCULO DEL LUB_{escala}

Para el cálculo del LUB_{escala} se debe tener en cuenta que este es un parámetro que no depende de la altura de la columna, sino que depende del adsorbato y de la velocidad del fluido. Si el adsorbato es el mismo tanto para el caso experimental como para el modelo a escala, entonces el LUB solo dependerá de la velocidad superficial. En el caso de que la velocidad superficial fuese igual tanto para el modelo experimental como para el modelo a escala, entonces el LUB sería idéntico en ambos casos.

Sin embargo, lo habitual es que las velocidades superficiales de ambos modelos no coincidan. Para esos casos, se debe tener en cuenta que el LUB es directamente proporcional a la longitud de la zona de transferencia de materia (L_{MTZ}), que a su vez depende de la velocidad superficial del fluido, el diámetro de partícula del material adsorbente y de la difusividad efectiva. Teniendo en cuenta que, para el presente caso el material adsorbente es el mismo y las condiciones de operación no varían, pueden despreciarse los dos últimos factores. Por tanto, el LUB_{escala} se calculará a partir de la Ecuación (92) y (93). La masa de sólido que forma parte de esta zona se calcula a partir de la Ecuación (94).

$$V_{superficial\ escala} = \frac{F_{esc}}{A_{C,esc}} \quad (92)$$

$$LUB_{esc} = \frac{V_{superficial\ escala}}{V_{superficial\ experimental}} \cdot LUB_{experimental} \quad (93)$$

$$m_{sólido\ LUB,esc} = LUB_{esc} \cdot A_{C,esc} \cdot \rho_{lecho} \quad (94)$$

Siendo:

LUB_{esc} : Longitud de lecho no usado a escala (m)

$V_{superficial\ escala}$: Velocidad superficial del fluido en la columna a escala (m/s)

$m_{sólido\ LUB,esc}$: Masa de sólido adsorbente correspondiente al LUB a escala (kg)

F_{esc} : Caudal volumétrico total que fluye por la columna a escala (m³/s)

$A_{C,esc}$: Área de columna a escala (m²)

$V_{superficial\ experimental}$: Velocidad superficial del fluido en la columna experimental (m/s)

A continuación, la longitud total de lecho es el resultado de la suma de los valores de LES_{esc} y LUB_{esc} , tal y como se indica en la *Ecuación (95)*. Por otra parte, la masa de sólido adsorbente total en la columna a escala es el resultado de la suma de los valores de $m_{sólido\ LES,esc}$ y $m_{sólido\ LUB,esc}$, tal y como se muestra en la *Ecuación (96)*.

$$L = LES_{esc} + LUB_{esc} \quad (95)$$

$$m_{sólido,esc} = m_{sólido\ LES,esc} + m_{sólido\ LUB,esc} \quad (96)$$

Siendo:

L : Longitud total a escala de lecho de adsorción (m)

$m_{sólido,esc}$: Masa de sólido adsorbente total en la columna a escala (kg)

En este punto, ya puede ser calculada la fracción útil del lecho, empleando los datos del modelo a escala en la *Ecuación (97)* y *(98)*.

$$f_{útil} = \frac{LES_{esc}}{L} \quad (97)$$

$$f_{NO\ útil} = 1 - f_{útil} \quad (98)$$

En este punto, ya es posible calcular otros parámetros, tales como la velocidad del frente de onda ($U_{sh, esc}$) y la longitud de la zona de transferencia de materia ($L_{MTZ,esc}$) de la columna de adsorción a escala, empleando la relación de velocidad superficial del fluido en la columna de experimentación y en la columna a escala, a partir de las *Ecuaciones (99)* y *(100)*. [31]

$$U_{sh,esc} = U_{sh,exp} \cdot \frac{V_{superficial,esc}}{V_{superficial,exp}} \quad (99)$$

$$L_{MTZ,esc} = L_{MTZ,exp} \cdot \frac{V_{superficial,esc}}{V_{superficial,exp}} \quad (100)$$

Siendo:

$U_{sh,esc}$: Velocidad del frente de onda en la columna a escala (m/s)

$U_{sh,exp}$: Velocidad del frente de onda en la columna experimental (m/s)

$V_{superficial,esc}$: Velocidad superficial del fluido en la columna a escala (m/s)

$V_{superficial,exp}$: Velocidad superficial del fluido en la columna experimental (m/s)

$L_{MTZ,esc}$: Longitud de la zona de transferencia de materia en la columna a escala (m)

$L_{MTZ,exp}$: Longitud de la zona de transferencia de materia en la columna experimental (m)

Por otra parte, se calcula el parámetro de tiempo equivalente de transferencia de materia ($t_{MTZ,esc}$) del modelo a escala, a partir de la *Ecuación (101)*.

$$t_{MTZ,esc} = \frac{L_{MTZ,esc}}{U_{sh,esc}} \quad (101)$$

Siendo:

$t_{MTZ,esc}$: Tiempo equivalente de transferencia de materia a escala (h)

$L_{MTZ,esc}$: Longitud de la zona de transferencia de materia en la columna a escala (m)

$U_{sh,esc}$: Velocidad del frente de onda en la columna a escala (m/h)

Finalmente, para determinar todas las medidas totales del lecho de adsorción a escala empleado en este proceso para la separación de vainillina y siringaldehído se seguirá un proceso iterativo.

En un primer momento, para realizar los cálculos de escalamiento se utiliza un área de columna supuesto. Esto permite realizar los cálculos para la obtención de los parámetros de longitud, diámetro y volumen de lecho en el modelo a escala. Sin embargo, la altura real de la columna no es igual a la del lecho, ya que se debe tener en cuenta el material inerte que irá dispuesto en la parte superior e inferior del lecho. Por tanto, para determinar la altura real se debe recalcular el volumen, empleando para ello un coeficiente de 1,2. El sobredimensionamiento del volumen en un 20% se realiza para tener en cuenta el material inerte en la columna. Una vez calculado, el volumen sobredimensionado se divide entre el área de columna supuesto, obteniendo como resultado la altura real, la cual incluye la altura del lecho más la longitud debida al sobredimensionamiento para el material inerte. A continuación, se debe emplear la relación L/D, teniendo en cuenta que el valor de L hace referencia al valor de longitud sobredimensionada.

Es habitual en este tipo de columnas el empleo de una relación L/D de entre 3-5 para asegurar un uso eficiente del lecho. En este diseño se aplicará una relación intermedia, L/D=4. [13] Finalmente, para recalcular todos los parámetros atendiendo a esta condición de L/D, se utilizará la herramienta *Solver* del programa *Microsoft Excel*, fijando como celda objetivo la relación L/D y estableciendo que esta debe tener un valor de 4. Se indica la celda variable, que en este caso será el área de la columna, la cual fue supuesta en un primer momento para la realización de los cálculos. Una vez realizadas las iteraciones necesarias, se obtienen los nuevos valores finales de las dimensiones de la columna, para una relación L/D de 4, las cuales se muestran en la *Tabla 53*.

Tabla 53: Resultados de los parámetros calculados de la columna de diseño. Fuente: [Elaboración propia]

LES _{esc} (m)	5,55
LUB _{esc} (m)	0,29
Altura de lecho calculada, L (m)	5,84
Volumen de lecho, V _{lecho} (m ³)	14,09
f _{útil}	0,95
f _{NO útil}	0,05
Tiempo de operación, t _{r,esc} (h)	2,4
Volumen de lecho sobredimensionado, V _{lechoSD} (m ³)	16,91
Altura sobredimensionada, L _{SD} (m)	7,01
Diámetro de columna, D (m)	1,75
Área de columna, A _c (m ²)	2,41
L/D	4
Masa de sólido adsorbente, m _s (kg)	14.231,08
Velocidad superficial, V _{superficial esc} (m/s)	2,49 · 10 ⁻³
Velocidad intersticial, V _{intersticial esc} (m/s)	6,72 · 10 ⁻³
U _{sh} (m/s)	4,1 · 10 ⁻⁴
L _{MTZ} (m)	0,65
t _{MTZ} (h)	0,439

4.3. Proceso de desorción

El proceso de desorción se llevará a cabo mediante el método de elución con 2 eluyentes, alimentados desde la parte superior de las columnas en dirección descendente. Este método se basa en el empleo de un primer eluyente, agua desionizada, que desorberá los compuestos con menor fuerza de adsorción como es el caso de la vainillina y el siringaldehído. En la segunda etapa, se empleará una solución de etanol al 96% con el objetivo de desorber cualquier compuesto restante que pueda haber quedado adherido al adsorbente. Tras este proceso, el lecho se encuentra completamente regenerado y preparado para llevar a cabo un nuevo ciclo de adsorción. [37]

El método LUB no es válido para el diseño de la desorción. Por este motivo, es necesario basarse en datos experimentales y estudios para determinar la forma en la que se lleva a cabo en este proceso. Basándose en las investigaciones y experimentos que se recogen en [37][40] se establece que las etapas de desorción tendrán una duración de 1 hora para la etapa de desorción con agua desionizada, mientras que, en la desorción con etanol la etapa tendrá una duración de 30 minutos. La diferencia de tiempo para el caso de la etapa de desorción con etanol con respecto a la del agua desionizada se justifica debido a que los datos obtenidos en los distintos experimentos mostrados en la bibliografía [37][41] corroboran que ese es el tiempo necesario para garantizar la desorción de impurezas, como ácidos fenólicos y trazas de acetovainillona, que hayan podido quedar adsorbidos en el material adsorbente, permitiendo que el proceso de regeneración de la resina se lleve a cabo de manera satisfactoria. Por otra parte, se indica un caudal volumétrico para los eluyentes igual al de la corriente de alimentación a la columna. Todo ello hace que se obtenga un rendimiento en el proceso global de desorción de vainillina y siringaldehído de un 93,3%.

4.4. Operación de las columnas

Tal y como se ha explicado anteriormente, el proceso completo que se sigue en cada una de las columnas de adsorción de este proceso se compone de varias etapas. En primer lugar, la etapa de adsorción se lleva a cabo durante un tiempo de 2,4 horas. A continuación, la etapa de desorción con agua desionizada se lleva a cabo durante 1 hora. Finalmente, la etapa de desorción con disolución de etanol al 96% o regeneración se lleva a cabo durante 30 minutos. La operación se ha diseñado de tal manera que ambas columnas, T-201 y T-202, no puedan realizar una misma operación al mismo tiempo. Esto se debe a que, de lo contrario, el diseño riguroso de las columnas, así como el control de su operación, sería sumamente complicado, ya que existirían caudales de entrada a las columnas diferentes dependiendo del momento y etapa en la que se encuentren. Además, con esto se consigue la realización de un proceso de tipo cíclico.

Por tanto, teniendo en cuenta estos aspectos, se observa que existe un pequeño margen de tiempo de 0,9 horas en el que una de las columnas se encuentra en espera. Este fenómeno entra dentro de la normalidad, dado que es típico en los procesos cíclicos de adsorción-desorción. [32]

En la *Figura 26* se muestra el diagrama de distribución de tiempos de cada columna en un ciclo completo de adsorción-desorción. Un ciclo completo se alcanza cuando se realizan las 3 etapas descritas en ambas columnas, cuyo tiempo total asciende a 4,8 horas.

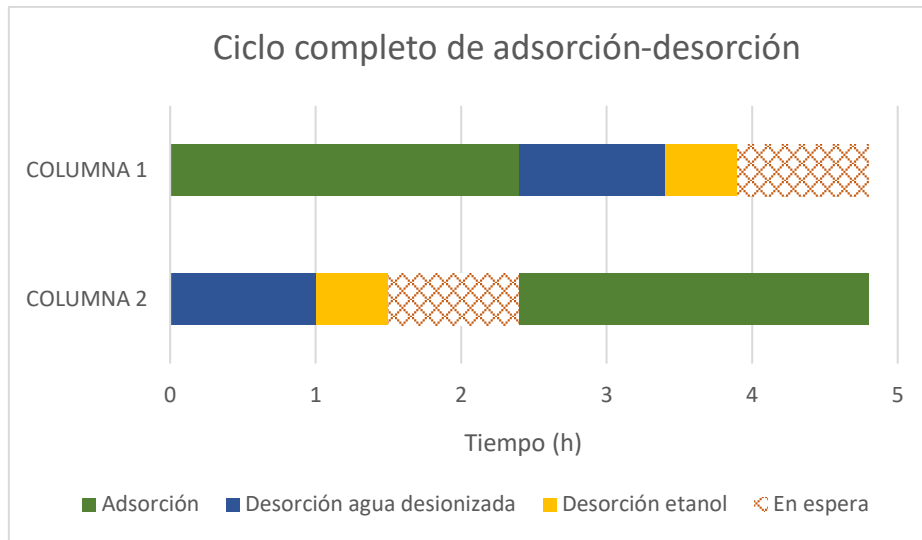


Figura 26: Distribución de tiempos de operación en las columnas de adsorción. Fuente:[Elaboración propia]

El sistema de control que regula cada etapa ha sido descrito con detalle en el *Documento I. MEMORIA. Sección 10. Estrategia de control del proceso.*

4.5. Balance de materia en la columna de diseño

El balance de materia en la columna establece la variación de la cantidad de soluto adsorbido en el sólido adsorbente en función del tiempo.



Figura 27: Evolución de la masa de soluto adsorbido por la masa de sólido adsorbente en función del tiempo. Fuente: [Elaboración propia]

La expresión que modeliza dicho balance de adsorbato en función del tiempo se encuentra en la *Ecuación (102)*.

$$m_A(t) = F \cdot C_o \cdot \int_0^t 1 - \frac{C_s}{C_o} dt \quad (102)$$

Siendo:

$m_A(t)$: Masa de soluto adsorbido en el lecho en función del tiempo (kg/h)

F : Caudal volumétrico total de entrada (m³/h)

C_o : Concentración de adsorbato a la entrada del lecho (kg/m³)

C_s : Concentración de adsorbato a la salida del lecho (kg/m³)

t : Tiempo de operación (h)

Para el cálculo de la masa de adsorbato, se tiene en cuenta el tiempo de operación de 2,4 horas y los datos sobre la corriente de entrada. El resultado de la operación será la cantidad de soluto adsorbida por cada ciclo de adsorción de 2,4 horas. Estableciendo la relación entre la masa de mezcla que entra a la columna y la cantidad adsorbida por hora, se obtiene el rendimiento de la etapa de adsorción, mostrado en la *Tabla 54*.

Tabla 54: Balance de materia al adsorbato en la etapa de adsorción. Fuente: [Elaboración propia]

Caudal de entrada, F (m ³ /h)	21,60
Co mezcla (kg/m ³)	6,73
Caudal entrada de mezcla (kg/h)	145,32
Tiempo de operación del ciclo de adsorción (h)	2,4
mA (kg/ciclo adsorción)	341,28
mA (kg/h)	142,20
mA no adsorbido (kg/h)	3,12
Rendimiento proceso adsorción (η)	97,9%

Por otra parte, se ha determinado a partir de la bibliografía que la etapa de desorción con agua desionizada para la recuperación de los compuestos de interés tiene un rendimiento del 93,3%. Con ello, puede realizarse un balance de materia para la etapa de desorción, partiendo de la etapa de adsorción, previamente mostrada. Los resultados se muestran en la *Tabla 55*.

Tabla 55: Balance de materia al adsorbato en la etapa de desorción. Fuente: [Elaboración propia]

mA (kg/h)	142,20
Rendimiento proceso de desorción (η)	93,3%
mA recuperado en desorción (kg/h)	132,67
mA no recuperado en desorción (kg/h)	9,53

Estos cálculos permiten determinar el rendimiento global del proceso, teniendo en cuenta para ello la masa de soluto que entra en la columna, la masa de soluto adsorbida, la masa de soluto que se logra recuperar tras el proceso de desorción con agua desionizada y la masa de soluto total que se pierde tras las etapas de adsorción y desorción, por hora.

Tabla 56: Rendimiento global del proceso. Fuente: [Elaboración propia]

Caudal entrada de mezcla (kg/h)	145,32
Mezcla total recuperada (kg/h)	132,67
Mezcla total perdida (kg/h)	12,65
Rendimiento global del proceso (η)	91,3%

Finalmente, en la *Tabla 57* se recogen los datos del balance de materia global del equipo, demostrando el cierre del balance de materia en la columna de adsorción diseñada del proceso.

Tabla 57: Balances de materia por componente de la columna de adsorción de diseño. Fuente:[Elaboración propia]

Corrientes/ Compuestos	Entradas			Salidas	
	Flujo másico (kg/h)			Flujo másico (kg/h)	
	C. 28	C. 30	C. 32	C.33	C.34
Lignina	3,54	-	-	3,54	-
NaOH	1.518,80	-	-	1.518,80	-
O ₂	-	-	-	-	-
N ₂	-	-	-	-	-
H ₂ O	18.928,08	-	861,36	19.789,43	-
Vainillina	119,81	-	-	10,30	109,50
Siringaldehído	25,51	-	-	2,20	23,31
Ac. vainillínico	59,76	-	-	59,76	-
Compuestos X	1.418,35	-	-	1.418,35	-
Etanol	-	-	16.380,45	16.380,45	-
H ₂ O _{desionizada}	-	21.534,12	-	-	21.534,12
NH ₃	-	-	-	-	-
TOTAL		60.849,77		60.849,77	

4.6. Balance de energía en la columna de diseño

Al comienzo del presente documento de diseño de la columna de adsorción, se realizó una introducción a los fundamentos de adsorción. En el apartado *1.Introducción* se explicaron las razones físicas que hacen que el proceso de adsorción sea de carácter exotérmico. Resulta indispensable, tanto para el diseño como para el rendimiento de separación, que la columna de adsorción opere en condiciones isotérmicas. Es por este motivo que se analizará en este apartado el gradiente térmico provocado en el proceso de adsorción aquí propuesto.

El balance de energía se establecerá a partir de la siguiente *Ecuación (103)*.

$$\dot{Q} = \dot{m} \cdot C_p \cdot \Delta T \quad (103)$$

Siendo:

\dot{Q} : Flujo de calor de adsorción intercambiado (kJ/h)

\dot{m} : Caudal másico del fluido de entrada a la columna (kg/h)

C_p : Calor específico del fluido (kJ/kg·°C)

ΔT : Gradiente térmico (°C)

Tal y como se ha explicado anteriormente, el objetivo de este balance es determinar el gradiente térmico que experimenta la corriente de fluido total de alimentación provocada por la adsorción de los compuestos que forman la denominada “mezcla” (vainillina y siringaldehído). El primer paso será, por tanto, determinar el flujo de calor liberado del proceso de adsorción de la mezcla de ambos compuestos. Dicho flujo de calor se determinará con la *Ecuación (104)*. [35]

$$\dot{Q} = \dot{m}_{mezcla} \cdot \Delta H_{isostérica\ mezcla} \quad (104)$$

Siendo:

\dot{Q} : Flujo de calor de adsorción intercambiado (kJ/h)

$\dot{m}_{mezcla\ adsorbida}$: Caudal molar de mezcla (mol/h)

$\Delta H_{isostérica\ mezcla}$: Entalpía isostérica de adsorción de mezcla (kJ/mol)

El calor isostérico de adsorción $\Delta H_{isostérica}$ (kJ/mol) es un parámetro que indica la fuerza del enlace que se establece en el proceso de adsorción de un adsorbato en un adsorbente.

Este parámetro puede ser determinado mediante la ecuación de Clausius-Clapeyron, *Ecuación (105)*. [35]

$$\frac{\Delta H_{isostérica}}{RT} = \left[\frac{\partial (\ln C_{i,e})}{\partial T} \right]_{q_{i,e}} \quad (105)$$

Siendo:

$\Delta H_{isostérica}$: Entalpía isostérica de adsorción de mezcla (kJ/mol)

R : Constante de los gases ideales (kJ/mol·K)

T : Temperatura (K)

$C_{i,e}$: Concentración en equilibrio del compuesto i en la disolución (g/L)

Sin embargo, en este caso no se disponen de datos suficientes sobre las isothermas de adsorción como para realizar el cálculo de la entalpía isostérica. Por ello, se recurre a los datos aportados de bibliografía [35], de donde se extrae el dato de entalpía isostérica calculada mediante la ecuación de Clausius-Clapeyron, así como de la entalpía obtenida mediante el uso del modelo de Langmuir. En el primer caso, la bibliografía indica una entalpía isostérica de -19 ± 1 kJ/mol, mientras que en el segundo caso el valor de la entalpía es de -20 kJ/mol. Dado que se trata de valores muy similares, se usará el valor de entalpía obtenida mediante el modelo de Langmuir, ya que es el que reporta un valor más elevado de entalpía y, por tanto, el que mayor gradiente térmico generará.

En la *Tabla 58* se muestran los valores empleados para los cálculos y los resultados obtenidos.

Tabla 58: Cálculo del gradiente térmico del fluido. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
$\Delta H_{isostérica}$ (kJ/mol)	-20
$\dot{m}_{mezcla\ adsorbida}$ (mol/h)	907,47
\dot{Q} (kJ/h)	-18.149,40
Ciclo de adsorción (h)	2,4
\dot{Q} (kJ/ciclo adsorción)	-43.558,56
\dot{m}_{fluido} (kg/h)	22.073,84
\dot{m}_{fluido} (kg/ciclo adsorción)	52.977,22
C_p (kJ/kg °C)*	3,7524
ΔT (°C)	0,22

*Dato de C_p obtenido con el simulador Aspen HYSYS y Aspen PLUS

Como se puede observar, el gradiente térmico que se produce en un ciclo de adsorción no alcanza a ser un valor representativo que pueda afectar al rendimiento de la operación. Por este motivo, se concluye que no es necesaria la implementación de un sistema de refrigeración en la columna de adsorción.

4.7. Análisis de la caída de presión

En este punto se analizará la caída de presión producida por el paso del fluido a través del lecho de adsorción. Para ello, se hará uso de la ecuación de *Ergun* (Ecuación (106)), válida para cualquier patrón de flujo. Los resultados obtenidos sobre la caída de presión se muestran en la *Tabla 59*.

$$\frac{\Delta_p}{L} = 150 \frac{(1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu \cdot v_{superficial\ fluido}}{D_p^2} + 1,75 \frac{(1 - \varepsilon) \cdot \rho_{fluido} \cdot v_{superficial\ fluido}^2}{\varepsilon^3 \cdot D_p} \quad (106)$$

Siendo:

Δ_p : Caída de presión (Pa)

L : Longitud del lecho (m)

ε : Porosidad del lecho

ρ_{fluido} : Densidad del fluido (kg/m³)

μ : Viscosidad del fluido (N·s/m²)

$v_{superficial\ fluido}$: Velocidad superficial del fluido (m/s)

D_p : Diámetro de partícula (m)

Tabla 59: Cálculo de la caída de presión en la columna de diseño. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
L_{lecho} (m)	5,84
ε	0,37
ρ_{fluido} (kg/m ³)	1022
μ (kg/m.s)	$1,11 \cdot 10^{-3}$
$v_{superficial\ fluido}$ (m/s)	$2,49 \cdot 10^{-3}$
D_p (m)	$4,5 \cdot 10^{-4}$
Δ_p (Pa)	95.476,45
Δ_p (bar)	0,95

El fabricante de la resina SP700 aporta, además, una gráfica de relación entre el flujo de fluido, la temperatura y la caída de presión. Por ello, se realizará la determinación de la caída de presión siguiendo estos parámetros y se compararán los resultados obtenidos con la ecuación de *Ergun*. [38]

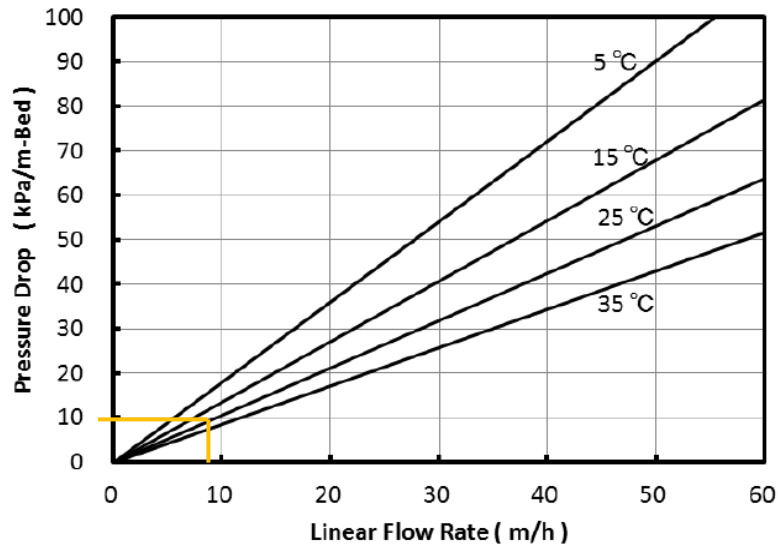


Figura 28: Caída de presión obtenida gráficamente. Fuente:[38]

Teniendo en cuenta la velocidad superficial y la temperatura de operación, se obtiene un resultado de pérdida de presión de 9,5 kPa/m. Teniendo en cuenta que la altura de lecho 5,84 metros, **la caída de presión total asciende a 55,48 kPa o 0,55 bar.**

En conclusión, la caída de presión ha sido calculada siguiendo la expresión de *Ergun* y mediante el análisis gráfico aportado por el fabricante de la resina SP700. Ambos resultados de caída de presión son razonables, entrando dentro de un margen aceptable. El valor de los resultados difiere, dependiendo del método de determinación de caída de presión empleado.

A modo de medida preventiva, se asumirá el valor de caída de presión correspondiente al obtenido con la ecuación de Ergun, **0,95 bar**. Esta elección también se respalda en la mayor fiabilidad que aporta el uso de un método matemático de cálculo.

5. Diseño mecánico de la columna de adsorción

En el siguiente apartado se recogerán las consideraciones y cálculos realizados para el diseño mecánico de las columnas de adsorción T-201 y T-202.

La realización del diseño mecánico comienza considerando la columna de adsorción como un recipiente a presión, con forma cilíndrica y dispuesto en posición vertical.

Por la condición de recipiente a presión, el diseño mecánico estará sujeto al código de diseño *ASME BPV Sección VIII, División I para calentadores y recipientes a presión*.

5.1. Determinación de las condiciones de diseño

El primer paso que se debe seguir para la realización del diseño mecánico de un equipo es la determinación de las condiciones de diseño, a partir de las condiciones de operación. Las condiciones de diseño llevan implícito un sobredimensionamiento de las condiciones de operación, con el objetivo de asegurar que el equipo de proceso diseñado resista dichas condiciones con una cierta tolerancia a mayores.

La presión y la temperatura son dos de las condiciones más importantes a tener en cuenta para el diseño mecánico.

5.1.1. Presión y temperatura de diseño

La presión y temperatura de diseño se calcula a partir de las condiciones de operación del equipo, añadiéndole un factor de aumento, tal y como se describe en la *Ecuación (107)* y *(108)*. [13]

$$P_{diseño} = P_{operación} \cdot 1,1 \quad (107)$$

$$T_{diseño} = T_{operación} + 50^{\circ}\text{F} \quad (108)$$

Teniendo en cuenta que la presión de operación es 2,4 bar y la temperatura de operación 25°C, para el cálculo de los valores de diseño se asumirá un 10% a mayores de la presión de operación, mientras que, en el caso de la temperatura, se sumarán 50°F a la temperatura más alta esperada, que será de 25,22°C, debido al carácter exotérmico de la adsorción, la cual es igual a 77,4°F.

Tabla 60: Condiciones de diseño de la columna de adsorción. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
$P_{\text{diseño}}$ (bar)	2,64
$T_{\text{diseño}}$ (°C)	53

5.2. Elección del material para el diseño

El material de fabricación de la columna de adsorción será el segundo parámetro a determinar. En el proceso de selección, se debe tener en cuenta la compatibilidad del material con los compuestos y condiciones de operación, lo cual obliga a que el material de fabricación posea una serie de características físicas y químicas adecuadas al proceso.

La selección del material se realizará aplicando la metodología *Ashby*, la cual considera la elección del material como un proceso dependiente de las condiciones de proceso, objetivo del equipo que conforma (recipientes a presión, transmisión de calor, etc.) y forma geométrica.[25] Por otra parte, la elección del material también se debe realizar desde el punto de vista de la seguridad. Es por este motivo que, en el diseño de recipientes a presión de gran tamaño, como es el caso, se aplica la condición de “fuga antes de rotura”. Esta condición asegura que ante cualquier degradación o deterioro del material, se provoque una fuga que podrá ser fácilmente detectada y, por tanto, subsanada.

La elección de material se realizará utilizando un método gráfico, para el cual será necesario el cálculo de la expresión que considera la condición “fuga antes de rotura”, *Ecuación (109)*. La maximización del factor M_3 será el objetivo, ya que de esta manera se acotan los materiales que mayor resistencia ofrecen.

$$M_3 = \frac{K_{1c}^2}{\sigma_f} \quad (109)$$

Siendo:

M_3 : Factor para la condición “fuga antes de rotura”. Corresponde a la pendiente de la recta en el gráfico resistencia-tenacidad a la fractura.

K_{1c} : Tenacidad a la fractura (MPa·m^{1/2})

σ_f : Límite elástico (MPa)

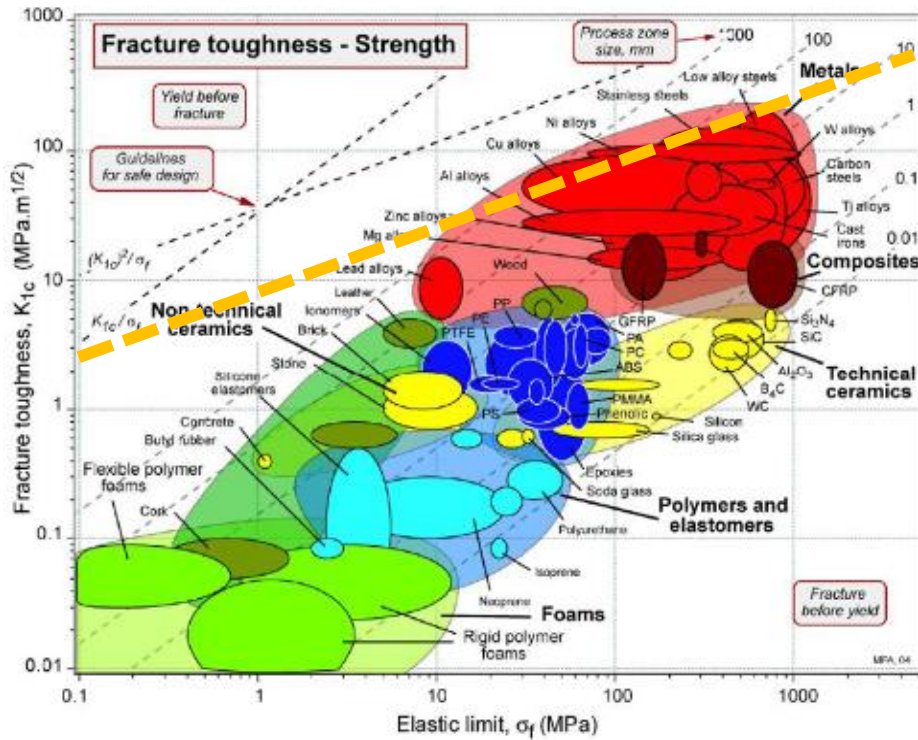


Figura 29: Selección del material en base a la metodología ASHBY. Fuente:[42]

Siguiendo el criterio de maximización del parámetro M_3 , se obtiene como resultado que los mejores candidatos como material de construcción son los metales, más concretamente los aceros inoxidables, aleaciones de cobre, aleaciones de níquel y aceros de baja aleación.

Para la elección del mejor material, se debe tener en cuenta las condiciones de operación a las que estará sometido, así como su coste. El proceso de adsorción se lleva a cabo en condiciones muy alcalinas ($pH > 10$), estando presente en la corriente de alimentación el NaOH. Este factor es determinante, ya que el material de elección debe presentar una buena resistencia a las condiciones alcalinas del proceso.

Analizando los distintos tipos de materiales dentro de los candidatos, se concluye que el Monel 400 es el material más adecuado para la fabricación del equipo. Se trata de una aleación de cobre-níquel, lo cual permite que no se vea afectado por la formación de grietas al estar bajo un ambiente corrosivo. A pesar de que su coste es ligeramente superior al del acero inoxidable, con un precio medio de 8.500\$/t, se trata del segundo material más utilizado en la industria química, por lo que el catálogo disponible es amplio. Uno de los motivos que explica su gran uso es su alta resistencia a la corrosión debido a condiciones álcalis, lo cual lo hace un material idóneo para el equipo a diseñar. [13]

Tabla 61: Esfuerzo máximo del monel 400 en el rango de temperatura de operación. Fuente:[27]

Material	Esfuerzo máx. permisible 25°C, S (N/m ²)
Monel 400	1,48 · 10 ⁸

5.3. Cálculo del espesor de carcasa

El espesor de material usado para la construcción de la carcasa será determinado en este apartado. Para ello, se calcula el espesor mínimo requerido teniendo dos escenarios: Condición de tensión radial y esfuerzo longitudinal, tal y como marca el código *ASME BPV Sección VIII, División I*. Los espesores requeridos en base al tipo de tensión se obtienen mediante la Ecuación (110) y (111).

$$\tau_{radial} = \frac{P_i \cdot D_i}{2SE - 1,2P_i} \quad (110)$$

$$\tau_{longitudinal} = \frac{P_i \cdot D_i}{4SE - 0,8P_i} \quad (111)$$

Siendo:

τ : Espesor mínimo de carcasa (m)

P_i : Presión interna (Pa)

D_i : Diámetro interno (m)

S : Esfuerzo máximo permisible (N/m^2)

E : Eficacia de la unión soldada

El código *ASME BPV Sección VIII, División I* contempla la necesidad de añadir una tolerancia por corrosión al espesor de carcasa calculado. En este caso, el material estará expuesto a unas condiciones alcalinas que pueden deteriorar el material con el tiempo. Por ello, se añadirán 4 mm de espesor debido a corrosión.[13] Se asumirá una soldadura de tipo “unión a extremo con doble soldadura” con una eficacia de 1.

Los resultados obtenidos se presentan en la *Tabla 62*, donde se observa el espesor mínimo en función del tipo de tensión, radial y longitudinal. El valor de espesor mínimo escogido debe ser el mayor de entre estos dos.

Tabla 62: Cálculo del espesor de carcasa. Fuente: [Elaboración Propia]

Parámetro	Valor
P_i (Pa)	264.000
D_i (m)	1,75
S (N/m^2)	$1,48 \cdot 10^8$
E	1
τ_{radial} (mm)	1,56
$\tau_{longitudinal}$ (mm)	0,78
$\tau_{Corrosión}$ (mm)	4
τ_{total} calculado (mm)	5,56

Cabe destacar que, el espesor mínimo recomendado en la bibliografía [13] para una columna con diámetro de 1-2 m, debe ser de 7 mm. Tras la realización de los cálculos, se observa que esta condición no se cumple, por lo que se asumirá un espesor mínimo de carcasa de 7 mm.

Tabla 63: Espesor de carcasa empleado. Fuente: [Elaboración propia]

τ_{total} calculado (mm)	5,56
τ_{total} mínimo (mm)	7

5.4. Selección y diseño de cabezales

El siguiente paso en el diseño mecánico del equipo es la selección de los cabezales del recipiente a presión. Principalmente, existen 3 modelos: Cabezal toriesférico, cabezal hemisférico y cabezal elíptico.

- **Cabezal toriesférico:** Se trata de uno de los modelos de cabezal más empleados en la industria. Es utilizado cuando la presión de operación no supera los 15 bar y se trata del modelo más económico debido a la facilidad de fabricación.

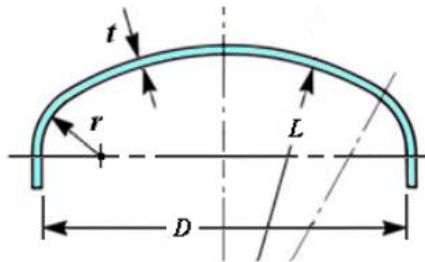


Figura 30: Cabezal toriesférico. Fuente:[43]

- **Cabezal hemisférico:** Usado en para equipos que opera a una alta presión, ya que se trata de los cabezales de mayor resistencia a la presión. Sin embargo, es el más costoso de producir debido a su forma.

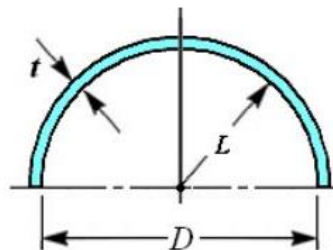


Figura 31: Cabezal hemisférico Fuente: [43]

- **Cabezal elíptico:** Usado principalmente cuando la presión de operación es mayor a 15 bar. El coste de fabricación de este tipo de cabezal se encuentra entre el hemisférico y el toriesférico.

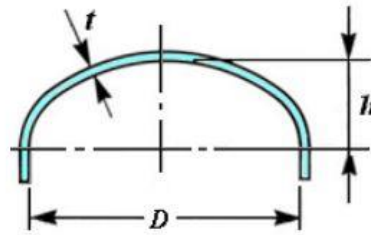


Figura 32: Cabezal Elíptico. Fuente: [43]

El espesor de pared para cada uno de los cabezales anteriormente expuestos y más utilizados en la industria se calcula a partir de las siguientes expresiones, añadiendo al resultado los 4 mm de espesor debido a corrosión. La Ecuación (112),(113) y (114) permite el cálculo del espesor mínimo de cada cabezal. [13]

$$\tau_{torisférico} = \frac{0,885 \cdot P_i \cdot R_C}{SE - 0,1P_i} \quad (112)$$

$$\tau_{hemisférico} = \frac{P_i \cdot D_i}{4SE - 0,4P_i} \quad (113)$$

$$\tau_{elíptico} = \frac{P_i \cdot D_i}{2SE - 0,2P_i} \quad (114)$$

Siendo:

R_C : Radio de corona (m)

Tabla 64: Espesor de los distintos cabezales, incluyendo 4mm espesor por corrosión. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
$\tau_{torisférico}$ (mm)	5,93
$\tau_{hemisférico}$ (mm)	4,78
$\tau_{elíptico}$ (mm)	5,56

Teniendo en cuenta que la presión de operación en la columna de adsorción es de 2,4 bar y el coste económico que conlleva cada tipo de cabezal, se concluye que el cabezal más adecuado es el tipo **toriesférico**. Puede observarse que el espesor obtenido para este tipo de cabezal es inferior al espesor de la carcasa donde irá acoplado.

Por este motivo, se igualarán los espesores de cabezal y carcasa, tomando como espesor aquel cuyo valor sea más alto. Siguiendo esta regla, para este caso se tomará el mismo valor de espesor para los cabezales que el de la carcasa, a saber, **7 mm**.

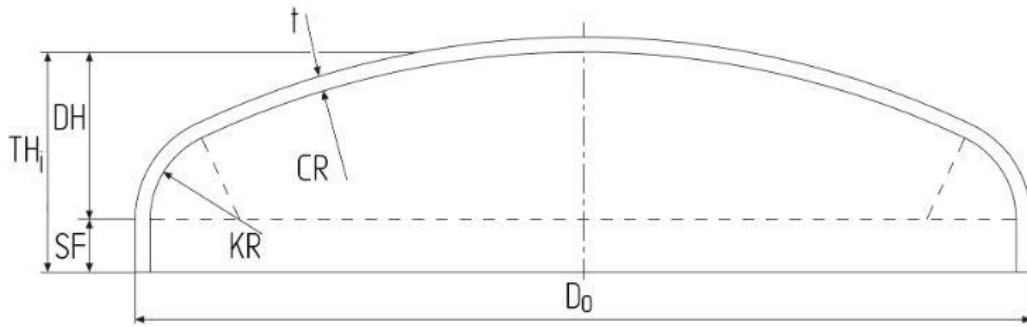


Figura 33: Dimensiones del cabezal toriesférico. Fuente:[44]

Las medidas de las distintas partes del cabezal se muestran en la *Figura 33*. A continuación, se muestran las ecuaciones para el cálculo de las dimensiones del cabezal.[44]

$$D_o = D_i + 2 \cdot \tau \quad (115)$$

$$R_c = D_o \quad (116)$$

$$K_R = 0,1 \cdot D_o \quad (117)$$

$$S_F \geq 3,5 \cdot \tau \quad (118)$$

$$D_H = 0,1935 \cdot D_o - 0,455 \cdot \tau \quad (119)$$

$$TH_i = D_H + S_F \quad (120)$$

Siendo:

D_o : Diámetro externo (m)

D_i : Diámetro interno (m)

K_R : Radio de articulación (m)

S_F : Altura de la brida recta (m)

D_H : Altura de plato cóncavo (m)

TH_i : Altura total (m)

Los resultados obtenidos sobre las dimensiones del cabezal toriesférico se muestran en la *Tabla 65*.

Tabla 65: Dimensiones del cabezal toriesférico. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
D_o (m)	1,764
K_R (m)	0,18
R_c (m)	1,764
S_F (m)	$2,5 \cdot 10^{-2}$
τ (m)	$7 \cdot 10^{-3}$
D_H (m)	0,34
TH_i (m)	0,36

5.5. Determinación de la altura total de columna

Previamente, en el apartado 4.2.2 *Escalamiento de la columna de adsorción* fue calcula la altura total del cilindro. Sin embargo, a esa altura se le debe sumar la altura total de los cabezales, con lo que se obtendría el valor de altura de la columna de adsorción completa.

$$L_{TOTAL} = 7,01 + 2 \cdot TH_i \quad (121)$$

La longitud total de la columna de adsorción asciende a **7,74 m**.

5.6. Accesorios de columna: Boquillas, aperturas y conexiones

Los accesorios de columna son elementos necesarios para su operación y que necesitan ser considerados en el diseño del equipo. En primer lugar, hay que tener en cuenta las conexiones de tuberías, a través de las cuales se introducirán los fluidos del proceso. En segundo lugar, se tendrán en cuenta los orificios de conexión de elementos de control y seguridad. [13]

Todo ello hace se necesiten un total de 1 boca de entrada y 1 boca de salida, para las conducciones del proceso y que serán implementadas con conexiones bridadas. Además, los orificios necesarios en la carcasa serán los necesarios para implementar el transmisor de los medidores de las alarmas de alta presión en la parte superior de la columna y la válvula de alivio.

5.7. Cargas soportadas

El emplazamiento de la columna de adsorción en un lugar abierto de la planta de proceso hace que el material no solo esté sometido a estrés debido a la carga por peso muerto, sino que estará a expuesto a factores ambientales, tales como el viento y efectos sísmicos que pueden agravar dicho estrés. En este apartado se realizará el cálculo de las distintas cargas.

5.7.1. Cargas debidas al peso

En este caso, se deben considerar el peso de todas las partes y elementos que conforman la columna, como son la carcasa, la masa de relleno adsorbente, cabezales y líquido.

5.7.1.1. Peso de la carcasa

Se determina el peso de la carcasa del equipo en vacío, sin considerar la existencia de accesorios, a partir de la *Ecuación (122)*. [13]

$$W_C = C_w \pi \rho_w D_m g (H_v + 0,8 D_m) \tau \quad (122)$$

Siendo:

W_C : Peso de la carcasa (N)

C_w : Factor de corrección debido a soportes, boquillas, aperturas, etc. Valor de 1,15 para este caso debido a conexiones y soporte del relleno.

g : Constante de la aceleración de la gravedad (N/kg)

τ : Espesor de pared (m)

H_v : Altura de la sección cilíndrica del equipo (m)

ρ_w : Densidad material (kg/m³), siendo el del monel 8800 kg/m³

D_m : Diámetro medio de carcasa (m)

Tabla 66: Carga debido al peso de carcasa. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
ρ_w (kg/m ³)	8.800
C_w	1,15
g (N/kg)	9,81
τ (m)	$7 \cdot 10^{-3}$
H_v (m)	7,01
D_m (m)	1,757
W_C (N)	32.281,54

Cabe destacar que la masa de la carcasa es el parámetro empleado para el cálculo del coste del equipo ya que, desde el punto de vista de estimación del coste, se trata de un recipiente a presión vertical. Sin embargo, para dicho cálculo es necesario tener el dato de masa de carcasa fabricada en acero al carbono ya que, posteriormente se corregirá por medio de un factor de material para actualizarlo al material real de fabricación, monel 400. Para ello, se empleará la misma *Ecuación (122)*, utilizada para el cálculo del peso de carcasa, pero empleando en este caso la densidad del acero al carbono y obviando el valor de la aceleración de la gravedad, obteniendo así unidades de masa.

Tabla 67: Masa de carcasa en acero al carbono de la columna de adsorción. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Densidad acero al carbono (kg/m ³)	7.840
Masa carcasa, acero al carbono (kg)	2.931,69

5.7.1.2. Peso de relleno adsorbente

La masa de relleno con resina SP700 fue calculada previamente en el apartado 4.2.2. *Escalamiento de la columna de adsorción*. Se obtuvo que, para llevar a cabo el proceso de adsorción de la manera requerida, la masa de relleno asciende a 14.231,08 kg.

Teniendo en cuenta el factor de conversión 1kg=9,8N, se obtiene una carga debido a la masa de relleno adsorbente de **139.464,58 N** o **139,46 kN**.

5.7.1.3. Peso de los cabezales toriesféricos

El peso de los cabezales toriesféricos se calculará a partir de la masa de material y su densidad, aplicando posteriormente el factor de conversión a Newtons.

La masa del cabezal toriesférico puede calcularse a partir de la siguiente *Ecuación (123)*. [45]

$$M_{toriesférico} = \rho_{monel} \cdot \left((0,08089 \cdot D_0^3) - (0,08089 \cdot D_i^3) \right) \quad (123)$$

Teniendo en cuenta el factor de conversión de masa a peso (1kg=9,8N) y la existencia de 2 cabezales toriesféricos, se obtienen los siguientes resultados, mostrados en la *Tabla 68*.

Tabla 68: Carga debido al peso de cabezales. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
ρ_{monel} (kg/m ³)	8.800
D_o (m)	1,764
D_i (m)	1,75
$M_{torisférico}$ (kg)	92,29
$W_{torisférico}$ (N)	904,48
$W_{cabezales}$ (N)	1.808,96

5.7.1.4. Peso del líquido

El cálculo de la carga debida al peso del líquido se basa en el supuesto de que la columna de adsorción rellena de material adsorbente y material inerte se encuentra completamente llena de líquido. Para ello, se tendrá en consideración la densidad del fluido de mayor densidad que entra en la columna, siendo este el fluido de entrada a las columnas procedente de los equipos de filtración y que contiene la vainillina.

El volumen de fluido que puede albergar la columna será el resultado de la suma de volumen de ambos cabezales más el volumen de huecos, para lo cual se asumirá una porosidad uniforme a lo largo del cilindro ($\epsilon=0,37$). Los cálculos se realizan a partir de las siguientes Ecuaciones (124) y (125). [46]

$$V_{líquido} = V_{cabezales\ torisféricos} + V_{lechoSD} \cdot \epsilon \quad (124)$$

$$V_{cabezales\ torisféricos} = (0,1 \cdot D_i^3 + 0,7854 \cdot S_F \cdot D_i^2) \cdot 2 \quad (125)$$

Aplicando las ecuaciones anteriormente descritas se obtienen los siguientes resultados, mostrados en la *Tabla 69*.

Tabla 69: Carga debida al peso del líquido. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
D_i (m)	1,75
$V_{cabezales\ torisféricos}$ (m ³)	1,19
$V_{lechoSD}$ (m ³)	16,91
$V_{líquido}$ (m ³)	7,45
$\rho_{líquido}$ (kg/m ³)	1022
$M_{líquido}$ (kg)	7.609,57
$W_{líquido}$ (N)	74.573,87

5.7.2. Cargas por viento

El simple hecho de que una estructura de cierta altura se encuentre situada en el exterior, expuesta a los fenómenos ambientales, implica que estará sometida a unas ciertas cargas, como es la debida al viento. El efecto que tiene la carga por viento se mide en base al esfuerzo flector, expresado a partir de las siguientes *Ecuaciones (126)(127)(128)*. [13]

$$M_x = \frac{W \cdot x^2}{2} \quad (126)$$

$$W = D \cdot P_w \quad (127)$$

$$P_w = 0,05 \cdot v_{viento}^2 \quad (128)$$

Siendo:

M_x : Momento flector máximo (N·m)

W : Carga de viento por longitud de columna (N/m)

x : Longitud de aplicación de la carga (m)

D : Diámetro externo de la columna (m)

P_w : Presión ejercida por el viento (N/m²)

v_{viento} : Velocidad del viento (km/h)

De manera estándar, se aplicarán unas condiciones de velocidad de viento de 160 km/h, con las que se evaluará el momento flector. Los resultados se muestran en la *Tabla 70*. [13]

Tabla 70: Análisis de carga por viento . Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
D (m)	1,764
v_{viento} (km/h)	160
W (N/m)	2.257,92
P_w (N/m ²)	1280
x (m)	7,74
M_x (N.m)	67.551,14

5.8. Cargas por efectos sísmicos

En este diseño no se tendrá en consideración este tipo de carga debido a que el emplazamiento de la planta se encuentra en una de las zonas con menor riesgo sísmico de la comunidad, tal y como se muestra en el apartado 7.1.5 *Fenómenos sísmicos* contenido en el *Documento I.MEMORIA*.

5.9. Esfuerzos debido a cargas

Las distintas cargas analizadas anteriormente someten al material a una serie de esfuerzos que se deben tener en consideración, ya que, el equipo debe ser diseñado de tal manera que resista a las distintas combinaciones de esfuerzos. Por ello, se debe comprobar que el espesor calculado para el diseño sea suficiente para lidiar con dichos esfuerzos. [13]

5.9.1. Esfuerzos primarios

En esta sección, se tendrán en cuenta los distintos esfuerzos que forman parte del grupo de esfuerzos primarios.

5.9.1.1. Esfuerzo longitudinal y circunferencial

Se incluyen los esfuerzos debidos a la presión. Se calculan haciendo uso de las siguientes *Ecuaciones (129)(130)*. [13]

$$\sigma_h = \frac{PD_i}{2\tau} \quad (129)$$

$$\sigma_L = \frac{PD_i}{4\tau} \quad (130)$$

Siendo:

σ_h : Esfuerzos circunferenciales (N/m²)

σ_L : Esfuerzos longitudinales (N/m²)

P : Presión de operación (Pa)

D_i : Diámetro interno de carcasa (m)

τ : Espesor de carcasa (m)

5.9.1.2. Esfuerzo debido al peso de equipo

Esfuerzo provocado por el peso del equipo, incluyendo todos sus accesorios. Se calculan haciendo uso de la siguiente *Ecuación (131)*. [13]

$$\sigma_w = \frac{W}{\pi \cdot (D_i + \tau) \cdot \tau} \quad (131)$$

Siendo:

σ_w : Esfuerzo debido al peso de equipo (N/m²)

W : Peso total soportado de la columna (N)

5.9.1.3. Esfuerzos de flexión

Se incluyen los esfuerzos provocados principalmente por acción del viento o efectos sísmicos, los cuales no han sido considerados en este caso y que pueden ser de tipo compresivos o extensibles. Se calcula a partir de la *Ecuación (132)(133)*. [13]

$$\sigma_b = \pm \frac{M_x}{I_v} \cdot \left(\frac{D_i}{2} + \tau \right) \quad (132)$$

$$I_v = \frac{\pi}{64} \cdot (D_0^4 - D_i^4) \quad (133)$$

Siendo:

σ_b : Esfuerzo de flexión (N/m²). Se aplicará signo positivo (+) si es a favor de la dirección del viento y negativo (-) si es en contra.

I_v : Momento de área secundario respecto al plano de flexión (m⁴)

Finalmente, los resultados obtenidos para esfuerzos primarios se recogen en la *Tabla 71*.

Tabla 71: Valores de esfuerzos primarios. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
W (N)	248.128,95
I_v (m ⁴)	1,49 · 10 ⁻²
Esfuerzo	Valor
σ_h (N/m ²)	3 · 10 ⁷
σ_L (N/m ²)	1,5 · 10 ⁷
σ_w (N/m ²)	6,42 · 10 ⁶
σ_b (N/m ²)	3,99 · 10 ⁶

5.9.2. Esfuerzos principales

Los esfuerzos principales vienen determinados por la *Ecuación (134)(135)(136)*. [13]

$$\sigma_1 = 0,5 \cdot \left[\sigma_h + \sigma_z + \sqrt{(\sigma_h - \sigma_z)^2 + 4 \cdot \tau^2} \right] \quad (134)$$

$$\sigma_2 = 0,5 \cdot \left[\sigma_h + \sigma_z - \sqrt{(\sigma_h - \sigma_z)^2 + 4 \cdot \tau^2} \right] \quad (135)$$

$$\sigma_z = \sigma_L - \sigma_w \pm \sigma_b \quad (136)$$

Siendo:

σ_1, σ_2 : Esfuerzos principales (N/m²)

σ_z : Esfuerzo total longitudinal (N/m²), para el cual el valor de σ_b será positivo (+) para los casos en los que se efectúe a favor de la dirección del viento, generando un esfuerzo de tracción, y negativo (-) en caso contrario, donde se genera un esfuerzo de compresión.

El tercer esfuerzo principal, σ_3 , no se tendrá en consideración al ser la relación $\frac{\tau}{D_i} < 0,1$.

El cálculo de los esfuerzos principales tiene como objetivo el establecer una comparación con el esfuerzo máximo permisible del material. Esta comparación permitirá concluir si el espesor de material empleado es adecuado para resistir los esfuerzos.

Tabla 72: Esfuerzos principales. Fuente: [Elaboración propia]

Esfuerzo	Valor
σ_z a favor del viento (N/m ²)	$1,26 \cdot 10^7$
σ_z en contra del viento (N/m ²)	$4,58 \cdot 10^6$
σ_1 (N/m ²)	$3 \cdot 10^7$
σ_2 (N/m ²)	$1,26 \cdot 10^7$
S_{monel400} (N/m ²)	$1,48 \cdot 10^8$

Finalmente, observando los datos de la tabla puede concluirse que el esfuerzo máximo al que puede encontrarse sometida la columna de adsorción debido a combinación de distintos esfuerzos se encuentra por debajo del límite máximo, establecido por el máximo esfuerzo permisible del material de construcción. Puede afirmarse que tanto el material escogido para la construcción de la columna como su espesor son correctos y válidos.

5.9.3. Esfuerzos compresivos y estabilidad elástica

La disposición de la columna en sentido vertical y soportado por un soporte de tipo falda provoca la existencia de esfuerzos compresivos, derivados de una tensión axial, que pueden provocar un efecto de pandeo en el equipo y con ello un fallo por inestabilidad elástica. Por ello, se debe comprobar que el esfuerzo compresivo no supere los límites que puedan provocar dicho efecto. [13]

El esfuerzo compresivo crítico (σ_{critico}) y el esfuerzo de compresión al que se encuentra sometida la columna (σ_c) se obtiene por medio de la Ecuación (137)(138).

$$\sigma_{critico} = 2 \cdot 10^{10} \cdot \left(\frac{\tau}{D_0}\right) \quad (137)$$

$$\sigma_c = \sigma_b + \sigma_w \quad (138)$$

Los resultados se obtenidos para los esfuerzos compresivos se muestran en la *Tabla 73*.

Tabla 73: Esfuerzos compresivos. Fuente:[Elaboración propia]

Esfuerzo	Valor
$\sigma_{critico}$ (N/m ²)	$7,94 \cdot 10^7$
σ_c (N/m ²)	$1,04 \cdot 10^7$

Los resultados permiten concluir que los esfuerzos compresivos a los que puede estar sometida la columna no supera el punto crítico, por lo que puede afirmarse que no habrá efecto de pandeo y, por ende, el diseño se considera seguro.

6. Soporte de la columna

Finalmente, se debe diseñar el soporte de la columna de adsorción. El diseño del soporte se realizará teniendo, principalmente, en cuenta el tamaño, posición y peso de la misma. En este caso, la columna de adsorción es un recipiente cuya orientación es vertical, por lo que se empleará un soporte caracterizado por ser una estructura cilíndrica o cónica denominado como “soporte tipo falda” que no provoca cargas concentradas adicionales a la carcasa del equipo. [13]

Para el diseño del soporte tipo falda, se deberán tener en cuenta los esfuerzos provocados por las cargas debida al viento y el peso total del propio equipo sobre el soporte, calculadas a partir de las siguientes *Ecuaciones (139),(140),(141) y (142)* . Se realizarán los cálculos para un material de soporte de falda de acero inoxidable 304 y considerando que el espesor mínimo debe ser 7 mm. [13]

$$\sigma_{tension} = \sigma_{bs} - \sigma_w \quad (139)$$

$$\sigma_{compresión} = \sigma_{bs} + \sigma_w \quad (140)$$

$$\sigma_{bs} = \frac{4 \cdot M_x}{\pi(D_s + \tau_{falda})\tau_{falda}D_s} \quad (141)$$

$$\sigma_{ws} = \frac{W_v}{\pi(D_s + \tau_{falda})\tau_{falda}} \quad (142)$$

Donde:

σ_{bs} : Estrés por momento flector provocado por el viento (N/m²)

M_x : Momento flector máximo (N.m)

D_s : Diámetro interno del soporte (m), asumiendo el mismo que diámetro externo de carcasa

τ_{falda} : Espesor de la falda (m)

W_p : Peso total del equipo (N)

σ_{ws} : Estrés provocado por el peso total del equipo (N/m²)

En cuanto al espesor de la falda, se debe cumplir el criterio que considera el peor de los casos en cuanto a carga debida al viento y peso total del equipo, por lo que:

$$\sigma_{tensión} < S_s E \sin \theta_s \quad (143)$$

$$\sigma_{compresión} < 0,125 E_y \left(\frac{\tau_{falda}}{D_s} \right) \sin \theta_s \quad (144)$$

Siendo:

S_{s304} : Estrés máximo permisible del material (N/m²)

E : Eficacia de soldadura.

E_y : Módulo de Young (N/m²)

θ_s : Ángulo de base de falda, en este caso 90°

Los resultados obtenidos para el diseño del soporte tipo falta se recogen en la *Tabla 74*, donde se incluyen los distintos parámetros y esfuerzos calculados.

Tabla 74: Diseño del soporte tipo falda. Fuente: [Elaboración Propia]

Parámetro	Valor
S_{ss304} (N/m ²)	$1,38 \cdot 10^8$
E	1
E_Y (N/m ²)	$2 \cdot 10^{11}$
θ_s	90°
τ_{falda} (m)	$7 \cdot 10^{-3}$
W_v (N)	248.128,95
M_x (N·m)	67.551,14
Esfuerzo	Valor
σ_{bs} (N/m ²)	$3,93 \cdot 10^6$
σ_{ws} (N/m ²)	$2,79 \cdot 10^6$
$\sigma_{compresión}$ (N/m ²)	$6,72 \cdot 10^6$
$\sigma_{tensión}$ (N/m ²)	$1,14 \cdot 10^6$

Finalmente, tras la realización de los cálculos, se concluye que el espesor y tipo de material escogido para el soporte de la columna es **válido**, ya que los esfuerzos de compresión y tensión a los que se encuentra sometido el soporte están por debajo de los límites críticos que consideran las peores condiciones.

DIMENSIONAMIENTO BÁSICO DE EQUIPOS

Una vez realizados los diseños rigurosos de los equipos de reacción y de adsorción, es necesario realizar un dimensionamiento de los equipos del proceso, con el fin de estimar un tamaño y coste de equipos de cara a incluir en el presupuesto del proyecto.

El dimensionamiento se realizará, si es posible, en base a los datos de proceso obtenidos. Otros equipos serán dimensionados a partir de datos de catálogo de fabricantes debido a la falta de referencias para realizar dichos cálculos.

1. Tanque de mezcla TM-101

Para el dimensionamiento de este equipo, el parámetro crítico a conocer es el volumen. Este será calculado en base al caudal másico de entrada y a un tiempo estimado de permanencia del fluido en el tanque, tal y como muestra la *Ecuación (145)*.

$$V_{\text{tanque}} = \frac{m}{\rho} \cdot t \quad (145)$$

Siendo m el caudal másico total de entrada al tanque (kg/h), ρ la densidad del fluido (kg/m³) y t el tiempo de permanencia del fluido en el recipiente (h), que será de 1 hora con el fin de garantizar una mezcla homogénea. Al volumen obtenido se le sumará un 10% a mayores por seguridad. Los resultados se presentan en la *Tabla 75*:

Tabla 75: Dimensionamiento tanque de mezcla TM-101. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Caudal másico (kg/h)	22.004,12
Densidad (kg/m ³)	1.042,80
Tiempo de permanencia (h)	1
V tanque (m ³)	23,21

Se debe determinar la masa del tanque, para lo cual se necesita conocer el espesor del mismo. Para ello se supone una relación L/D de 4 y en base a lo indicado en bibliografía [13], se considera el espesor mínimo en función del diámetro del tanque. Los resultados se presentan en la siguiente *Tabla 76*:

Tabla 76. Determinación del espesor mínimo del tanque. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
V tanque (m ³)	23,21
L/D	4
D tanque (m)	1,95
L (m)	7,79
Espesor tanque (mm)	7

El diámetro del tanque está entre 1-2 m por lo que, de acuerdo con el código ASME BVP Sec. VIII D1, el espesor mínimo de un tanque a presión con un diámetro en ese rango es de 7 mm.

Debido a las condiciones corrosivas a las que estará sometida el equipo el material empleado para la construcción del tanque de mezcla será monel 400. Se determina el volumen de la carcasa y, con la densidad del monel, el peso de esta. La masa total de la carcasa del tanque se muestra en la siguiente *Tabla 77*:

Tabla 77. Cálculo de la masa de la carcasa del tanque de mezcla T-101. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
V tanque (m ³)	23,21
Di tanque (m)	1,95
L (m)	7,79
Espesor tanque (mm)	7
Densidad monel (kg/m ³)	8.800
Masa carcasa, monel 400 (kg)	2.936,35

Dado que el dimensionamiento del equipo es necesario para la determinación de su coste, en este caso, en base a la masa de carcasa en acero al carbono, se determinará la masa de carcasa fabricada en dicho material. Su coste será corregido por el factor material, con lo que se tendrá en cuenta su coste real en monel.

Tabla 78: Masa de carcasa en acero al carbono. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Densidad acero al carbono (kg/m ³)	7.840
Masa carcasa, acero al carbono (kg)	2.616,02

2. Tanque de almacenamiento V-201

El objetivo de este equipo es garantizar el flujo constante hacia las columnas de adsorción T-201/T-202. El dimensionamiento de este equipo se realiza siguiendo la misma metodología que en el caso del tanque de mezcla TM-101. Para ello, se asumirá un tiempo de permanencia de 15 minutos y al volumen calculado se le sumará un 10% por seguridad.

Tabla 79: Dimensionamiento del tanque V-201. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Caudal másico (kg/h)	22.073,84
Tiempo (h)	0,25
Densidad (kg/m ³)	1.029,14
V tanque (m ³)	5,94

A continuación, será necesario conocer las dimensiones del tanque y el espesor de carcasa. Para ello, se aplicará una relación L/D de 3 y en base a lo indicado en bibliografía [13], se considera el espesor mínimo en función del diámetro del tanque. Los resultados se presentan en la siguiente *Tabla 80*.

Tabla 80: Determinación espesor mínimo del tanque. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
V tanque (m ³)	5,94
L/D	3
D tanque (m)	1,36
L (m)	4,08
Espesor tanque (mm)	7

El diámetro del tanque está entre 1-2 m por lo que de acuerdo con el código ASME BVP Sec. VIII D1 el espesor mínimo de un tanque a presión con un diámetro en ese rango es de 7 mm.

El material de fabricación del tanque de almacenamiento V-201 será monel 400 ya que estará sometido a unas condiciones de alta alcalinidad y, por tanto, de gran corrosión. Se determina el volumen de la carcasa y, con la densidad del monel, la masa de la misma. La masa total de la carcasa del tanque se muestra en la *Tabla 81*.

Tabla 81: Masa de carcasa fabricada en monel 400. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
V tanque (m ³)	5,94
Di tanque (m)	1,36
L (m)	4,08
Espesor tanque (mm)	7
Densidad monel (kg/m ³)	8800
Masa carcasa, monel 400 (kg)	1.075,40

De igual manera que en el caso del tanque de mezcla TM-101, para la determinación de su coste será necesario conocer la masa de carcasa fabricada en acero al carbono para, posteriormente, aplicar el factor de corrección material.

Tabla 82: Masa de carcasa en acero al carbono. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Densidad acero al carbono (kg/m ³)	7.840
Masa carcasa, acero al carbono (kg)	958,08

3. Tanque de almacenamiento V-202

El dimensionamiento de este equipo se realiza siguiendo la misma metodología que en el caso del tanque de mezcla TM-101. En este caso, se debe considerar un volumen suficiente para albergar un volumen de fluido que garantice la continuidad del proceso.

Para ello, se analiza las secuencias de adsorción-desorción, observando un tiempo ocioso de 1,4 horas, en las que no hay flujo de productos al tanque. Por ello, se realizan los cálculos del mismo modo que en el equipo anterior pero además el tanque considerará el volumen de fluido a mayores, equivalente a ese tiempo en función del caudal másico y se le sumará un 10% para asegurar la continuidad. Los resultados se muestran en la siguiente *Tabla 83*:

Tabla 83: Dimensionamiento tanque de almacenamiento V-202. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Caudal másico (kg/h)	21.666,94
Tiempo (h)	1,4
Densidad (kg/m ³)	995,1
V tanque (m ³)	33,53

Se debe determinar el peso del tanque, para el cual se necesita conocer el espesor del mismo. Para ello, se supone una relación L/D de 4 y en base a lo indicado en bibliografía [13], se considera el espesor mínimo en función del diámetro del tanque. Los resultados se presentan en la siguiente *Tabla 84*:

Tabla 84. Determinación del espesor mínimo del tanque. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
V tanque (m ³)	33,53
L/D	4
D tanque (m)	2,20
L (m)	8,81
Espesor tanque (mm)	9

El diámetro del tanque está entre 2-2,5 m por lo que de acuerdo con el código ASME BVP Sec. VIII D1 el espesor mínimo de un tanque a presión con un diámetro en ese rango es de 9 mm.

Se considera que el material el tanque de mezcla está fabricado de acero inoxidable AISI 304, ya que el equipo no estará sometido a condiciones altamente corrosivas. Se determina el volumen de la carcasa y con la densidad del acero el peso de la misma. El peso total de la carcasa del tanque se muestra en la siguiente *Tabla 85*:

Tabla 85. Cálculo de la masa de la carcasa del tanque de almacenamiento V-202. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
V tanque (m ³)	33,53
Di tanque (m)	2,20
L (m)	8,81
Espesor tanque (mm)	9
Densidad AISI 304 (kg/m ³)	7.900
Masa carcasa tanque (kg)	4.331,14

4. Agitador del tanque TM-101

El objetivo del tanque de mezcla TM-101 es albergar los distintos compuestos que formarán parte de la disolución final. Para lograr una disolución homogénea es necesario el empleo de un agitador. Generalmente, el tipo de agitador depende del tipo de mezclado que se tenga como objetivo, el volumen del tanque y las propiedades de los fluidos que intervienen.

En este caso, los compuestos que contiene el tanque de mezcla TM-101 son lignina, hidróxido de sodio y agua. Dado que el principal compuesto de la disolución es el agua, en torno a un 80% del caudal másico total, a una temperatura de 20°C, la disolución del tanque poseerá propiedades de alta viscosidad. En base a la literatura [13], es posible escoger el tipo de agitador teniendo en cuenta el volumen del tanque de mezcla TM-101, el cual asciende a 23,21 m³. Con estos datos, el agitador más apropiado es una turbina de palas con montaje sobre el eje.

Por otra parte, será necesario el uso de un motor que accione la turbina a través de un eje. La bibliografía [13] aporta datos sobre las potencias necesarias en base a al tipo de agitación y aplicación.

Agitation	Applications	Power, kW/m ³
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid-liquid mixing	1.0–1.5
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 34: Potencia requerida por el motor de agitación. Fuente:[13]

Considerando un tipo de agitación media para mezclas líquido-líquido, se obtiene un rango de potencia de 1-1,5 kW/m³. Tomando un valor medio de potencia, 1,25 kW/m³, y teniendo en cuenta el volumen del tanque de mezcla TM-101, puede obtenerse el valor de potencia del motor requerido para la agitación, mostrado en la *Tabla 86*.

Tabla 86: Características del sistema de agitación. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Volumen TM-101, V (m ³)	23,21
Tipo de agitador	Turbina de palas sobre el eje
Potencia motora, P (kW/m ³)	1,25
Potencia real necesaria, P _{real} (kW)	29,01

5. Bombas

Las bombas empleadas en el proceso tienen como función el transporte de los líquidos del proceso. La energía que deben aplicar al fluido debe ser lo suficiente para cumplir los requerimientos del punto de destino, teniendo en cuenta los distintos fenómenos a los que estará sometido tales como pérdidas por fricción en conducciones y accesorios, pérdidas en equipos de proceso y superar diferencias de altura entre el punto de succión y descarga. [13]

El tipo de bomba escogida para la planta es la bomba centrífuga, uno de los tipos más empleados en planta químicas, entre otros factores, por estar indicada para cargas elevadas. Teniendo en cuenta que el presente dimensionamiento servirá para el cálculo de su coste, deben distinguirse las partes que conforman el equipo.

Por una parte, el elemento centrífugo o rodete, que, con su movimiento en el interior de la carcasa de la bomba, aplica la energía al líquido para su impulsión. El coste se calcula teniendo en cuenta el caudal volumétrico que debe gestionar por segundo, el cual se calcula a partir de la *Ecuación (146)*. [13]

$$\dot{Q} = \frac{\dot{m}}{\rho} \cdot 10^3 \quad (146)$$

Donde \dot{Q} es el caudal volumétrico (L/s), \dot{m} el caudal másico (kg/s) y ρ la densidad del líquido (kg/m³).

Por otra parte, se encuentra el motor eléctrico, que permitirá el movimiento del elemento centrífugo. La determinación de su coste se realizará en función de la potencia de este. Por ese motivo, será necesario la realización de un balance de energía mecánica que viene dado a partir de la ecuación de *Bernoulli* para fluidos incompresibles, considerando la densidad de los líquidos constante con la variación de presión. [13]

$$\underbrace{\frac{v_1^2 - v_2^2}{2 * (\alpha_1 - \alpha_2)}}_{\Delta E_{cinética}} + \underbrace{g \cdot (z_1 - z_2)}_{\Delta E_{potencial}} + \underbrace{\frac{P_1 - P_2}{\rho}}_{\Delta E_{flujo}} + \underbrace{W}_{Trabajo} - \underbrace{\sum F}_{Fricción} = 0 \quad (147)$$

El primero de los términos de la expresión, $\Delta E_{cinética}$, hace referencia a variación de la energía cinética. Por otra parte, $\Delta E_{potencial}$, expresa la variación de energía potencial, mientras que ΔE_{flujo} expresa la energía por diferencia de presión y $\sum F$ el sumatorio de fuerzas de fricción, las cuales provocan una pérdida de energía. Por último, se encuentra el término W , que expresa el trabajo a aportar o a retirar del fluido. Precisamente, el signo que posea este término determinará si es necesario la aportación o retirada de energía al fluido. Si el signo es positivo (+), este indica la necesidad de extraer energía del fluido, mientras que, si el signo es negativo (-), será necesaria la aportación de energía, en este caso por medio de la bomba centrífuga.

En la realización de los balances de energía de las bombas aquí planteados se despreciará el primer término, $\Delta E_{cinética}$, debido a que se asume que el diámetro de las conducciones es el mismo y constante. Por otra parte, se asume la no existencia de pérdidas de carga, $\sum F$, debido al rozamiento, por lo que es posible despreciar el último término de la ecuación. Además, las variaciones de temperatura del fluido se asumen como despreciables.

En cuanto al término que evalúa la variación de energía potencial, $\Delta E_{potencial}$, se distinguirán dos grupos de bombas. El primer grupo incluye todas aquellas bombas en las que se desprecia este término debido a que no se considera una diferencia de altura entre los puntos de succión y descarga, a saber, P-101 A/B, P-201 A/B, P-202 A/B y P-301 A/B.

Por tanto, para este primer grupo, el cálculo del trabajo necesario a realizar por la bomba por unidad másica se calcula a partir de la siguiente *Ecuación (148)*.

$$W = \frac{P_1 - P_2}{\rho} \tag{148}$$

Donde W es el trabajo a realizar por la bomba (kJ/kg), P_1 y P_2 la presión en el punto de succión y en el punto de descarga (kPa), y ρ la densidad del fluido (kg/m³).

Una vez conocido el dato de trabajo que debe realizar la bomba por unidad másica, es posible conocer la potencia total requerida o potencia teórica, calculada a partir de la Ecuación (149).

$$P_{teórica} = \dot{m} \cdot W \tag{149}$$

Donde $P_{teórica}$ es la potencia teórica o útil (kW) y \dot{m} el flujo másico (kg/s).

Sin embargo, una vez conocida la potencia teórica o útil que se debe aplicar, es necesario tener en cuenta que toda bomba posee una cierta eficiencia máxima. Esto hace que se necesite una potencia real mayor a la considerada como útil para lograr cumplir los requerimientos. A partir de bibliografía [13] se extrae que la eficiencia (η) de este tipo de bombas ronda el 70%, con lo que el cálculo de la potencia real se lleva a cabo a partir de la Ecuación (150).

$$P_{real} = \frac{\dot{m} \cdot W}{\eta} \tag{150}$$

Finalmente, aplicando las expresiones anteriormente explicadas, se obtienen los siguientes datos mostrados en la *Tabla 87*, correspondientes a las bombas centrífugas pertenecientes al primer grupo.

Tabla 87: Parámetros de las bombas del proceso. Fuente: [Elaboración propia]

		P-101 A/B	P-201 A/B	P-202 A/B	P-301 A/B
CENTRÍGUA	\dot{m} (kg/h)	22.004,12	28.900,07	16.370,96	23.348,03
	ρ (kg/m ³)	1.042,81	1.027,85	1.031,13	991,68
	Q (L/s)	5,86	7,81	4,41	6,54
MOTOR	P_1 (kPa)	101	240	240	101
	P_2 (kPa)	1.000	3.000	1.000	103
	W (kJ/kg)	0,86	2,69	0,74	$2,01 \cdot 10^{-3}$
	$P_{teórica}$ (kW)	5,27	21,56	3,35	$1,31 \cdot 10^{-2}$
	η	70%	70%	70%	70%
	P_{real} (kW)	7,53	30,79	4,79	$1,87 \cdot 10^{-2}$

Cabe destacar que, a pesar de la potencia real de la bomba P-301 A/B es pequeña en comparación con el rango habitual en este tipo de bombas, su uso resulta necesario para la impulsión del fluido de la corriente 39.

Sin embargo, existe un segundo grupo de bombas, compuesto por P-204 A/B y P-205 A/B, las cuales deben impulsar el líquido hasta una altura de 7,74 metros.

Esto hace que se deba tener en cuenta el término potencial, $\Delta E_{potencial}$, en el balance de energía previamente descrito. Por ello, en este caso el cálculo del trabajo necesario a realizar por la bomba por unidad másica se calcula a partir de la *Ecuación (151)*.

$$W = g \cdot (z_1 - z_2) + \frac{P_1 - P_2}{\rho} \quad (151)$$

Donde g es la aceleración de la gravedad (m/s^2) y z_1, z_2 la altura en el punto 1 y en punto 2, respectivamente.

El cálculo de la potencia real, P_{real} , se realiza siguiendo la misma metodología aplicada para el primer grupo de bombas. Los resultados obtenidos se muestran en la *Tabla 88*.

Tabla 88: Parámetros de las bombas del proceso. Fuente:[Elaboración propia]

		P-203 A/B	P-204 A/B
CENTRÍGUA	\dot{m} (kg/h)	21.534,12	17.241,81
	ρ (kg/m ³)	997	800,34
	Q (L/s)	6,00	5,98
MOTOR	P ₁ (kPa)	101	101
	P ₂ (kPa)	240	240
	g (m/s ²)	9,81	9,81
	z ₁ (m)	0	0
	z ₂ (m)	7,74	7,74
	W (kJ/kg)	76,07	76,10
	P _{teórica} (kW)	455,02	364,49
	η	70%	70%
	P_{real} (kW)	650,03	520,70

6. Compresores

Los compresores implementados tienen como objetivo el flujo e incremento de presión de la corriente de aire al proceso. En el *Anexo I. Balances de materia y energía* se realizaron los cálculos necesarios para conocer la variación de temperatura derivada de la compresión del gas. En este anexo se realizarán los cálculos para determinar la potencia de los compresores dado que este es el factor determinante para el cálculo de su respectivo coste.

En primer lugar, se debe tener en cuenta el tipo de compresor a emplear. Existen diversos tipos dependiendo de las condiciones que se pretendan conseguir o el ámbito de trabajo en el que se van a trabajar. El rango de presiones a los que se trabaja el proceso, hasta 10 bar, recorta el abanico de posibilidades, teniendo como opciones el compresor centrífugo o recíprocante. A pesar de que ambos tipos están pensados para trabajar a altas presiones, en este caso el más recomendable es el de tipo recíprocantes, ya que es el más indicado para trabajos de alta presión con un caudal relativamente bajo. [13]

Este tipo de compresores poseen una eficiencia en función de la relación de compresión. Los compresores empleados en el proceso se encuentran dentro de un el rango de relación de compresión de 2-3,3, por lo que la eficiencia isentrópica de los compresores se estima en un 82%, que se tendrán en cuenta para el cálculo de la potencia real del equipo.

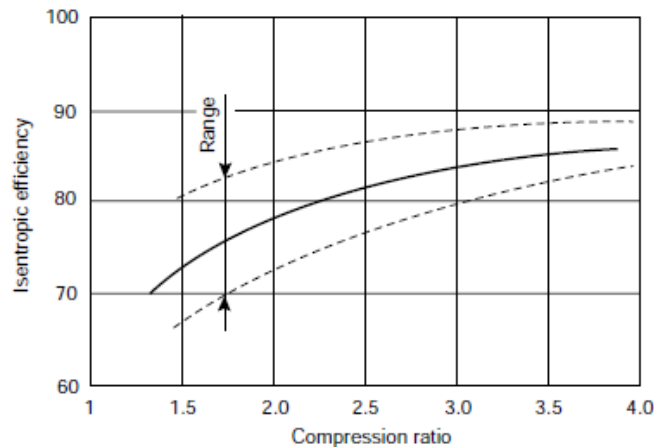


Figura 35: Eficiencia del equipo de compresión. Fuente:[13]

A continuación, se muestra la *Ecuación (152)*, que permite el cálculo del trabajo isentrópico teórico de un compresor recíprocante.

$$-W = Z \frac{RT_s}{M} \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{P_d}{P_s} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right] \quad (152)$$

Donde W indica el trabajo del compresor (kJ/kg), siendo el signo negativo (-) indicativo de que es el equipo quien realiza el trabajo; Z el factor de compresibilidad, cuyo valor es 1 suponiendo el aire como gas ideal; R es la constante de los gases (8,314 kJ/kmol·K); T_s y P_s hace referencia a la temperatura (K) y presión de succión (bar), respectivamente; M masa molecular del gas (kg/kmol); P_d es la presión de descarga (bar); γ factor adimensional correspondiente con la relación C_p/C_v , siendo 1,4 para el aire.

Una vez obtenida la potencia teórica debe tenerse en cuenta la eficiencia del equipo, previamente descrita, por lo que para el cálculo de la potencia real se emplea la *Ecuación (150)*, aplicada previamente en la sección 5. *Bombas*.

Finalmente, aplicando las ecuaciones explicadas anteriormente, se obtienen los datos de potencia de los compresores, mostrados en la *Tabla 89*.

Tabla 89: Potencia de los compresores. Fuente: [Elaboración propia]

	C-101 A/B	C-102 A/B
Tipo	Etapa única	Multietapa
T_s (K)	298,15	333,63
R (kJ/kmol*K)	8,314	8,314
M (kg/kmol)	28,85	30,06
Z	1	1
γ	1,4	1,4
η	82%	82%
\dot{m} (kg/s)	1,82	0,39
W (kJ/kg)	109,69	232,26
P_{real} (kW)	243,45	110,46

7. Filtros F-101 A/B, F-201 A/B y F-202 A/B

Para el dimensionamiento básico de los equipos de filtración se escogerán por catálogo de fabricante en base a los parámetros del proceso para poder determinar posteriormente su coste.

Para el filtro F-101 A/B, correspondiente a la membrana de purificación del aire de entrada al sistema, se consideran los siguientes parámetros. [47][48]

Tabla 90: Datos del filtro F-101 A/B. Fuente:[Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Material membrana	Polieteremida
Selectividad O ₂ /N ₂	8
Permeado (GPU)	1000
Área específica (m ² /kg s)	20000
Coste (\$/ton O ₂ salida)	20,9

El filtro F-201 A/B es un equipo de ultrafiltración que, para su operación, emplea una membrana de 1kDa fabricada en TiO₂. Este equipo es capaz de lograr un alto rendimiento en la separación de lignina, hasta un 97%. Por otra parte, el filtro F-202 A/B lleva incorporada una membrana de 600 Da fabricada de igual manera en TiO₂ con soporte cerámico, el cual es capaz de obtener rendimientos de separación de lignina de un 75%. La ventaja de estos filtros es su resistencia a condiciones altamente alcalinas, lo cual es un requisito indispensable en este proceso. Ambos filtros son suministrados por la empresa *Novasep*, perteneciendo ambos a la familia de equipos *Kerasep*. [16]

8. Intercambiadores de calor

El parámetro crítico para determinar los costes de intercambiadores de calor de carcasa y tubos es el área de intercambio de calor. Por lo tanto, en el dimensionamiento básico de los intercambiadores de calor se procederá a calcular dicha área. El área se calcula según la siguiente *Ecuación (153)*:

$$\dot{Q} = U \cdot C_p \cdot \Delta T_{ml} \quad (153)$$

En la que \dot{Q} es el flujo de calor (W); U es el coeficiente global de transmisión de calor (W/m² °C); A es el área de intercambio de calor (m²); ΔT_{ml} es la temperatura media logarítmica (°C).

El coeficiente U se puede estimar empleando la siguiente gráfica (*Figura 36*) en la que el valor depende del fluido de proceso y del fluido de servicio (calefactor o refrigerante).

Cabe destacar que para el intercambiador E-101, al ser DowTherm A el fluido calefactor, se determina una U de 1400 W/m²·°C (thermal fluid-dilute aqueous). Para el intercambiador E-102, se consideran *Dilute aqueous* como fluido de proceso (*Corriente 7*) y como fluido de servicio, en este caso calefactor, *Steam Condenser*. De esta manera se aproxima un coeficiente U de 750 W/m²·°C. Para el intercambiador E-103, el fluido refrigerante es *Cooling Water (cv)* y el fluido de proceso (*Corriente 13*) es aire a alta presión (*Air and gas high pressure*). Se obtiene un U estimado de 250 W/m²·°C.

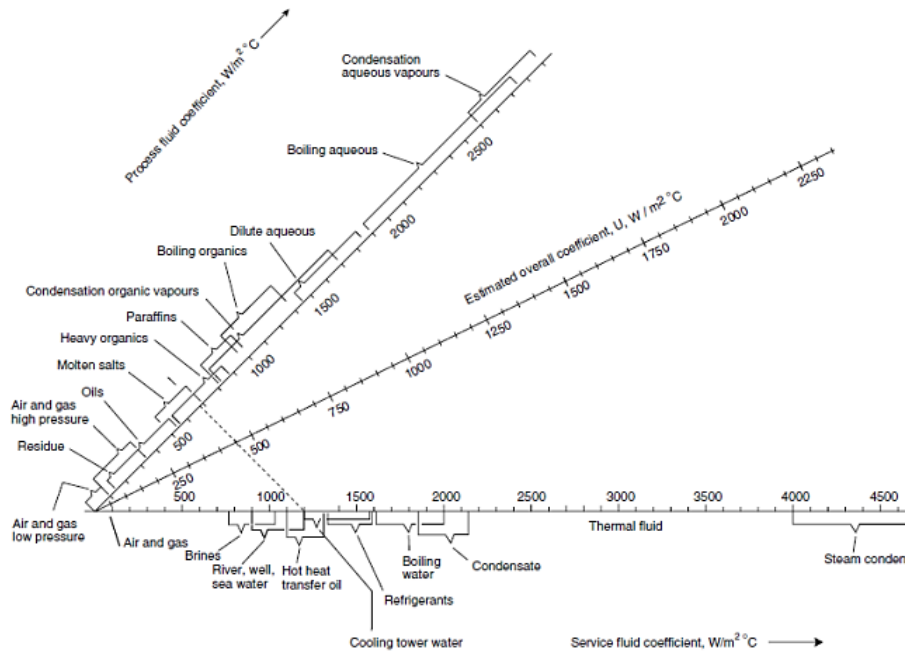


Figura 36. Estimación del coeficiente global de transmisión de calor. Fuente:[13]

Por último, para el intercambiador a la salida del reactor, E-201, se toma la Corriente 19, al igual que en el E-102 como *Dilute aqueous*. Para el fluido de servicio, a pesar de que se usa *chilled water* como refrigerante, se toma el mismo rango que para *cooling water*. Por lo tanto, el coeficiente U estimado es de 750 W/m²·°C.

ΔT_{ml} se puede determinar según la siguiente *Ecuación (154)*:

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln\left(\frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1}\right)} \quad (154)$$

En la que T_1 y T_2 representan la temperatura de entrada y salida, respectivamente, del fluido caliente (K); t_1 y t_2 representan la temperatura de entrada y salida, respectivamente, del fluido frío (K).

A continuación, se muestra la *Tabla 91* con los parámetros de todos los intercambiadores de calor utilizados en las tres secciones del proceso.

Tabla 91. Dimensionamiento básico de los intercambiadores de calor. Fuente:[Elaboración propia]

Intercambiador	Q (kW)	U (W/m ² ·°C)	ΔT_{ml}	A (m ²)
E-101	4096,06	1400	2,79	1048,81
E-102	2086,66	750	26,67	105,90
E-103	31,14	250	156,55	0,8
E-201	5876,78	750	46,28	169,29

9. Precipitador PR-201

Este equipo es el encargado de realizar la separación entre la vainillina y siringaldehído, adicionando para ello una solución al 20% de NH_3 . Se selecciona un precipitador comercial para el dimensionamiento básico para así poder determinar su coste en base al precio proporcionado por la empresa correspondiente. Este se adquiere a través de la empresa *Bionomic Industries Inc.* desde EE.UU. Se trata de un precipitador “HEI” de alta eficiencia. [49]

10. Spray dryer SD-301

En base al catálogo seleccionado para el dimensionamiento básico de un spray dryer, se escoge el equipo para tratar un caudal de líquido determinado en función del caudal de entrada al equipo. El spray dryer seleccionado es suministrado por la empresa *Keda Group*, en concreto el spray dryer de la gama SD, modelo SD24000. Se trata de un modelo más alto que los equipos tradicionales dado que su diseño permite la menor pérdida de energía posible. Tiene una capacidad de evaporación de líquido de 24.000 L/h, lo cual es suficiente para los requerimientos del proceso. [50]

11. Dimensionamiento de conducciones

Resulta indispensable realizar los cálculos de las conducciones que permitan el flujo de fluidos a través de la planta y entre los distintos equipos del proceso. En primer lugar, debe seleccionarse un material adecuado para dichas conducciones, teniendo en cuenta para ello las condiciones a las que va a estar sometido el material. Tal y como se ha descrito, gran parte del proceso de obtención de vainillina se lleva a cabo bajo unas condiciones de alta alcalinidad. Es por este motivo que se debe seleccionar un material preparado para soportar la corrosión debida a estas condiciones. En el mercado existen una amplia variedad de conducciones en base al material de fabricación y sus dimensiones, siendo las más empleadas aquellas fabricadas en acero y acero inoxidable, así como aleaciones de níquel o cobre.

Para las conducciones de este proceso se ha optado por acero inoxidable SúperDúplex UNS32750. Este material, también denominado como aleación 2507, es un material que presenta una doble fase en estructura metalúrgica, ferrita y austenita, en la misma proporción. La principal ventaja que presenta este material frente a otros aceros es su alta resistencia a la corrosión, propiedad que viene dada debido a la presencia de cromo (25%), níquel (7%) y molibdeno (4%) en su composición. Su uso está dirigido a las industrias químicas y petroquímicas ya que, presenta una buena resistencia a esfuerzos de tracción y al agrietamiento por corrosión bajo condiciones de tensión, lo cual representa una clara ventaja desde el punto de vista de seguridad del proceso. [51][52]

El siguiente paso será la determinación del diámetro de la conducción. Para ello, se empleará el método de diámetro económico, el cual proporciona la mejor relación entre el diámetro requerido en las condiciones del proceso y su coste.

El diámetro óptimo que garantiza el menor coste puede ser calculado a partir de la Ecuación (155). [13]

$$D_{\text{óptimo}} = 0,33 \cdot \left(\frac{G}{\rho}\right)^{0,5} \tag{155}$$

Donde $D_{\text{óptimo}}$ es el diámetro óptimo de la conducción (m); G es el caudal másico de fluido (kg/s) y ρ la densidad del fluido (kg/m³).

Una vez obtenido el diámetro óptimo, debe seleccionarse el espesor de conducción más adecuado para cada caso en función de las condiciones de proceso tales como presión y temperatura. En este proceso se destacan condiciones de operación anormalmente altas, con lo que se puede concluir que el tipo de espesor de tubería más adecuado corresponde al tipo “Schedule 40”. Los parámetros de las conducciones deben ser estandarizados en base al catálogo del fabricante y según la norma ASME B36.10 para la estandarización de conducciones de acero.

ANSI/ASME B36.10M

Nominal Pipe Size DN(in.)	Outside Diameter D	Nominal Wall Thickness																		
		sch5			sch10			sch20			sch30			STD			sch40			
		W.T.	kg/m *	kg/m **	W.T.	kg/m *	kg/m **	W.T.	kg/m *	kg/m **	W.T.	kg/m *	kg/m **	W.T.	kg/m *	kg/m **	W.T.	kg/m *	kg/m **	
1/8	10.3	---	---	---	1.24	0.28	0.28	---	---	---	1.45	0.32	0.32	1.73	0.37	0.37	1.73	0.37	0.37	
1/4	13.7	---	---	---	1.65	0.50	0.50	---	---	---	1.85	0.55	0.55	2.24	0.64	0.64	2.24	0.64	0.64	
3/8	17.1	---	---	---	1.65	0.64	0.64	---	---	---	1.85	0.70	0.71	2.31	0.85	0.86	2.31	0.85	0.86	
1/2	21.3	1.65	0.81	0.81	2.11	1.01	1.02	---	---	---	2.41	1.13	1.14	2.77	1.28	1.29	2.77	1.28	1.29	
3/4	26.7	1.65	1.03	1.04	2.11	1.29	1.30	---	---	---	2.41	1.46	1.47	2.87	1.70	1.71	2.87	1.70	1.71	
1	33.4	1.65	1.30	1.31	2.77	2.11	2.13	---	---	---	2.90	2.20	2.22	3.38	2.53	2.54	3.38	2.53	2.54	
1 1/4	42.2	1.65	1.67	1.68	2.77	2.72	2.74	---	---	---	2.97	2.90	2.92	3.56	3.43	3.45	3.56	3.43	3.45	
1 1/2	48.3	1.65	1.92	1.93	2.77	3.14	3.16	---	---	---	3.18	3.57	3.60	3.66	4.09	4.12	3.66	4.09	4.12	
2	60.3	1.65	2.41	2.43	2.77	3.97	4.00	---	---	---	3.18	4.52	4.55	3.91	5.49	5.53	3.91	5.49	5.53	
2 1/2	73	2.11	3.73	3.75	3.05	5.31	5.35	---	---	---	4.78	8.12	8.18	5.16	8.72	8.78	5.16	8.72	8.78	
3	88.9	2.11	4.56	4.59	3.05	6.52	6.56	---	---	---	4.78	10.02	10.08	5.49	11.41	11.48	5.49	11.41	11.48	
3 1/2	101.6	2.11	5.23	5.26	3.05	7.49	7.54	---	---	---	4.78	11.53	11.60	5.74	13.71	13.79	5.74	13.71	13.79	
4	114.3	2.11	5.90	5.93	3.05	8.45	8.51	---	---	---	4.78	13.04	13.12	6.02	16.24	16.34	6.02	16.24	16.34	
5	141.3	2.77	9.56	9.62	3.40	11.66	11.75	---	---	---	---	---	---	6.55	21.99	22.13	6.55	21.99	22.13	
6	168.3	2.77	11.42	11.50	3.40	13.97	14.06	---	---	---	---	---	7.11	28.55	28.73	7.11	28.55	28.73		
8	219.1	2.77	14.93	15.02	3.76	20.17	20.30	6.35	33.65	33.87	7.04	37.19	37.43	8.18	42.98	43.25	8.18	42.98	43.25	
10	273	3.40	22.83	22.98	4.19	28.06	28.24	6.35	42.18	42.45	7.80	51.53	51.86	9.27	60.90	61.29	9.27	60.90	61.29	
12	323.8	3.96	31.55	31.75	4.57	36.34	36.57	6.35	50.21	50.54	8.38	65.84	66.27	9.53	74.61	75.08	10.31	80.51	81.03	
14	355.6	3.96	34.69	34.91	6.35	55.24	55.60	7.92	68.59	69.03	9.53	82.15	82.68	9.53	82.15	82.68	11.13	95.50	96.12	
16	406.4	4.19	41.98	42.25	6.35	63.28	63.69	7.92	78.62	79.12	9.53	94.21	94.82	9.53	94.21	94.82	12.70	124.55	125.35	
18	457	4.19	47.26	47.56	6.35	71.28	71.74	7.92	88.60	89.17	11.13	123.62	124.41	9.53	106.23	106.91	14.27	157.38	158.39	
20	508	4.78	59.92	60.30	6.35	79.35	79.86	9.53	118.33	119.09	12.70	156.69	157.70	9.53	118.33	119.09	15.09	185.28	186.47	
22	559	4.78	65.99	66.41	6.35	87.42	87.98	9.53	130.44	131.28	12.70	172.83	173.94	9.53	130.44	131.28	---	---	---	
24	610	5.54	83.42	83.95	6.35	95.48	96.10	9.53	142.55	143.46	14.27	211.76	213.12	9.53	142.55	143.46	17.48	258.00	259.66	
26	660	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	9.53	154.42	155.41	---	---	---
28	711	---	---	---	7.92	138.71	139.60	12.70	220.91	222.33	15.88	274.97	276.74	9.53	166.52	167.59	---	---	---	
30	762	6.35	119.53	120.30	7.92	148.77	149.73	12.70	237.05	238.57	15.88	295.14	297.04	9.53	178.63	179.78	---	---	---	
32	813	---	---	---	7.92	158.83	159.85	12.70	253.18	254.81	15.88	315.32	317.34	9.53	190.74	191.96	17.48	346.39	348.62	

Figura 37: Dimensiones estandarizadas de conducciones fabricadas en acero inoxidable SúperDúplex UNS32750 del proveedor Walmitube. Fuente:[53]

Aplicando la metodología explicada anteriormente en este apartado, se determinan las dimensiones de las conducciones del proceso cuyo flujo sea de líquidos o gases, mostrándose los resultados en la *Tabla 92*.

Tabla 92: Dimensiones de las conducciones del proceso. Fuente: [Elaboración propia]

Corriente	G (kg/s)	ρ (kg/m³)	D_{óptimo} (mm)	D_{estandarizado} (mm)	Espesor (mm)	Tipo de espesor
2	0,84	1.350	8,25	10,30	1,73	Sch 40
3	4,84	997,00	22,98	26,70	2,87	Sch 40
4	6,11	1.042,81	25,26	26,70	2,87	Sch 40
5	6,11	1.042,81	25,26	26,70	2,87	Sch 40
6	10,66	970,31	34,59	42,20	3,56	Sch 40
7	10,66	970,31	34,59	42,20	3,56	Sch 40
8	10,66	970,31	34,59	42,20	3,56	Sch 40
9	1,82	1,212	403,97	406,40	12,70	Sch 40
10	1,82	2,456	283,78	323,80	10,31	Sch 40
11	1,43	1,543	317,51	323,80	10,31	Sch 40
12	0,39	1,625	161,23	168,30	7,11	Sch 40
13	0,39	7,057	77,37	88,90	5,49	Sch 40
14	0,39	8,346	71,14	73,00	5,16	Sch 40
15	0,79	8,332	101,40	101,60	5,74	Sch 40
16	0,77	8,319	100,22	101,60	5,74	Sch 40
17	0,37	8,319	69,46	73,00	5,16	Sch 40
18	0,40	8,319	72,25	73,00	5,16	Sch 40
19	10,68	1.029,99	33,60	42,20	3,56	Sch 40
20	10,68	1.029,99	33,60	42,20	3,56	Sch 40
21	2,65	1.036,48	16,69	17,10	2,31	Sch 40
22	8,03	1.027,85	29,16	33,40	3,38	Sch 40
23	8,03	1.027,85	29,16	33,40	3,38	Sch 40
24	1,90	1.023,65	14,20	17,10	2,31	Sch 40
25	4,55	1.031,13	21,92	26,70	2,87	Sch 40
26	4,55	1.031,13	21,92	26,70	2,87	Sch 40
27	6,13	1.029,14	25,47	26,70	2,87	Sch 40
28	6,13	1.029,14	25,47	26,70	2,87	Sch 40
29	5,98	997,00	25,56	26,70	2,87	Sch 40
30	5,98	997,00	25,56	26,70	2,87	Sch 40
31	4,79	806,70	25,43	26,70	2,87	Sch 40
32	4,79	806,70	25,43	26,70	2,87	Sch 40
33	10,88	928,39	35,73	42,20	3,56	Sch 40
34	6,02	995,10	25,66	26,70	2,87	Sch 40
35	6,02	995,1	25,66	26,70	2,87	Sch 40
36	0,47	964,00	7,31	10,30	1,73	Sch 40
38	6,49	991,70	26,69	26,70	2,87	Sch 40
39	6,49	991,70	26,69	26,70	2,87	Sch 40
40	10,08	1,683	807,77	813	17,48	Sch 40
42	3,62	1,18	577,68	610	17,48	Sch 40

12. Bibliografía

- [1]. FARGUES, C., MATHIAS, Á. y RODRIGUES, A., 1996. Kinetics of Vanillin Production from Kraft Lignin Oxidation. [en línea], vol. 35, no. 1. [Consulta: 28 enero 2023]. ISSN 0888-5885. DOI 10.1021/ie950267k. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1021/ie950267k>.
- [2]. PACHECO ARAÚJO, José D. *Production of Vanillin from Lignin Present in the Kraft Black Liquor of the Pulp and Paper Industry*. Universidade do Porto, Agosto, 2008.
- [3]. Esteves da Costa, Carina Andreia. *Vanillin and Syringaldehyde from Side Streams of Pulp and Paper Industries and Biorefineries*. Universidade do Porto, Marzo, 2017.
- [4]. LEVENSPIEL, Octave. *Chemical Reaction Engineering*. 2ª ed. Nueva York: John Wiley and Sons, 1972. ISBN 9780471530169.
- [5] CONESA FERRER, J.A., 2014. *Diseño de Reactores Heterogéneos. Tema 3: Reacción sólido-fluido no catalítica*. Universidad de Alicante. Disponible en: https://explore.openaire.eu/search/other?orpId=od_____935::d7c77e3cbaef40cc8f9d378007eea1fd.
- [6]. *Two Film Theory: Explaining the Mechanism of Gas Transfer*. Disponible en: <https://steemit.com/steemstem/@josalarcon2/two-film-theory-explaining-the-mechanism-of-gas-transfer>.
- [7]. Li, Shaofen. Chapter 9 - Multiple-Phase Reactors. *Reaction Engineering*, 2017. pp. 405-444. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-410416-7.00009-4>.
- [8]. ARAÚJO, J.D.P., GRANDE, C.A. y RODRIGUES, A.E., 2010. Vanillin production from lignin oxidation in a batch reactor. [en línea], vol. 88, no. 8, pp. 1024-1032. [Consulta: 12 diciembre 2022]. ISSN 0263-8762. DOI 10.1016/j.cherd.2010.01.021. Disponible en: <https://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2010.01.021>.
- [9]. ARAÚJO, José D. P.; GRANDE, Carlos A. and RODRIGUES, Alírio E. Structured Packed Bubble Column Reactor for Continuous Production of Vanillin from Kraft Lignin Oxidation. *Catalysis Today*, Septiembre, 2009, vol. 147. pp. S330-S335. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2009.07.016>.
- [10]. *Axial Dispersion*. [Consulta: 20 Junio, 2022]. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/axial-dispersion>.
- [11]. FOGLER, H. S. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 4ª ed. Pearson Educación, 2008. *Models for Non ideal Reactors*. ISBN 9789702611981.
- [12]. LORTIE, Robert; and PELLETIER, Dominique. Comparison between Dispersion and Plug-Flow Models for Fixed-Bed Enzyme Reactors. *AIChE Journal*, Septiembre, 1992, vol. 38, no. 9. Disponible en: <https://doi.org/10.1002/aic.690380917>.

- [13]. SINNOT, Ray; and TOWLER, Gavin. *Diseño En Ingeniería Química*. Quinta ed. Barcelona: Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
- [14]. DECKWER, Wolf-Dieter. *Bubble Column Reactors*. Switzerland: John Wiley and Sons, 1992. ISBN 0-471-91811-3.
- [15]. IBORRA, Montserrat; TEJERO, Javier and CUNILL, Fidel. *Reactores Multifásicos*. Universitat de Barcelona, 2013.
- [16]. Borges da Silva, E. A.; ZABKOVA, M. and ARAÚJO, J. D. An Integrated Process to Produce Vanillin and Lignin-Based Polyurethanes from Kraft Lignin. *Chemical Engineering Research and Design*, Septiembre, 2009, vol. 87, no. 9. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2009.05.008>.
- [17]. *Ficha técnica acero inoxidable*. [Consulta: 30 enero 2023]. Disponible en: <https://www.empresascarbone.com/pdf/ficha-tecnica-del-acero-inoxidable.pdf>.
18. Sulzer Chemtech. *Structured Packings for Distillation, Absorption and Reactive Distillation*. Disponible en: http://www.rcprocess.se/bdh_filearea/Sulzer_Kuhni/Structured_Packings.pdf.
- [19]. FONTS, Isabel, et al. Thermodynamic and Physical Property Estimation of Compounds Derived from the Fast Pyrolysis of Lignocellulosic Materials. *Energy Fuels*, 4 Septiembre, 2021, vol. 35, no. 21. pp. 17114–17137. Available from <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.1c01709>.
- [20]. WATKINS, Dereca, et al. Extraction and Characterization of Lignin from Different Biomass Resources. *Journal of Materials Research and Technology*, Enero-Marzo, 2015, vol. 4, no. 1. pp. 26-32. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2014.10.009>.
- [21]. ROHSENOW, Warren M.; HARTNETT, James P. and CHO, Young I. *Handbook of Heat Transfer*. 3ª ed. MCGRAW-HILL, 1998. ISBN 0-07-05355-8.
- [22]. KHAN, A.; KHAN, A. A. and VARMA, Y. B. Bioprocess Engineering Springer-Verlag, 1997. *Flow Regime Identification and Pressure Drop in Cocurrent Gas-Liquid Upflow through Packed Beds*, pp. 355-360.
- [23]. Product Technical Data. *DOWTHERM A Heat Transfer Fluid*.
- [24]. LEVENSPIEL, Octave; and KUNII, Daizo. *Fluidization Engineering*. 2ª ed. Butterworth—Heinemann, 1991. ISBN 0-409-90233-0.
- [25]. ASHBY, Michael F. *Materials Selection in Mechanical Design*. 2ª ed. England: Butterworth-Heinemann, 1999. ISBN 0-7506-4357-9.
- [26]. ASHBY, Michael F. *Materials Selection in Mechanical Design*. 4ª ed. England: Butterworth-Heinemann, 1999. ISBN 0-7506-4357-9.

- [27]. Allowable Stress - Temperature of Monel 400. [Consulta: 28 enero 2023]. Disponible en: <http://www.metalspiping.com/allowable-stress-temperature-of-monel-400.html>.
- [28]. *Elliptical Bottoms. Inoxidables* [Consulta: 25 Mayo, 2022] Disponible en: <https://www.slawinski.co.uk/products/elliptical-bottoms/>.
- [29]. VALVE INC, C., 1997. Crosby ® Pressure Relief Valve Engineering Handbook. S.I.
- [30]. *Capítulo 2 Adsorción*. [Consulta: 27 Mayo, 2022] Disponible en: <https://biblus.us.es/bibing/proyectos/abreproy/70358/fichero/CAPITULO2.pdf>.
- [31]. WANKAT, Phillip C. *Separation Process Engineering*. 2ª ed. México: PEARSON EDUCATION, 2007. ISBN 978-0-13-084789-8.
- [32]. CRITTENDEN, Barry; and THOMAS, W. J. *Adsorption Technology & Design*. London: Reed Educational and Professional Publishing, 1998. ISBN 0-7506-1959-7.
- [33]. M. A. S. D. Barros. P. A., Arroyo. y E. A., Silva., 2013. *General Aspects of Aqueous Sorption Process in Fixed Beds*. S.I.: IntechOpen. ISBN 9789535111702. Disponible en: <https://openresearchlibrary.org/viewer/a59c5df0-5e6c-4711-a703-361268dcf8a1>.
- [34]. RUTHVEN, Douglas M. *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*. Estado Unidos: A Wiley-Interscience publication, 1938. ISBN 0-471-86606-7.
- [35]. PAULA, C., DE OLIVEIRA, R., PINTO, ALÍRIO, E. y RODRIGUES, 2017. Fractionation and Purification of Syringaldehyde and Vanillin from Oxidation of Lignin Maria Inês Ferreira da Mota. 1 marzo 2017. S.I.: s.n.
- [36]. R. Abu Samah et al. 2003. Adsorption of Vanillin using Macroporous Resin H103. Vol. 31, no. 7. DOI 10.1007/978-3-642-16678-5. Disponible en: <http://hdl.handle.net/2078/ebook:28589>.
- [37]. GOMES, E. D.; and RODRIGUES, A. E. Lignin Biorefinery: Separation of Vanillin, Vanillic Acid and Acetovanillone by Adsorption. *Separation and Purification Technology*, 1 Junio, 2019, vol. 216. pp. 92-101. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.01.071>.
- [38]. *SEPABEADS TM SP700*. [Consulta: 28 enero, 2023].
- [39]. Breakthrough curves for the pore model for the four isotherms. [Consulta: 30 enero 2023]. Disponible en: https://www.researchgate.net/figure/Breakthrough-curves-for-the-pore-model-for-the-four-isotherms-and-the-breakthrough-curve_fig4_332059459.

- [40]. MOTA, M.I.F., PINTO, P.C.R., LOUREIRO, J.M. y RODRIGUES, A.E., 2015. Recovery of Vanillin and Syringaldehyde from Lignin Oxidation: A Review of Separation and Purification Processes. ISSN 1542-2119. DOI 10.1080/15422119.2015.1070178. Disponible en: <<http://dx.doi.org/10.1080/15422119.2015.1070178>>.
- [41]. VANESSA, Sílvia; and BARBOSA, Santos. *Adsorption Equilibrium and Fixed-Bed Adsorption of Phenolic Acids Onto Polymeric Adsorbent*. INTEGRATED MASTER ENVIRONMENTAL ENGINEERING ed. Universidade do Porto, 29 Junio, 2015.
- [42]. Material Selection Charts. [en línea], 2020. [Consulta: 28 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.proxom.net/material-selection/>>.
- [43]. MASSA, J.-M., GIRÓ, J. y GIUDICI, A., Abril 2015. *Compendio de Cálculo Estructural II*. S.l.: s.n. Disponible en: <http://www.cat.calc_est_2_im.efn.uncor.edu/wp-content/uploads/2013/10/Cap-16_RECIPIENTES_Parte-1.pdf>.
- [44]. Torispherical head. [Consulta: 28 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.koenig-co.de/en/products/heads/torispherical-head/>>.
- [45]. *CAPÍTULO 11 Manual de cálculos. Planta de producción de ácido fórmico*. S.l.: Universitat Autònoma de Barcelona. Disponible en: <https://ddd.uab.cat/pub/tfg/2016/168385/TFG_Capsule_cap11.pdf>.
- [46]. DE LA C.MENDOZA DÍAZ, I., IBARRA HERNÁNDEZ, E.V., DUPLIN FONSECA, M. y CAMPOS PÉREZ, Y. CAPACIDAD VOLUMÉTRICA DE TAPAS Y FONDOS TORIESFERICOS. [Consulta: 28 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.studocu.com/es-mx/document/instituto-tecnologico-de-toluca/administracion-de-operaciones-ii/volumen-de-toriesferas/14076796>>.
- [47]. MICARI, Marina; and AGRAWAL, Kumar Varoon. Oxygen Enrichment of Air: Performance Guidelines for Membranes Based on Techno-Economic Assessment. *Journal of Membrane Science*, Enero, 2022, vol. 641, no. 1. Disponible en: <<https://doi.org/10.1016/j.memsci.2021.119883>>.
- [48]. Polymeric Gas-Separation Membranes for Petroleum Refining. *International Journal of Polymer Science*, 19 Febrero, 2019, vol. 2017. Disponible en: <<https://doi.org/10.1155/2017/4250927>>.
- [49]. Bionomic HEI Wet Electrostatic Precipitator System. [Consulta: 30 enero 2023]. Disponible en: <https://www.directindustry.es/prod/bionomicind-57983.html>.
- [50]. SD Series Spray Dryer. Disponible en: <<https://kedagroup.com/index.php?m=content&c=index&a=lists&catid=161&details=0>>.
- [51]. Aleación 2507 - Dúplex / Super Duplex placas de acero inoxidable. [Consulta: 28 enero 2023]. Disponible en: <https://www.sandmeyersteel.com/spanish/2507.html>.

[52]. Acero inoxidable UNS32750 SuperDuplex disponible. [Consulta: 28 enero 2023].
Disponible en: <<https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=5047>>.

[53]. Gallery of Size Tables according to ASME B36.10. [Consulta: 28 enero 2023].
Disponible en: <<https://www.walmitube.com/photos-of-pipes-form/>>.

ANEXO III.

ANÁLISIS DE
VIABILIDAD
ECONÓMICA

ÍNDICE

1.	Introducción	3
2.	Préstamo de capital para la puesta en marcha	3
3.	Cálculo de costes explotación	5
3.1.	Coste de adquisición de materias primas	6
3.2.	Coste de adquisición de otros compuestos	6
3.3.	Coste de servicios auxiliares	8
3.4.	Coste de mano de obra directa e indirecta	9
3.5.	Coste de mantenimiento y reparación	10
3.6.	Coste de distribución del producto	10
3.7.	Coste del seguro	11
4.	Cálculo de costes de gestión.....	11
4.1.	Gastos comerciales	11
4.2.	Gastos administrativos	11
4.3.	Gastos de investigación	12
5.	Resumen de costes de manufactura.....	12
6.	Cálculo de ingresos por la venta de productos	12
7.	Amortización.....	13
8.	Análisis del flujo de caja	14
9.	Análisis de rentabilidad de la planta	18
9.1.	Valor Actual Neto (VAN).....	18
9.2.	Tasa Interna de Retorno (TIR).....	18
9.3.	Payback	19
10.	Conclusiones sobre la viabilidad económica.....	20
11.	Análisis de sensibilidad	20
12.	Bibliografía.....	23

1. Introducción

En el presente anexo se realizará un análisis para la determinación de la viabilidad económica del proyecto planteado en este trabajo. La rentabilidad del proyecto se analizará en base a los indicadores financieros VAN (Valor Actual Neto), TIR (Tasa Interna de Rentabilidad) y “Payback” o tiempo de retorno. Por otra parte, se analizarán los flujos de caja de la planta en un período de 20 años, con lo que se estudiará su evolución en términos económicos.

Para este estudio, se tiene como base el presupuesto para la construcción y puesta en marcha de la planta, calculado en el *Documento V. Presupuesto*.

2. Préstamo de capital para la puesta en marcha

Una vez calculado la inversión que se debe realizar para poder comenzar la actividad industrial, incluyendo la construcción y puesta en marcha, es necesario buscar vías de financiación. El método de financiación más habitual es a través de un préstamo por parte de una entidad bancaria. Ello conlleva a un coste a mayores debido a los intereses impuestos por dicha entidad.

En el momento de la realización del presente análisis de viabilidad económica se está experimentando en España un aumento considerable de los tipos de interés en préstamos, debido en parte a la situación económica de Unión Europea y a factores como la incertidumbre por guerras y tensiones internacionales. Habiendo realizado una búsqueda general en varias entidades financieras, se ha establecido una media de tipo de interés fijo al préstamo de un 7%. Además, se establece un plazo de 20 años para la devolución del capital prestado por parte de la entidad financiera.

En base a estos datos y a la cuantía solicitada de préstamo, la cual asciende a 49.929.196,01 €, se debe calcular el importe anual a pagar a la entidad, también conocido como “anualidad”, según el método francés, el cual permite el cálculo de cuotas anuales constantes a interés fijo y que se expresa en forma de la *Ecuación (1)* [1]:

$$Cuota\ anual\ (C) = Co \cdot \frac{i \cdot (1 + i)^n}{(1 + i)^n - 1} \quad (1)$$

Siendo:

Co: Cuantía total del préstamo original (€)

i: Tasa de interés anual fijo

n: Período de devolución del préstamo (años)

Teniendo en cuenta todos los datos descritos y aplicando la *Ecuación (1)* siguiendo el método francés, se obtienen los resultados mostrados en la *Tabla 1*.

Tabla 1: Cálculo de la anualidad a partir del sistema francés. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
C_0	49.929.196,01 €
n	20 años
i	7%
Anualidad	4.712.962,89 €

El sistema de amortización francés garantiza que la cuota anual a pagar sea constante. La anualidad engloba una parte de amortización del préstamo por la cuantía solicitada y una parte de intereses. Debe tenerse en cuenta que la cuantía correspondiente al interés se calcula anualmente sobre el capital vivo, el cual se corresponde con el capital pendiente de amortizar. Por este motivo, la mayor parte de la cuota anual en los primeros años se destina al pago de intereses y una pequeña parte a la amortización del capital vivo. Con el pago de las sucesivas anualidades a lo largo del tiempo, esta situación se invierte, ya que el capital vivo sobre el que se calculan los intereses disminuye progresivamente, lo que permite destinar una mayor parte de la anualidad a la amortización del préstamo.

El análisis de la devolución del préstamo siguiendo el método francés se lleva a cabo por medio de la realización del denominado cuadro de amortización, tal y como se muestra en la *Tabla 2*. Este incluye el desarrollo año a año de los intereses (I_m), capital vivo (C_v) y capital amortizado (A). [2]

El cálculo de los intereses para un año concreto, I_m , se realiza a partir de la *Ecuación (2)*.

$$I_m = C_{V(m-1)} \cdot i \quad (2)$$

En donde $C_{V(m-1)}$ se corresponde con el capital vivo o capital pendiente de devolver después del ejercicio anterior.

El capital amortizado en cada ejercicio, A , puede ser calculado como la diferencia entre la anualidad y los intereses de ese año, tal y como se muestra en la *Ecuación (3)*. [2]

$$A_m = C_0 - I_m \quad (3)$$

Finalmente, aplicando los conceptos explicados anteriormente en este punto, es posible realizar el cuadro de amortización, el cual se muestra en la *Tabla 2*.

Tabla 2: Cuadro de amortización. Fuente: [Elaboración propia]

Año (m)	Anualidad, C_0	Intereses, I	Amortización, A	Capital vivo, C_V
0	-	-	-	49.929.196,01 €
1	4.712.962,89 €	3.495.043,72 €	1.217.919,17 €	48.711.276,84 €
2	4.712.962,89 €	3.409.789,38 €	1.303.173,51 €	47.408.103,32 €
3	4.712.962,89 €	3.318.567,23 €	1.394.395,66 €	46.013.707,67 €
4	4.712.962,89 €	3.220.959,54 €	1.492.003,35 €	44.521.704,31 €
5	4.712.962,89 €	3.116.519,30 €	1.596.443,59 €	42.925.260,72 €
6	4.712.962,89 €	3.004.768,25 €	1.708.194,64 €	41.217.066,08 €
7	4.712.962,89 €	2.885.194,63 €	1.827.768,27 €	39.389.297,82 €
8	4.712.962,89 €	2.757.250,85 €	1.955.712,04 €	37.433.585,77 €
9	4.712.962,89 €	2.620.351,00 €	2.092.611,89 €	35.340.973,88 €
10	4.712.962,89 €	2.473.868,17 €	2.239.094,72 €	33.101.879,17 €
11	4.712.962,89 €	2.317.131,54 €	2.395.831,35 €	30.706.047,82 €
12	4.712.962,89 €	2.149.423,35 €	2.563.539,54 €	28.142.508,27 €
13	4.712.962,89 €	1.969.975,58 €	2.742.987,31 €	25.399.520,96 €
14	4.712.962,89 €	1.777.966,47 €	2.934.996,42 €	22.464.524,54 €
15	4.712.962,89 €	1.572.516,72 €	3.140.446,17 €	19.324.078,36 €
16	4.712.962,89 €	1.352.685,49 €	3.360.277,41 €	15.963.800,96 €
17	4.712.962,89 €	1.117.466,07 €	3.595.496,82 €	12.368.304,13 €
18	4.712.962,89 €	865.781,29 €	3.847.181,60 €	8.521.122,53 €
19	4.712.962,89 €	596.478,58 €	4.116.484,31 €	4.404.638,22 €
20	4.712.962,89 €	308.324,68 €	4.404.638,22 €	0,00 €

El cuadro de amortización muestra claramente el fenómeno explicado anteriormente, en el que en los primeros años se observa que la mayor parte de la anualidad irá destinada al pago de intereses, mientras que en los últimos años la mayor parte de la anualidad irá destinada a la amortización del capital. Finalmente, se muestra como en el año 20 el capital vivo es igual a cero, lo cual quiere decir que no existe capital pendiente de amortizar.

3. Cálculo de costes explotación

En el siguiente apartado, se tendrán en cuenta los costes derivados de distintas áreas, todas ellas relacionadas con el desarrollo del proceso industrial de la planta. Entre las distintas partidas se encuentran el coste de adquisición de materias primas y otros compuestos, coste de servicios auxiliares, coste de mano de obra, mantenimiento y reparación, distribución de producto y seguros.

3.1. Coste de adquisición de materias primas

Queda patente que, para la obtención de vainillina de alta pureza, es necesario adquirir las materias primas para llevar a cabo el proceso. La materia prima principal empleada en este proceso es la lignina Kraft, adquirida principalmente a la compañía celulosa *ENCE Pontevedra*.

La planta emplea en el proceso de obtención de 500 t/año de vainillina una cantidad de 12.333,34 t/año de lignina. Debido a que el proveedor no ha facilitado un dato concreto sobre el coste por tonelada, se tomará un valor de referencia de mercado. Tal y como se ha analizado en el *Documento I. apartado 5.2.1 Lignina Kraft*, el precio de adquisición de la materia prima asciende a 380 \$/t, el cual considerando un cambio de moneda de 1,07\$/€, el coste asciende a 355,14 €/t.

El proceso también necesitará de otras materias primas para que se pueda llevar a cabo, entre las que se encuentra el agua, cuyo consumo anual asciende a 137.881,42 t/año. El precio de esta agua se obtiene a partir de heurísticas [3], siendo su coste de 0,53 €/t. En el proceso también se emplea una disolución de NaOH con una concentración 80 g/L, cuyo consumo anual asciende a 24.057,87 t/año. El precio por tonelada de la disolución de NaOH al 50% ha sido aportado por el proveedor, *CAMACHEM*, ascendiendo a 514,02 €/t, una vez aplicado el cambio de moneda. [4]

En la *Tabla 3* se recoge el resumen del coste de materias primas en base a lo previamente mencionado.

Tabla 3: Coste anual de materias primas. Fuente:[Elaboración propia]

Materia prima	Cantidad anual (t/año)	Precio unitario (€/t)	Coste anual (€)
Lignina	12.333,34	355,14	4.380.064,67
Agua	137.881,42	0,53	73.077,15
Disolución NaOH	24.057,87	514,02	12.366.194,86

3.2. Coste de adquisición de otros compuestos

En el proceso de producción de vainillina a partir de lignina Kraft se hacen uso de otros compuestos necesarios en distintas operaciones, como es el caso de la Sección 200, en la que se lleva a cabo la separación de compuestos. Dentro de este grupo se encuentran el agua desionizada y la disolución de etanol al 96%, empleados en el proceso de desorción de compuestos en las columnas de adsorción T-201 y T-202. Para el cálculo del consumo anual de estos compuestos se debe tener en cuenta que su flujo no es constante durante las 24 horas del día, los 330 días de operación al año. Cada uno de estos compuestos se utiliza un tiempo determinado, especificado en el *Anexo II. Cálculos justificativos*.

El cálculo se realiza teniendo en cuenta que un ciclo completo de operación en ambas columnas, lo cual incluye una adsorción y desorción completa con los dos compuestos empleados para ello, tiene una duración de 4,8 horas. Teniendo en cuenta el tiempo que dura cada una de las operaciones de desorción (1 hora para el agua desionizada y 30 minutos para la disolución de etanol) y que estas se realizan en las dos columnas, se obtiene la fracción de tiempo en el que cada uno de los compuestos es usado. Sabiendo que la planta opera durante 7.920 horas anuales, es posible determinar el tiempo total anual en el que existe flujo de cada uno de los compuestos a dichas columnas de adsorción. Finalmente, multiplicando dichos tiempos de flujo por los caudales máxicos de dichos compuestos se obtiene el consumo anual real.

En cuanto al coste de estos compuestos, se ha determinado a partir de heurísticas [3] el precio del agua desionizada, el cual asciende a 1,05 €/t. El precio de la disolución de etanol al 96% ha sido tomado del mercado mayorista a un proveedor ante la dificultad de encontrar un análisis riguroso de su precio y evolución. [5]

Por otra parte, se debe tener en cuenta el uso de la disolución de amoníaco al 20% en el precipitador PR-201 para la separación de los compuestos vainillina y siringaldehído. El consumo anual de esta disolución asciende a 13.483,09 t/año y su precio se especifica en la bibliografía [6] en el que se realiza un análisis temporal de su coste en varios países, siendo el más actualizado 184,98 €/t, una vez aplicado el cambio de divisa.

Por último, se debe mencionar que no se ha considerado un precio para el aire, empleado en el equipo SD-301, ya que su captación se hace directamente del ambiente.

La *Tabla 4* muestra el precio anual de adquisición de los compuestos previamente mencionados.

Tabla 4: Coste anual de otros compuestos del proceso. Fuente: [Elaboración propia]

Compuesto	Cantidad anual (t/año)	Precio unitario (€/t)	Coste anual (€)
Agua desionizada	71.062,60	1,05	74.615,73
Disolución etanol 96%	28.449,00	654,21	18.611.495,33
Disolución amoniacal 20%	13.483,09	172,88	2.330.936,44

Dentro de este apartado se tendrá también en cuenta el coste anual de reemplazo del relleno SP700 de las torres de adsorción T-201 y T-202. En el *Anexo II. Cálculos justificativos* se determinó la cantidad de relleno que alberga cada columna de adsorción y cuyo valor total de ambas columnas asciende a 28,46 toneladas.

Por otra parte, el precio de la resina ha sido extraído a partir de los datos de la bibliografía [7], en la que se analizan las operaciones de importación y exportación de distintas resinas adsorbentes y el su precio por kilogramo de resina. Extrapolando el dato a toneladas y aplicando el cambio de moneda el precio asciende a 16.630 €/t de resina SP700.

En la *Tabla 5* se muestra el coste anual debido a su reemplazo de las columnas de adsorción T-201 y T-202.

Tabla 5: Coste anual de sustitución de la resina SP700. Fuente:[Elaboración propia]

Compuesto	Cantidad anual (t/año)	Precio unitario (€/t)	Coste anual (€)
Resina SP700	28,46	16.630	473.290,80

3.3. Coste de servicios auxiliares

El proceso requiere de ciertas utilidades para llevar a cabo las distintas operaciones. Principalmente, las utilidades utilizadas son vapor de media presión, agua de refrigeración, DowTherm y electricidad. En principio, el coste de dichas utilidades vendría determinado por las cantidades utilizadas por año y su precio. El cálculo de los caudales de vapor de media presión, DowTherm y agua de refrigeración, así como el consumo de electricidad por parte de las bombas viene determinado en el *Anexo II. Cálculos justificativos*, sección *Dimensionamiento básico de equipos*. El precio de cada utilidad puede obtenerse de bibliografía, con lo que se obtendría el coste anual.

Sin embargo, en el momento de la realización de este análisis de viabilidad el precio de ciertos servicios auxiliares, como la electricidad, ha aumentado en gran medida y su coste fluctúa constantemente debido a factores socioeconómicos, por lo que es de esperar el mismo comportamiento para el resto de las utilidades. Por este motivo, el cálculo de los costes de servicios auxiliares se realizará mediante un método factorial, por el cual su coste equivaldrá al 10% del coste total de adquisición de materias primas y otros compuestos. Este procedimiento se basa en que estas materias primas y otros compuestos también están sometidos a las fluctuaciones del mercado, por lo que el cálculo del coste de los servicios auxiliares a partir del coste total actual de dichos compuestos aportará mayor rigurosidad al cálculo [3]. Los resultados obtenidos se recogen en la *Tabla 6*.

Tabla 6: Coste de los servicios auxiliares. Fuente:[Elaboración propia]

Concepto	Valor
Coste total adquisición de compuestos (€)	38.309.673,98
Factor de cálculo	0,1
Coste de servicios auxiliares (€)	3.830.967,40

3.4. Coste de mano de obra directa e indirecta

La planta requiere de mano de obra para que su funcionamiento sea posible, lo cual representa un coste que se debe analizar, distinguiendo entre el coste de mano de obra directa e indirecta.

El cálculo del coste de mano de obra directa debe realizarse conociendo el número de trabajadores en plantilla. La bibliografía [8] aporta un método para la determinación del número de operarios necesarios en planta por cada turno, aplicando para ello la *Ecuación (4)*.

$$N_{OL} = (6,29 + 31,7 \cdot P^2 + 0,23 \cdot N_{np}) \quad (4)$$

Donde:

P : Número de procesos con sólidos particulados

N_{np} : Número de procesos sin sólidos particulados

Por otra parte, para el cálculo del coste de mano de obra directa se establecen 240 turnos por año y una duración de 8 horas por turno, que se repartirán entre el número total de operarios calculado. Además, se debe tener en cuenta que una planta cuya operación se realiza en continuo durante 24 horas al día debe disponer de un número determinado de operarios contratados para garantizar la buena distribución del trabajo, por lo que el número real de operarios se obtiene aplicando un factor de 4,5 al número de operarios por turno calculado en un principio. [8]

Finalmente, debe fijarse el sueldo bruto de los trabajadores que se encuentran dentro del grupo de mano de obra directa. Teniendo en cuenta el salario medio en España, el salario en este tipo de industrias y la inflación que sufre el país en el momento de la realización de este estudio de viabilidad económica, se fija un sueldo medio de 40.000€ brutos anuales, distribuidos en 14 pagas (12 pagas ordinarias y 2 pagas extraordinarias). La empresa es también responsable del pago de un porcentaje a la Seguridad Social por la contratación de cada trabajador, el cual varía entre un 25-30% del salario bruto del trabajador. En la *Tabla 7* se recoge el coste total que debe asumir la planta por contratación de mano de obra directa.

Tabla 7: Coste de mano de obra directa. Fuente: [Elaboración propia]

Concepto	Valor
Número de operarios por turno, N_{OL}	23
Número total de operarios, N_T	104
Sueldo bruto anual (€/operario)	40.000
Seguridad Social (€/operario)	12.000
Coste de mano de obra directa (€/año)	5.408.000,00

La mano de obra indirecta engloba a todo aquel personal cuyo trabajo no esté relacionado directamente con el proceso, pero sí con otras tareas que dan soporte a la planta. Dentro de este grupo se encuentran los profesionales administrativos, transportistas o equipos de limpieza, entre otros. El cálculo del coste de la mano de obra indirecta se obtiene por medio de un método factorial, aplicando un factor de un 15% con respecto al coste de mano de obra directa [8]. Los resultados se muestran en la *Tabla 8*.

Tabla 8: Coste de mano de obra indirecta. Fuente: [Elaboración propia]

Concepto	Valor
Coste de mano de obra directa (€/año)	5.408.000,00
Factor de cálculo	0,15
Coste de mano de obra indirecta (€/año)	811.200,00

3.5. Coste de mantenimiento y reparación

Se incluyen todos los costes derivados del mantenimiento de la planta, así como de reparaciones y sustitución de piezas de equipos. El coste asciende al 5% del coste de capital fijo, cuyo valor ha sido calculado en el *Documento V. Presupuesto* [3]. Los resultados se recogen en la *Tabla 9*.

Tabla 9: Coste de mantenimiento y reparaciones. Fuente: [Elaboración propia]

Concepto	Valor
Coste de capital fijo, C_F (€)	45.363.029,39
Factor de cálculo	0,05
Coste de mantenimiento y reparación (€)	2.268.151,47

3.6. Coste de distribución del producto

Se incluyen los costes de empaquetado del producto final y su distribución a los clientes. De la misma manera que en el caso anterior, su coste se calcula a partir del coste de capital fijo, correspondiéndose en este caso con el 1% del coste de capital fijo [3]. Los resultados obtenidos se muestran en la *Tabla 10*.

Tabla 10: Coste de distribución del producto. Fuente: [Elaboración propia]

Concepto	Valor
Coste de capital fijo, C_F (€)	45.363.029,39
Factor de cálculo	0,01
Coste de distribución del producto (€)	453.630,29

3.7. Coste del seguro

Se incluye el coste de contratación del seguro para la planta, calculado como el 1% del coste de capital fijo [3]. Los resultados obtenidos se recogen la *Tabla 11*.

Tabla 11: Coste de contratación del seguro. Fuente: [Elaboración propia]

Concepto	Valor
Coste de capital fijo, C_F (€)	45.363.029,39
Factor de cálculo	0,01
Coste de contratación del seguro (€)	453.630,29

4. Cálculo de costes de gestión

En el siguiente apartado, se tendrán en cuenta el coste de los gastos de gestión, entre los que figuran los gastos comerciales, administrativos y de investigación. El importe de cada uno de estos gastos será calculado a partir del coste total de explotación, aplicando un factor de cálculo para cada caso dado por bibliografía [3].

4.1. Gastos comerciales

Se incluyen los costes derivados de la venta del producto, entre los que se encuentra personal o publicidad, entre otros. Los resultados obtenidos se muestran en la *Tabla 12*.

Tabla 12: Cálculo de gastos comerciales. Fuente: [Elaboración propia]

Concepto	Valor
Coste total de explotación (€)	51.535.253,44
Factor de cálculo	0,1
Gastos comerciales (€)	5.153.525,34

4.2. Gastos administrativos

Se incluyen los costes derivados del trabajo de oficina y sus empleados, entre otros. Los resultados se muestran en la *Tabla 13*.

Tabla 13: Cálculo de gastos administrativos. Fuente: [Elaboración propia]

Concepto	Valor
Coste total de explotación (€)	51.535.253,44
Factor de cálculo	0,03
Gastos administrativos (€)	1.546.057,60

4.3. Gastos de investigación

Se incluyen los gastos de laboratorio, donde se procesan las analíticas que puedan ser realizadas para el control de calidad, así como los gastos en investigación y desarrollo. Los resultados obtenidos se muestran en la *Tabla 14*.

Tabla 14: Cálculo de gastos de investigación. Fuente: [Elaboración propia]

Concepto	Valor
Coste total de explotación (€)	51.535.253,44
Factor de cálculo	0,01
Gastos de investigación (€)	515.352,53

5. Resumen de costes de manufactura

A continuación, se recogen en la *Tabla 15* los datos de las distintas partidas que conforman los costes de explotación y los costes de gestión.

Tabla 15: Costes de manufactura de la planta. Fuente:[Elaboración propia]

	Partida	Coste
EXPLOTACIÓN	Materias primas y otros compuestos	38.309.673,98 €
	Servicios auxiliares	3.830.967,40 €
	Mano de obra directa	5.408.000,00 €
	Mano de obra indirecta	811.200,00 €
	Mantenimiento y reparaciones	2.268.151,47 €
	Distribución del producto	453.630,29 €
	Seguro	453.630,29 €
	TOTAL COSTES EXPLOTACIÓN	51.535.253,44 €
GESTIÓN	Gastos comerciales	5.153.525,34 €
	Gastos administrativos	1.546.057,60 €
	Gastos de investigación	515.352,53 €
	TOTAL COSTES GESTIÓN	7.214.935,48 €

6. Cálculo de ingresos por la venta de productos

La principal fuente de ingresos de la planta viene de la venta del producto obtenido: vainillina al 98% pureza. En el *Documento I apartado 5. Estudio de mercado* se ha analizado los distintos tipos de vainillina y su mercado. En el caso de la vainillina producida a partir de lignina Kraft, tras analizar el mercado, se ha determinado un precio medio de venta de 140 \$/kg, lo que se traduce en 134,84 €/kg, aplicando el cambio de divisa.

Además, en el proceso de separación de vainillina y siringaldehído, llevada a cabo en la Sección 200 del proceso, se obtiene siringaldehído como subproducto. Tal y como se ha analizado anteriormente, el siringaldehído es un compuesto ampliamente usado en la industria farmacéutica, por lo que se considerará la venta de este subproducto.

Para ello, se ha obtenido a partir de bibliografía [9] un precio de venta de 22 €/kg.

Por tanto, se puede concluir que los ingresos de la planta vendrán de la venta del producto y subproducto, tal y como se muestra en la *Tabla 16*.

Tabla 16: Ingresos por ventas de producto y subproducto. Fuente: [Elaboración propia]

Compuesto	Cantidad (t/año)	Precio venta (€/t)	Importe (€)
Vainillina	500	130.841,12	65.420.560,75
Siringaldehído	168,85	22.000	3.714.700,00
INGRESOS ANUALES TOTALES (€)			69.135.260,75

7. Amortización

A medida que pasa el tiempo, ya sea por uso u obsolescencia, existe una pérdida de valor del capital inmovilizado. Esto se traduce en pérdidas para la empresa por lo que el objetivo es el cálculo del valor perdido anualmente para que pueda ser reconocido como un gasto deducible. La cuota de amortización anual representa el valor que compensa la pérdida de valor, por lo que se trata de un parámetro importante a la hora de analizar la rentabilidad económica de una planta industrial. La cuota de amortización puede ser calculada a partir de la *Ecuación (5)*. [10]

$$C_{\text{amortización}} = \frac{C_F - C_{\text{terreno}}}{n} \quad (5)$$

Donde:

C_F : Coste de capital fijo (€)

C_{terreno} : Coste del terreno (€)

n : Vida útil de la planta (años)

Puede observarse que la cuota de amortización será constante durante los años de vida útil de la planta. Además, en el cálculo de la cuota no se tiene en consideración el coste del terreno ya que se asume que este no se deprecia a lo largo del tiempo, por lo que no podrá ser compensado. Aplicando la expresión con los datos mostrados en la *Tabla 17*, se obtiene la cuota de amortización.

Tabla 17: Cálculo de la cuota de amortización. Fuente: [Elaboración propia]

Concepto	Valor
Coste de capital fijo, C_F (€)	45.363.029,39
Coste del terreno, $C_{terreno}$ (€)	2.745.474,31
n (años)	20
$C_{amortización}$ (€)	2.130.877,75

8. Análisis del flujo de caja

En este apartado se realizará un análisis de los flujos monetarios anuales de la planta, para los 20 años de vida útil que se ha considerado para esta, a partir del cual se podrá comprobar la viabilidad económica del proyecto. Se analizan por tanto las entradas y salidas de dinero con el tiempo, lo cual dependerá de los ingresos y gastos de la planta.

En la realización del flujo se calcularán diversos parámetros, empezando por el beneficio bruto o beneficio antes de impuestos para cada año (BAI_m). Este es calculado como la diferencia entre los ingresos y la suma de costes de manufactura, la cuantía correspondiente a los intereses para ese año debido al capital vivo del préstamo financiero y la cuota de amortización. Debe tenerse en cuenta la aplicación de la tasa de inflación sobre los ingresos y los costes de manufactura totales del año, que para este caso es de un 3%. Se calcula a partir de la Ecuación (6). [3]

$$BAI_m = Ingresos_m - Costes_m - Intereses_m - C_{amortización} \quad (6)$$

Siendo $Ingresos_m$ y $Costes_m$ los valores de ingresos y costes de manufactura actualizados con la tasa de inflación y $Intereses_m$ la cuota correspondiente a los intereses, para el año m .

Cabe destacar que el BAI no incluye la cuantía debida a impuestos. La cuantía debida a impuestos se estima como un 30% del BAI para ese año. El siguiente paso será por tanto la aplicar dichos impuestos, con lo que se obtiene el denominado beneficio neto para el año m , (BN_m), calculado a partir de la Ecuación (7). [3]

$$BN_m = BAI_m - impuestos_m \quad (7)$$

A continuación, el cálculo del flujo neto de caja para el año m , FNC_m , se obtiene sumando la cuota de amortización al beneficio neto de ese año. Tal y como se explicó en el punto 7. Amortización, el sentido que tiene sumar la cuota de amortización es compensar la pérdida de valor con el tiempo. Se obtiene a partir de la Ecuación (8). [3]

$$FNC_m = BN_m + C_{amortización} \quad (8)$$

Finalmente, es posible calcular el flujo neto de caja acumulado mediante la suma del flujo neto de caja acumulado del año $(m-1)$ y el flujo neto de caja del año m . El flujo de caja neto acumulado será de vital importancia para la determinación del “Payback”, que constituye uno de los parámetros de análisis para determinar la viabilidad económica de la planta. Cabe destacar que en el año 0 (año en el que se realiza la inversión) el flujo neto de caja acumulado es igual al valor de la inversión, en este caso 49.929.196,01 €.

La aplicación de los distintos parámetros anteriormente explicados permite realizar los flujos de caja año a año durante la vida útil de la planta, 20 años, lo cual se muestra en la *Tabla 18*.

Tabla 18: Flujos de caja anuales. Fuente: [Elaboración propia]

Año	0	1	2	3	4	5	6	7
Ingresos	-	69.135.260,75 €	71.209.318,57 €	73.345.598,13 €	75.545.966,07 €	77.812.345,05 €	80.146.715,40 €	82.551.116,87 €
Costes	-	58.750.188,92 €	60.512.694,58 €	62.328.075,42 €	64.197.917,68 €	66.123.855,21 €	68.107.570,87 €	70.150.798,00 €
Intereses	-	3.495.043,72 €	3.409.789,38 €	3.318.567,23 €	3.220.959,54 €	3.116.519,30 €	3.004.768,25 €	2.885.194,63 €
Amortización	-	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €
BAI	-	4.759.150,36 €	5.155.956,85 €	5.568.077,72 €	5.996.211,10 €	6.441.092,78 €	6.903.498,53 €	7.384.246,49 €
Impuestos	-	1.427.745,11 €	1.546.787,06 €	1.670.423,32 €	1.798.863,33 €	1.932.327,83 €	2.071.049,56 €	2.215.273,95 €
BN	-	3.331.405,25 €	3.609.169,80 €	3.897.654,40 €	4.197.347,77 €	4.508.764,95 €	4.832.448,97 €	5.168.972,54 €
Amortización	-	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €
FNC	-49.929.196,01 €	5.462.283,00 €	5.740.047,55 €	6.028.532,16 €	6.328.225,52 €	6.639.642,70 €	6.963.326,72 €	7.299.850,30 €
FNC acumulado	-49.929.196,01 €	-44.466.913,00 €	-38.726.865,45 €	-32.698.333,29 €	-26.370.107,77 €	-19.730.465,07 €	-12.767.138,35 €	-5.467.288,05 €

Año	8	9	10	11	12	13	14	15
Ingresos	85.027.650,37 €	87.578.479,88 €	90.205.834,28 €	92.912.009,31 €	95.699.369,59 €	98.570.350,68 €	101.527.461,20 €	104.573.285,03 €
Costes	72.255.321,94 €	74.422.981,60 €	76.655.671,04 €	78.955.341,17 €	81.324.001,41 €	83.763.721,45 €	86.276.633,10 €	88.864.932,09 €
Intereses	2.757.250,85 €	2.620.351,00 €	2.473.868,17 €	2.317.131,54 €	2.149.423,35 €	1.969.975,58 €	1.777.966,47 €	1.572.516,72 €
Amortización	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €
BAI	7.884.199,83 €	8.404.269,53 €	8.945.417,31 €	9.508.658,84 €	10.095.067,08 €	10.705.775,89 €	11.341.983,88 €	12.004.958,47 €
Impuestos	2.365.259,95 €	2.521.280,86 €	2.683.625,19 €	2.852.597,65 €	3.028.520,12 €	3.211.732,77 €	3.402.595,16 €	3.601.487,54 €
BN	5.518.939,88 €	5.882.988,67 €	6.261.792,12 €	6.656.061,19 €	7.066.546,95 €	7.494.043,12 €	7.939.388,72 €	8.403.470,93 €
Amortización	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €
FNC	7.649.817,64 €	8.013.866,43 €	8.392.669,87 €	8.786.938,94 €	9.197.424,71 €	9.624.920,88 €	10.070.266,47 €	10.534.348,68 €
FNC acumulado	2.182.529,59 €	10.196.396,02 €	18.589.065,89 €	27.376.004,83 €	36.573.429,54 €	46.198.350,42 €	56.268.616,89 €	66.802.965,57 €

Año	16	17	18	19	20
Ingresos	107.710.483,58 €	110.941.798,09 €	114.270.052,03 €	117.698.153,59 €	121.229.098,20 €
Costes	91.530.880,05 €	94.276.806,45 €	97.105.110,65 €	100.018.263,97 €	103.018.811,88 €
Intereses	1.352.685,49 €	1.117.466,07 €	865.781,29 €	596.478,58 €	308.324,68 €
Amortización	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €
BAI	12.696.040,29 €	13.416.647,82 €	14.168.282,34 €	14.952.533,30 €	15.771.083,89 €
Impuestos	3.808.812,09 €	4.024.994,35 €	4.250.484,70 €	4.485.759,99 €	4.731.325,17 €
BN	8.887.228,21 €	9.391.653,47 €	9.917.797,64 €	10.466.773,31 €	11.039.758,72 €
Amortización	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €	2.130.877,75 €
FNC	11.018.105,96 €	11.522.531,23 €	12.048.675,39 €	12.597.651,06 €	13.170.636,48 €
FNC acumulado	77.821.071,53 €	89.343.602,76 €	101.392.278,15 €	113.989.929,21 €	127.160.565,69 €

9. Análisis de rentabilidad de la planta

El análisis de rentabilidad de la planta se realizará empleando 3 indicadores financieros a partir de los flujos de caja mostrados en la *Tabla 18*. Estos determinarán si el proceso planteado es económicamente viable o no, en otras palabras, dictaminan si el proceso es rentable.

9.1. Valor Actual Neto (VAN)

Se trata del primero de los indicadores financieros para llevar a cabo el análisis de rentabilidad. El objetivo de este marcador es la emisión de una proyección económica de futuro de un proyecto, por lo que permite determinar fácilmente si un proyecto puede ser, desde un punto de vista económico, viable en el caso de reportar beneficios (VAN positivo), no viable si reporta pérdidas (VAN negativo) o, si simplemente no reporta pérdidas ni beneficios (VAN =0). Este parámetro se determina realizando una actualización de los flujos de gastos e ingresos, descontando la inversión inicial, tal y como expresa la *Ecuación (9)*: [11]

$$VAN = -I + \sum_{N=1}^N \frac{Fn}{(1+i)^n} \quad (9)$$

Siendo I la cuantía de inversión inicial (€); Fn el flujo de caja; i la tasa de descuento (7%) y n el tiempo de vida útil (años).

Teniendo en cuenta los datos de los flujos de caja año a año, puede determinarse el VAN correspondiente al proyecto presentado, mostrado en la *Tabla 19*.

Tabla 19: Cálculo del VAN. Fuente: [Elaboración propia]

Valor Actual Neto, VAN	34.743.319,98 €
-------------------------------	------------------------

Siguiendo las indicaciones descritas en este apartado, puede concluirse que el proceso debe ser **ACEPTADO**, ya que el valor de VAN obtenido indica que el proyecto generará beneficios en el futuro.

9.2. Tasa Interna de Retorno (TIR)

Se trata de uno de los marcadores más empleados en la industria para determinar la viabilidad económica de un proyecto. Se define como el valor de tasa de descuento que iguala el VAN a cero, expresado en porcentaje. Este parámetro no solo indica si el proyecto es viable económicamente o no, sino que, además, el resultado se corresponde con la tasa de rentabilidad del proyecto. Para poder realizar dicha valoración, se debe comparar el valor de la TIR con la tasa de descuento, siendo en este proyecto de un 7%.

Si la TIR es mayor que la tasa de descuento puede concluirse que el proyecto es rentable y por tanto, viable. Por el contrario, si la TIR es menor que la tasa de descuento sería un indicativo de la no rentabilidad del proyecto y, por tanto, que este debe ser descartado. La TIR se calcula a partir de la *Ecuación (10)*: [11]

$$0 = -I + \sum_{N=1}^N \frac{Fn}{(1 + TIR)^n} \tag{10}$$

Siendo *I* la cuantía de inversión inicial (€).

De la misma manera que en el caso del Valor Actual Neto (VAN), se emplearán los datos obtenidos para la determinación de la TIR. El resultado para este proyecto se muestra en la *Tabla 20*.

Tabla 20: Cálculo de la TIR. Fuente: [Elaboración propia]

Tasa Interna de Retorno, TIR	13,6%
-------------------------------------	--------------

Observando el dato tenido y siguiendo las indicaciones descritas, puede concluirse que el proyecto es **RENTABLE**, ya que el valor de la Tasa Interna de Retorno es superior a la tasa de descuento para este proyecto.

9.3. Payback

Este último indicador proporciona la información sobre el tiempo que se tardará en recuperar la inversión inicial. Es un indicativo de lo rentable que es un proceso ya que, se puede concluir que cuantos más años se tarde en recuperar la inversión de la planta, menor rentabilidad reporta la misma. El tiempo de retorno se determina cuando el flujo neto de caja acumulado del año *m* iguala la inversión inicial. [11]

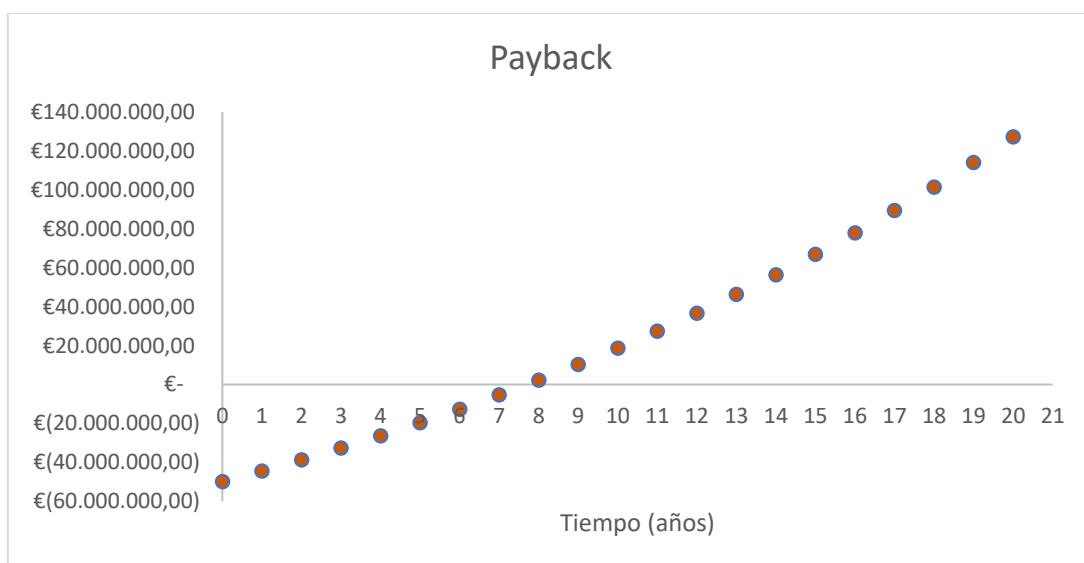


Figura 1: Representación del Payback o tiempo de retorno. Fuente: [Elaboración propia]

Teniendo en cuenta los datos del gráfico de la *Figura 1*, que representan el retorno de la inversión con el tiempo, y de los datos de los flujos de caja año a año se determina el tiempo de retorno, mostrado en la *Tabla 21*.

Tabla 21: Tiempo de retorno o Payback. Fuente: [Elaboración propia]

Payback	Aproximadamente 8 años
----------------	-----------------------------------

10. Conclusiones sobre la viabilidad económica

Una vez analizados los 3 principales indicadores de viabilidad económica se observa que:

- El **Valor Actual Neto (VAN)** es mayor de cero, siendo el valor real de **34.743.319,98 €**, por lo que el proyecto se considera aceptable y dispuesto para la evaluación con el resto de indicadores.
- La **Tasa Interna de Retorno (TIR)** es superior a la tasa de descuento, logrando alcanzar un valor de **13,6%**, por lo que el proyecto se considera rentable.
- El **tiempo de retorno o Payback** de la inversión se sitúa **próximo a los 8 años**.

Por tanto, puede concluirse que la planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft recogida en este proyecto es económicamente VIABLE Y RENTABLE.

11. Análisis de sensibilidad

Finalmente, tras concluir la viabilidad económica de la planta, se debe realizar un análisis del comportamiento de los marcadores económicos ante distintas perturbaciones que puedan afectar a dicha planta.

Existen numerosos parámetros a variar con los que evaluar la evolución de los marcadores económicos. Sin embargo, teniendo en cuenta las cantidades anuales empleadas de materias primas y otros compuestos, cobra sentido realizar dichas perturbaciones sobre el precio de dichos compuestos. Concretamente, el caso de la lignina Kraft tiene especial interés ya que, en el momento de la realización del presente análisis de viabilidad económica, el principal proveedor de esta materia prima *ENCE Pontevedra*, se encuentra sumido en litigios legales debido a la prórroga en su concesión para permanecer en la provincia de Pontevedra. Este hecho ha sido elevado al Tribunal Supremo de España a la espera de que se dictamine una sentencia a favor o en contra de la legalidad de la prórroga que le permitiría seguir operando hasta el año 2073. Su cierre podría provocar que los costes de adquisición de la materia prima aumentasen. [12]

El análisis consistirá en variar un $\pm 10\%$ el coste de adquisición de la lignina Kraft, así como de la disolución de etanol, hidróxido sódico y amoníaco, mostrado en la *Tabla 22*.

Tabla 22: Variación en el precio de los principales compuestos. Fuente: [Elaboración propia]

	VAN	TIR	Payback
+10 %	-9.363.085,57	4,9%	14 años
-10 %	78.855.633,85	20,9%	5 años

Puede observarse como la variación de un 10 % en el coste de los principales compuestos empleados en el proceso tiene un importante efecto en cuanto a la rentabilidad del proyecto. En el primer caso, el aumentar un 10% el coste de todos estos compuestos provoca que los principales marcadores económicos muestren que el proceso no es aceptable ($VAN < 0$) ni rentable (TIR 4,9%). Sin embargo, la disminución de un 10% en el coste de estos no solo conlleva a que el proyecto sea viable, sino que su rentabilidad es elevada. Queda, por tanto, demostrada la importancia que tiene el precio de los compuestos en el proceso.

Este primer análisis debe contextualizarse en el momento actual a nivel socioeconómico, en el que la guerra de Ucrania y diversas tensiones internacionales han creado un clima de incertidumbre que ha provocado un gran aumento de la inflación y, con ello, el coste de los compuestos. Esto conduce al segundo análisis al que someterá el proceso, en el cual se analizarán la evolución de los marcadores económicos con la variación en dos puntos porcentuales de la tasa de inflación.

Tabla 23: Variación de la tasa de inflación. Fuente: [Elaboración propia]

	VAN	TIR	Payback
+2 %	52.082.718,55	15,7 %	7 años
-2 %	20.783.348,50	11,5 %	9 años

Como se puede observar en la *Tabla 23*, la variación en la inflación no tiene un efecto sumamente grave, siendo el proyecto rentable en ambos casos.

Por último, se realizará una variación en el coste del producto, vainillina, en un 5%.

Tabla 24: Variación en el coste de la vainillina. Fuente:[Elaboración propia]

	VAN	TIR	Payback
+5 %	65.269.091,30	18,7%	5 años
-5 %	4.217.548,65	7,9%	11 años

Puede observarse una fuerte variación en los marcadores económicos en relación al precio de venta de la vainillina, pero en todo caso el proyecto es rentable.

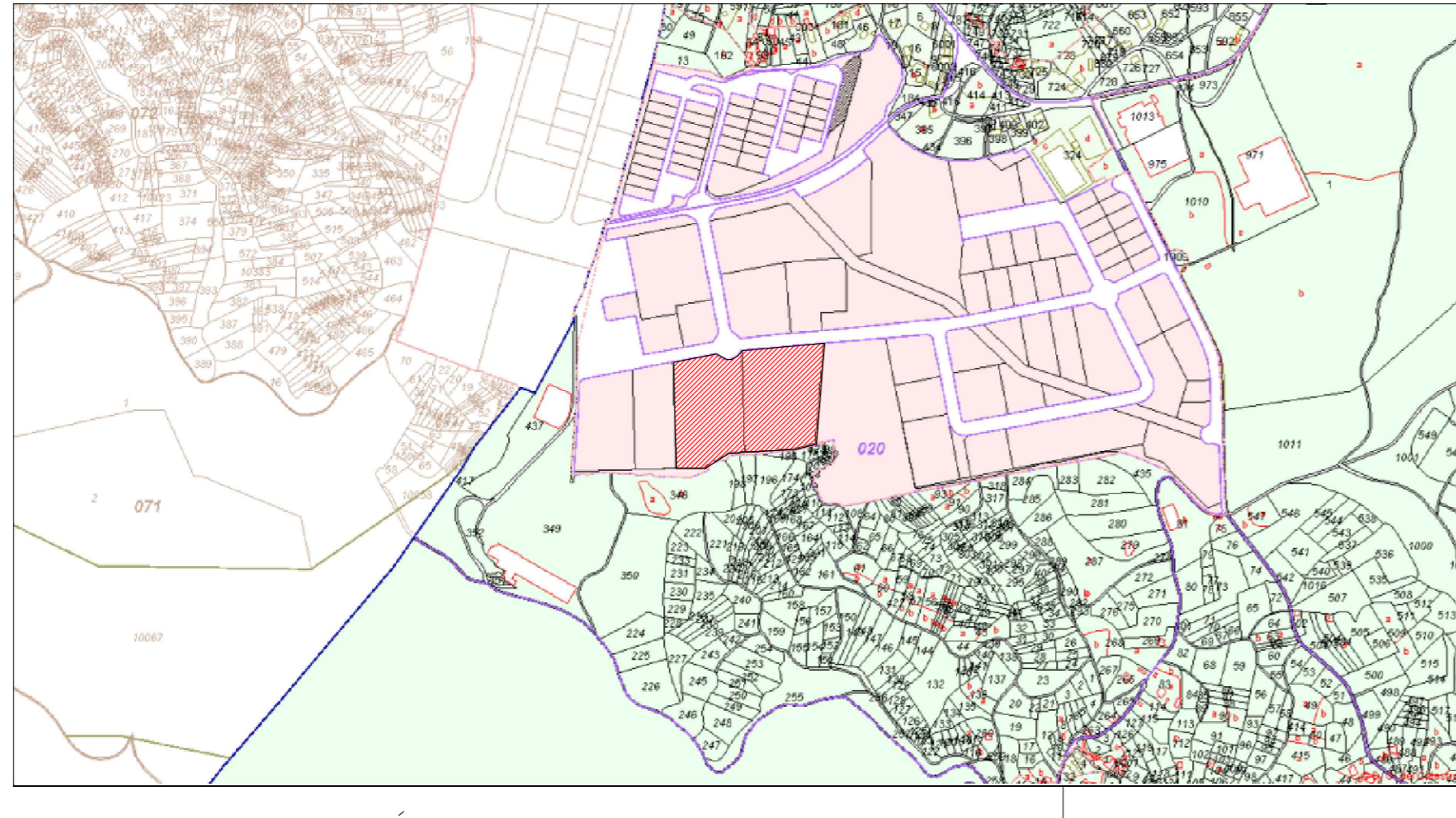
12. Bibliografía

- [1]. S.L, N. Amortización por cuotas constantes, sistema francés - Formulario económico financiero. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.areadepymes.com/?tit=amortizacion-por-cuotas-constantes-sistema-frances-formulario-economico-financiero&name=Manuales&fid=ee0bcac>>.
- [2]. ARIAS, E.R. Sistema de amortización francés. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://economipedia.com/definiciones/sistema-de-amortizacion-frances.html>>.
- [3]. SINNOT, Ray; and TOWLER, Gavin. *Diseño En Ingeniería Química*. Quinta ed. Barcelona: Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
- [4]. Liquid Caustic Soda Lye 50%. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://camachem.com/en/liquid-caustic-soda-lye-50-sodium-hydroxide-lye-50.html>>.
- [5]. Factory Price Ethanol High Quality 96%. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://qiaotuchem.en.made-in-china.com/product/kwFaMgJcgGTz/China-Factory-Price-Ethanol-High-Quality-70-75-95-96-99-6-99-9-.html>>.
- [6]. ALERTS, I. Ammonium Hydroxide Prices - Historical & Forecast Data in Several Countries. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.intratec.us/chemical-markets/ammonium-hydroxide-price>>.
- [7]. Data and Price of sepabeads: SP700. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.zauba.com/import-sepabeads-hs-code.html>>.
- [8]. BAILIE, R.C., BHATTACHARYYA, D., SHAEIWITZ, J.A., TURTON, R. y WHITING, W.B., 2012. Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes, Fourth Edition. S.l.: Pearson. ISBN 13: 978-0-13-261812-0.
- [9]. PAULA, C., DE OLIVEIRA, R., PINTO, ALÍRIO, E. y RODRIGUES, 2017. Fractionation and Purification of Syringaldehyde and Vanillin from Oxidation of Lignin Maria Inês Ferreira da Mota. 1 marzo 2017. S.l.: s.n.
- [10]. S.L, N. Amortización de inmovilizado. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.plangeneralcontable.com/?tit=amortizacion-de-inmovilizado&name=Manuales&fid=el0adaa>>.
- [11]. Van y TIR: Concepto, diferencias y cómo calcularlos. 2021. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://economia3.com/van-tir-concepto-diferencias-como-calcularlos/>>.
- [12]. La Xunta, gobierno con menos conflictividad frente al Estado. 2023. 22 enero 2023. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.atlantico.net/articulo/galicia/xunta-gobierno-menos-conflictividad-frente-estado/20230122023424963961.html>>.

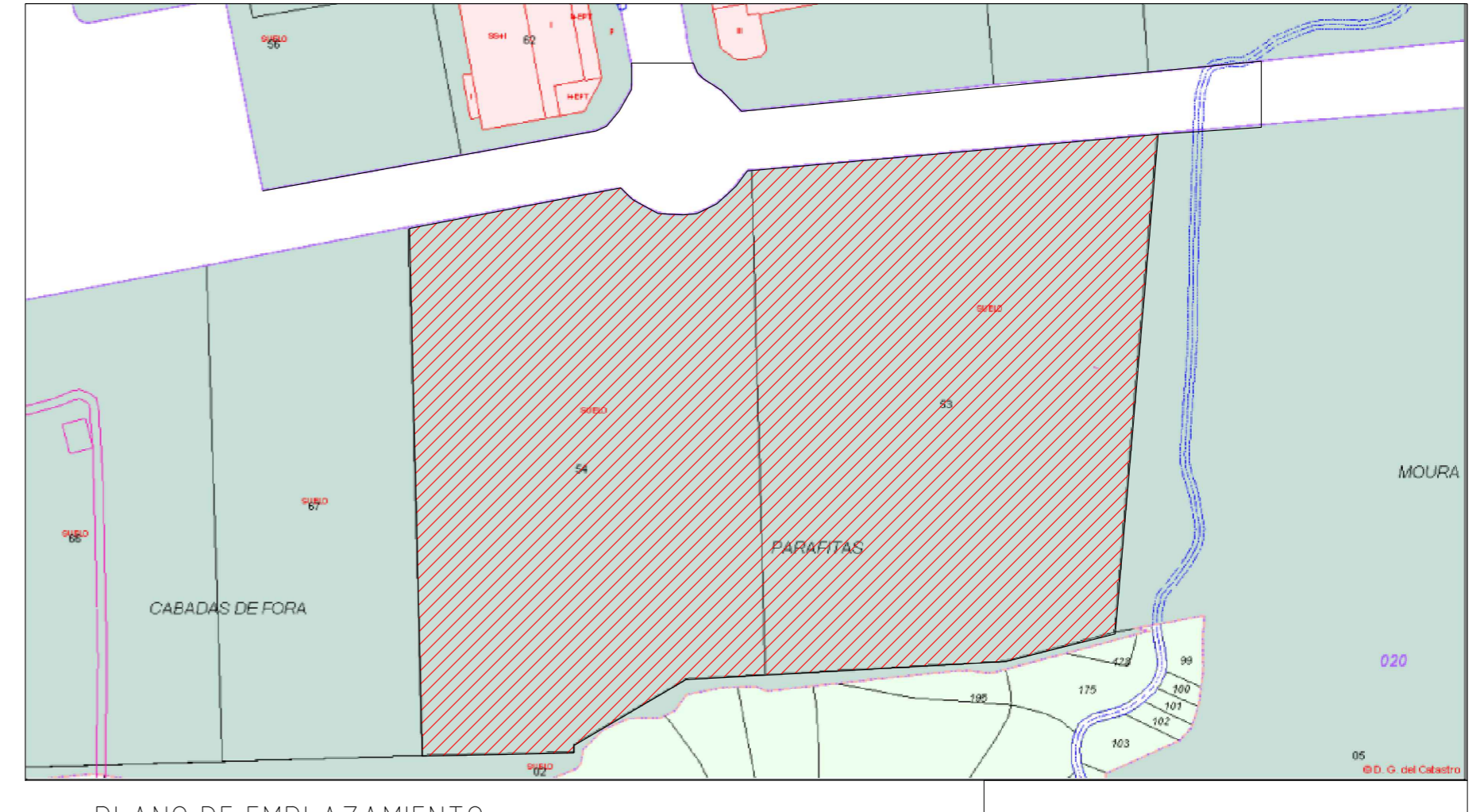
DOCUMENTO II.
PLANOS

ÍNDICE

- 1- Plano de situación y emplazamiento
- 2- Plano de implantación
- 3- Diagrama de flujo del proceso, PFD. Hoja 1
- 4- Diagrama de flujo del proceso, PFD. Hoja 2
- 5- Diagrama de Instrumentación y Control, P&ID. Hoja 1
- 6- Diagrama de Instrumentación y Control, P&ID. Hoja 2
- 7- Plano de equipo: Reactor R-101
- 8- Plano de equipo: Columna de adsorción T-201/T-202






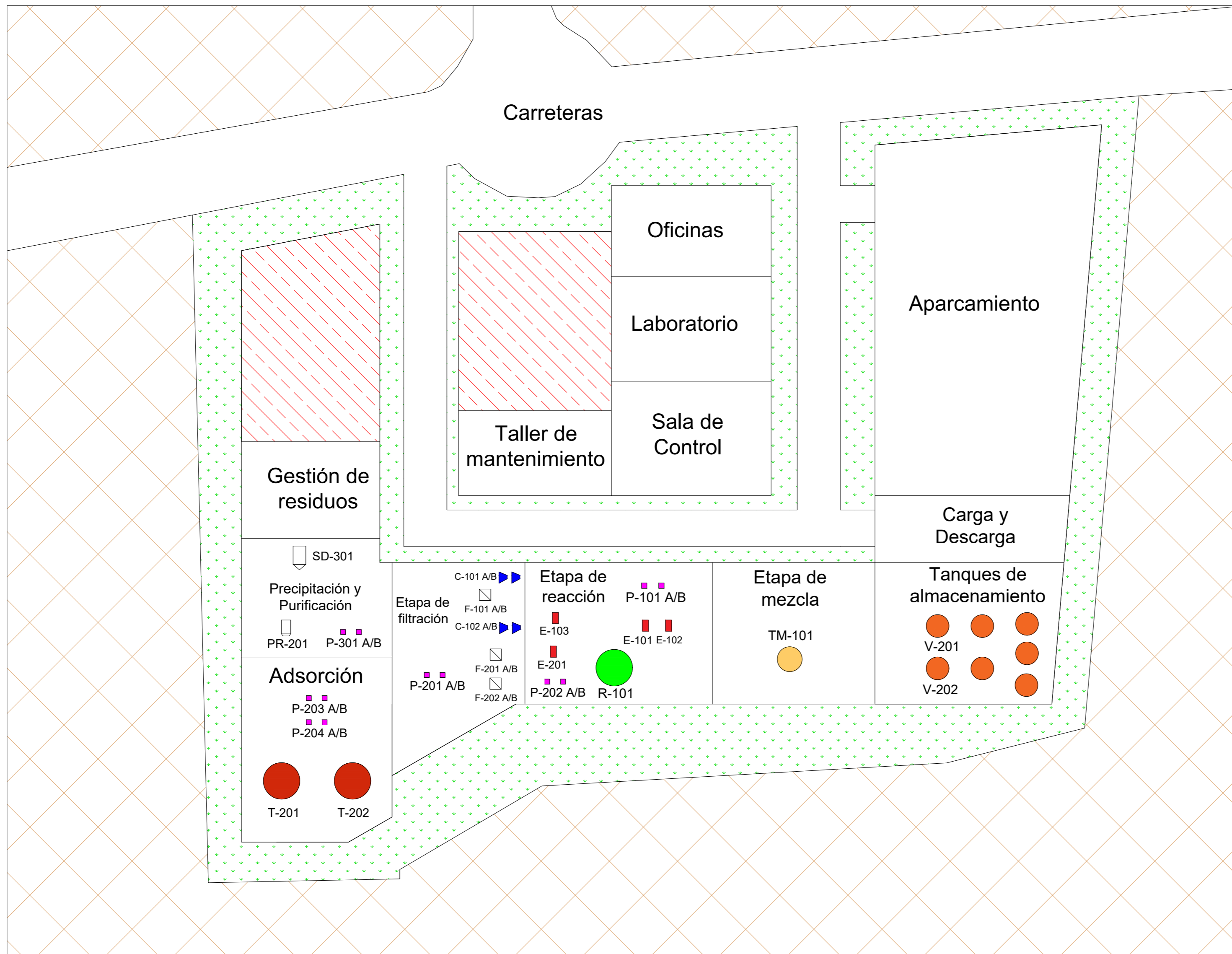
PLANO DE SITUACIÓN
E: 1/20000



PLANO DE EMPLAZAMIENTO
E: 1/2000

Parcela: P-07 & P-08
Polígono: A Reigosa
Municipio: Ponte Caldelas
Provincia: Pontevedra

		FECHA	NOMBRES	FIRMA	GRADO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
Dibujado	26/11/2022	Martín Calvo Doce Carlos Iglesias García			
Comprobado	10/01/2023	Martín Calvo Doce Carlos Iglesias García			
ESCALA 1/20000, 1/2000	Nº PLANO 1/8	PLANOS DE SITUACIÓN Y EMPLAZAMIENTO Planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft			

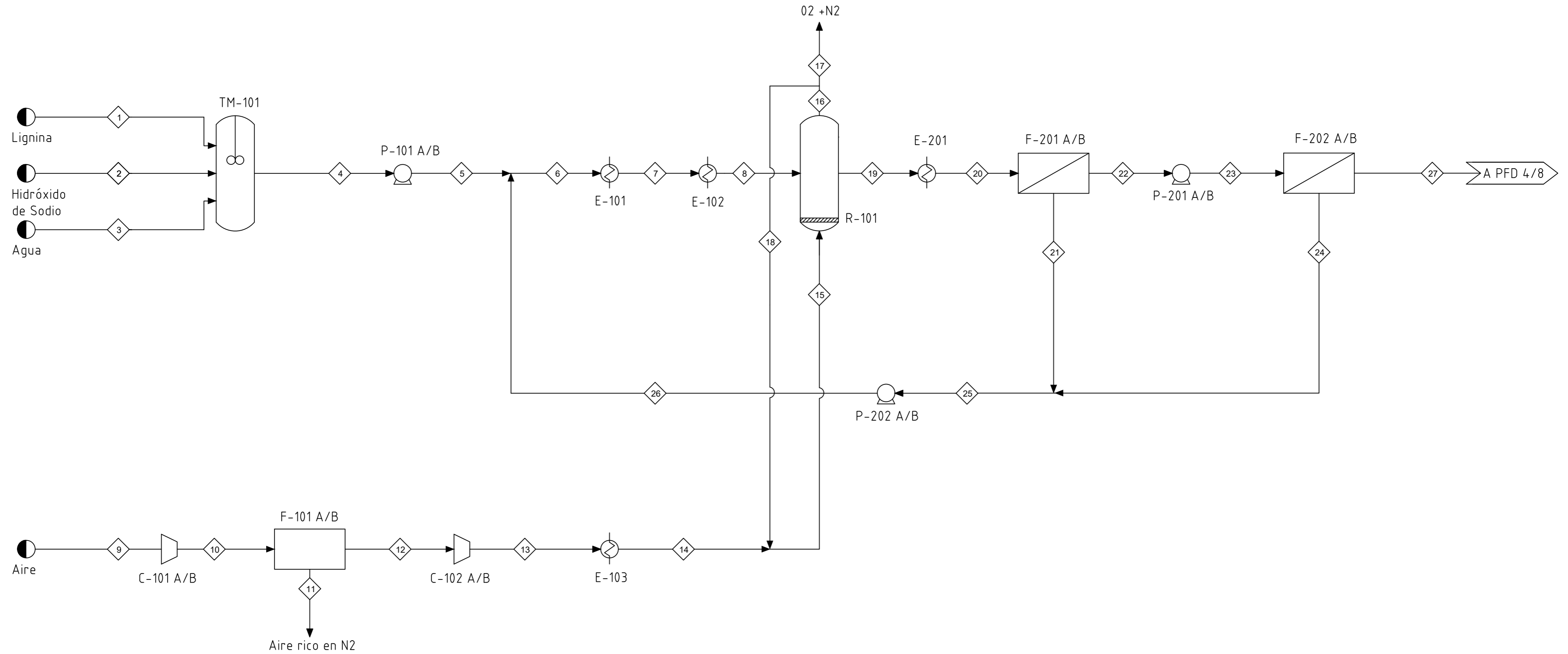


LEYENDA	
	Zonas Verdes
	Otras Parcelas
	Posibles Ampliaciones

		FECHA	NOMBRES	FIRMA	GRADO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
	Dibujado	26/11/2022	Martín Calvo Doce Carlos Iglesias García		
	Comprobado	10/01/2023	Martín Calvo Doce Carlos Iglesias García		
	ESCALA	Nº PLANO	PLANO DE IMPLEMENTACIÓN		
1/1000	2/8	Planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft			

TM-101 Tanque de mezcla P-101 A/B Bomba E-101 Int. de calor E-102 Int. de calor E-103 Int. de calor F-101 A/B Filtro C-101 A/B Compresor C-102 A/B Compresor multietapa R-101 Reactor E-201 Int. de calor F-201 A/B Filtro P-201 A/B Bomba F-202 A/B Filtro P-202 A/B Bomba

UTILIDADES
 Medium pressure steam
 Cooling water
 DowTherm
 Chilled water

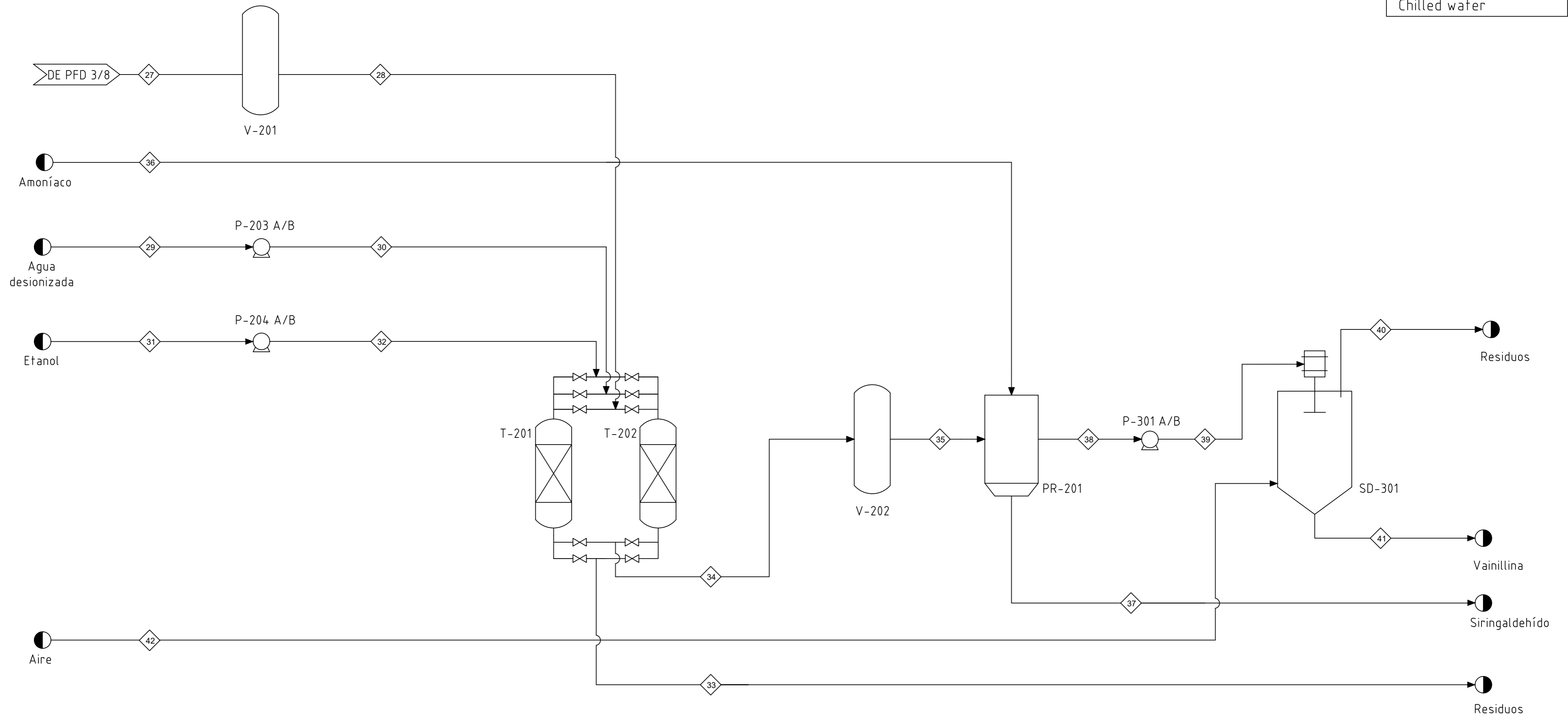


Corriente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27
Temperatura (°C)	25,00	25,00	25,00	25,00	25,00	25,00	115,42	160,00	25,00	133,55	60,48	60,48	239,06	160,00	160,00	160,00	160,00	160,00	160,00	25,00	25,00	25,00	25,00	25,00	25,00	25,00	25,00
Presión (bar)	1,01	1,01	1,01	1,01	10	10	10	10	1,01	3	1,5	1,5	10	10	10	10	10	10	10	10	2,4	2,4	30	2,4	2,4	10	2,4
Fracción de vapor	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Flujo molar total (kmol/h)	0,67	122,27	966,36	1089,3	1089,3	1936,21	1936,21	1936,21	226,66	226,66	180,19	46,47	46,47	46,47	94,39	92,21	44,29	47,92	1945,16	1945,16	484,03	1461,13	1461,13	362,88	846,91	846,91	1098,25
Flujo másico total (kg/h)	1557,24	3037,60	17409,27	22004,12	22004,12	38375,07	38375,07	38375,07	6538,52	6538,52	5142,12	1396,41	1396,41	1396,41	2831,92	2762,20	1326,69	1435,52	38444,80	38444,80	9544,72	28900,08	28900,08	6826,24	16370,96	16370,96	22073,84
Lignina (kg/h)	1557,24	0,00	0,00	1557,24	1557,24	2025,07	2025,07	2025,07	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	471,37	471,37	457,22	14,14	14,14	10,61	467,83	467,83	3,54
NaOH (kg/h)	0,00	1518,80	0,00	1518,80	1518,80	2700,09	2700,09	2700,09	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2700,09	2700,09	675,02	2025,07	2025,07	506,27	1181,29	1181,29	1518,80
O ₂ (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1523,01	1523,01	761,51	761,51	761,51	761,51	1510,04	1440,32	691,79	748,54	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
N ₂ (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	5015,51	5015,51	4380,61	634,90	634,90	634,90	1321,88	1321,88	634,90	686,98	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
H ₂ O (kg/h)	0,00	1518,80	17409,27	18928,08	18928,08	33649,91	33649,91	33649,91	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	33649,91	33649,91	8412,48	25237,44	25237,44	6309,36	14721,84	14721,84	18928,08
Vainillina (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	119,81	119,81	0,00	119,81	119,81	0,00	0,00	0,00	119,81
Siringaldehído (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	25,51	25,51	0,00	25,51	25,51	0,00	0,00	0,00	25,51
Ácido Vainillínico (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	59,76	59,76	0,00	59,76	59,76	0,00	0,00	0,00	59,76
Compuestos X (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1418,35	1418,35	0,00	1418,35	1418,35	0,00	0,00	0,00	1418,35
Etanol (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
H ₂ O desionizada (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Amoniaco (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

FECHA	NOMBRES	FIRMAS	GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
Dibujado	Martín Calvo Doce Carlos Iglesias García		
Comprobado	Martín Calvo Doce Carlos Iglesias García		
ESCALA	Nº PLANO	DIAGRAMA DE FLUJO	
S/E	3/8	Planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft	

T-101/T-102
 V-201 Tanque P-203 A/B Bomba P-204 A/B Bomba Columna Adsorción V-202 Tanque PR-201 Precipitador P-301 A/B Bomba SD-301 Spray dryer

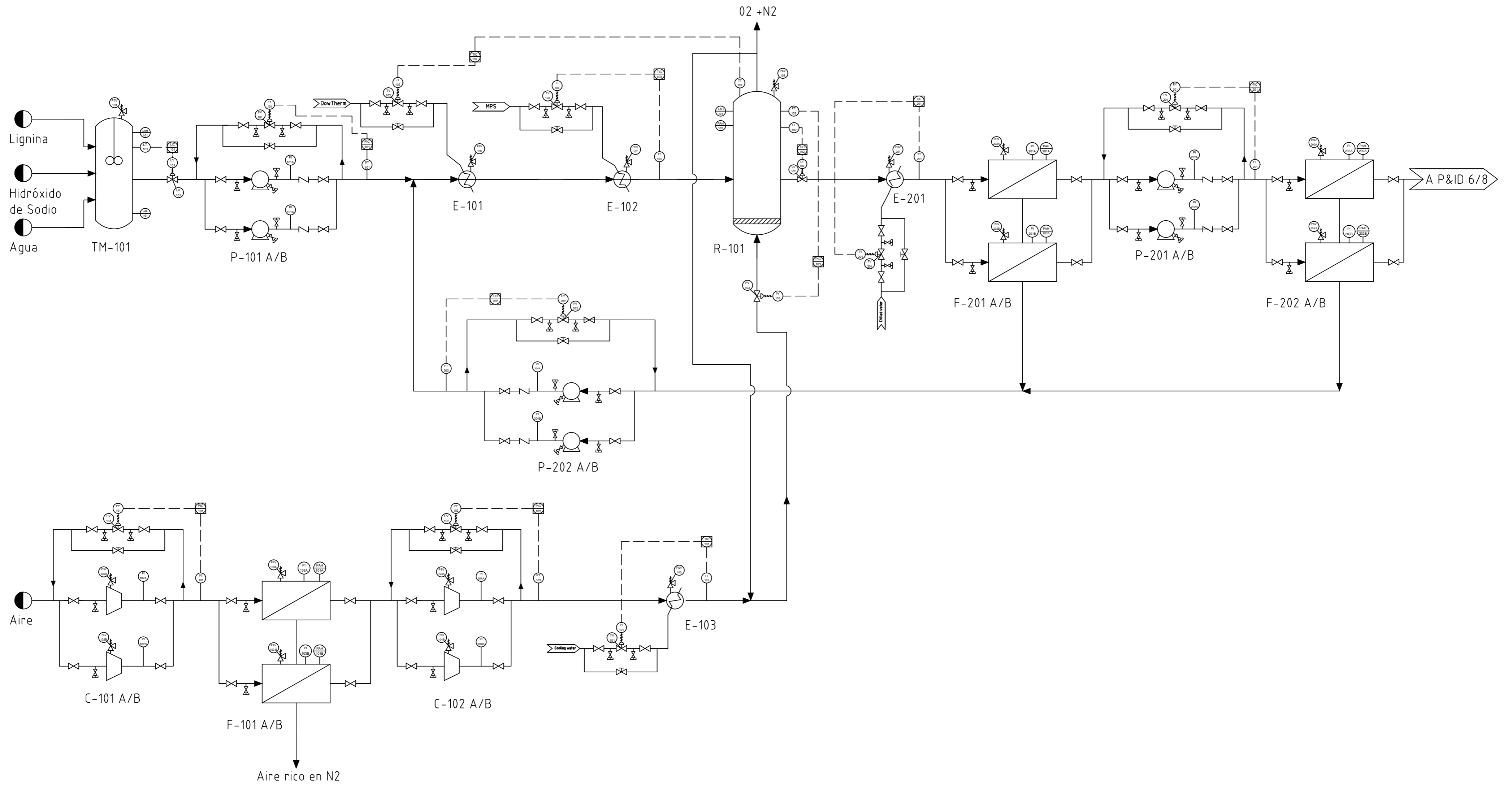
UTILIDADES
Medium pressure steam
Cooling water
DowTherm
Chilled water



Corriente	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42
Temperatura (°C)	25,00	25,00	25,00	25,00	25,00	25,22	25,00	25,00	25,00	25,00	25,00	25,00	100,00	25,00	25
Presión (bar)	2,4	1,01	2,4	1,01	2,4	1,45	1,45	1,45	1,01	1,01	1,01	1,03	1,01	1,01	1,01
Fracción de vapor	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1
Flujo molar total (kmol/h)	1098,25	1195,01	1195,01	403,37	403,37	1500,77	1195,86	1195,86	95,2	0,12	1290,97	1290,97	1741,73	0,44	451,2
Flujo másico total (kg/h)	22073,84	21534,12	21534,12	17241,81	17241,81	39182,83	21666,93	21666,93	1702,41	21,32	23348,03	23348,03	36302,3	63,13	13017,4
Lignina (kg/h)	3,54	0,00	0,00	0,00	0,00	3,54	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0
NaOH (kg/h)	1518,80	0,00	0,00	0,00	0,00	1518,80	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0
O ₂ (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3032,10	0,00	3032,1
N ₂ (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	9985,30	0,00	9985,30
H ₂ O (kg/h)	18928,08	0,00	0,00	861,36	861,36	19789,43	0,00	0,00	1475,92	0,00	1475,92	1475,92	1475,92	0,00	0
Vainillina (kg/h)	119,81	0,00	0,00	0,00	0,00	10,30	109,50	109,50	0,00	0,34	109,16	109,16	46,97	62,2	0
Siringaldehído (kg/h)	25,51	0,00	0,00	0,00	0,00	2,20	23,31	23,31	0,00	20,98	2,33	2,33	1,87	0,47	0
Ácido Vainillínico (kg/h)	59,76	0,00	0,00	0,00	0,00	59,76	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0
Compuestos X (kg/h)	1418,35	0,00	0,00	0,00	0,00	1418,35	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0
Etanol (kg/h)	0,00	0,00	0,00	16380,45	16380,45	16380,45	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0
H ₂ O desionizada (kg/h)	0,00	21534,12	21534,12	0,00	0,00	0,00	21534,12	21534,12	0,00	0,00	21534,12	21534,12	21533,7	0,47	0
Amoníaco (kg/h)	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	226,49	0,00	226,49	226,49	226,49	0,00	0

FECHA	NOMBRES	FIRMAS	GRADO EN ENSEÑANÍA QUÍMICA ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENSEÑANÍA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
Dibujado	Marín Calvo Doce Carlos Iglesias García		
Comprobado	03/01/2023 Marín Calvo Doce Carlos Iglesias García		
ESCALA	Nº PLANO	DIAGRAMA DE FLUJO Planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft	
S/E	4/8		

TM-101 Tanque de mezcla P-101 A/B Bomba E-101 Int. de calor E-102 Int. de calor E-103 Int. de calor F-101 A/B Filtro C-101 A/B Compresor C-102 A/B Compresor multietapa R-101 Reactor E-201 Int. de calor F-201 A/B Filtro P-201 A/B Bomba F-202 A/B Filtro P-202 A/B Bomba



	X: Primera Letra	Y: Letras sucesivas
	1: Sección	2: Número de lazo
Primera posición	Letras sucesivas	
A: Composición	A: Alarma	
F: Flujo	C: Controlador	
L: Nivel	H: Alto	
P: Presión	L: Bajo	
T: Temperatura	I: Indicador	
	T: Transmisor	
	V: Válvula	

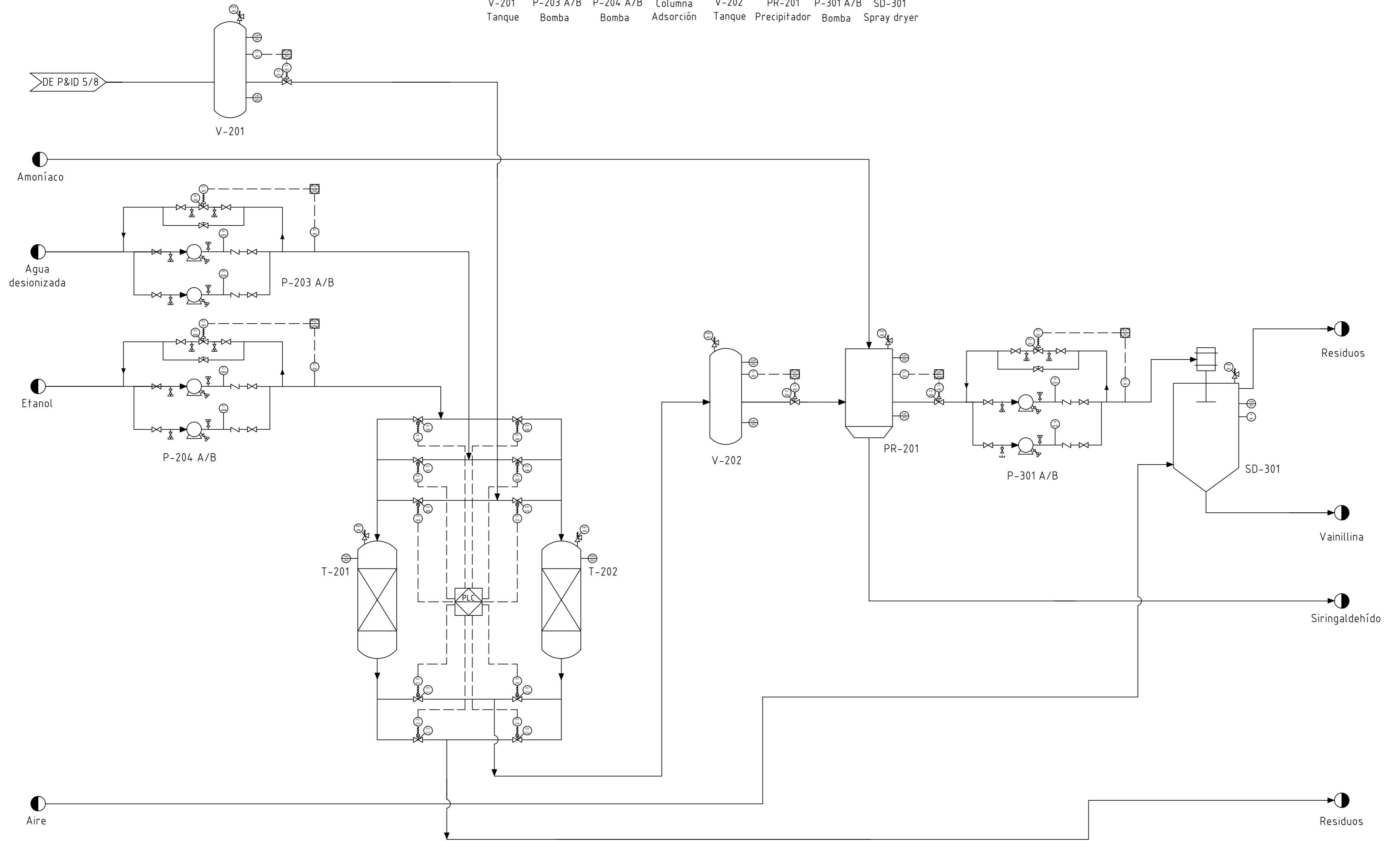
INSTRUMENTOS	
Montaje en planta	Montaje en sala de control
PLC con montaje en cuadro	Función de controlador

VÁLVULAS	
	Válvula de control
	Válvula manual
	Válvula antirretorno
	Válvula de venteo/drenaje
	Válvula sin especificar
	Válvula de alivio
	Válvula de todo o nada

LÍNEAS	
	Línea de proceso
	Señal eléctrica
	Señal neumática

	FECHA	NOMBRES	FIRMAS	GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
Dibujado	17/12/2022	Martín Calvo Doce Carlos Iglesias García		
Comprobado	03/01/2023	Martín Calvo Doce Carlos Iglesias García		
ESCALA S/E	Nº PLANO 5/8	DIAGRAMA P&ID Planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft		

T-101/T-102
 V-201 Tanque P-203 A/B Bomba P-204 A/B Bomba Columna Adsorción V-202 Tanque PR-201 Precipitador P-301 A/B Bomba SD-301 Spray dryer



	X: Primera Letra	Y: Letras sucesivas
	1: Sección	2: Número de lazo
Primera posición	Letras sucesivas	
A: Composición	A: Alarma	
F: Flujo	C: Controlador	
L: Nivel	H: Alto	
P: Presión	L: Bajo	
T: Temperatura	I: Indicador	
-	T: Transmisor	
-	V: Válvula	

INSTRUMENTOS	
Montaje en planta	Montaje en sala de control
PLC con montaje en cuadro	Función de controlador

VÁLVULAS	
	Válvula de control
	Válvula manual
	Válvula antirretorno
	Válvula de venteo/drenaje
	Válvula sin especificar
	Válvula de alivio
	Válvula de todo o nada

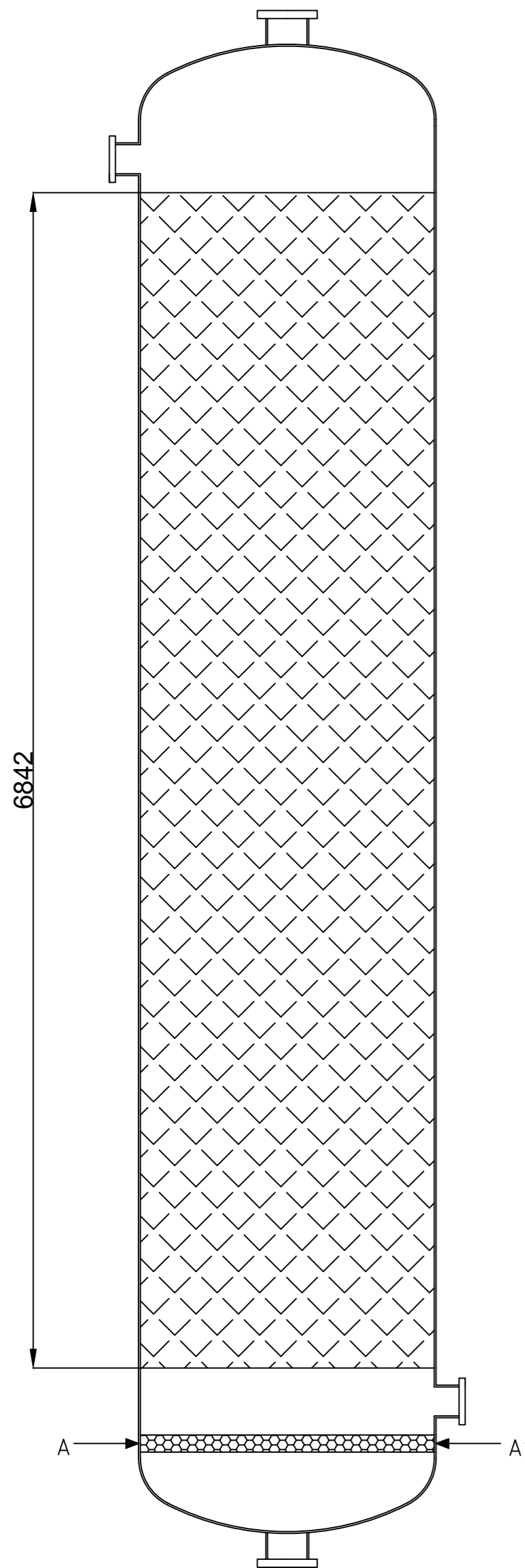
LÍNEAS	
	Línea de proceso
	Señal eléctrica
	Señal neumática

FECHA		NOMBRES		FIRMAS	
Dibujado	17/12/2022	Martín Calvo Doce	Carlos Iglesias García		
Comprobado	03/01/2023	Martín Calvo Doce	Carlos Iglesias García		
ESCALA	Nº PLANO	DIAGRAMA P&ID			
S/E	6/8	Planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft			

GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA
 ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA
 UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

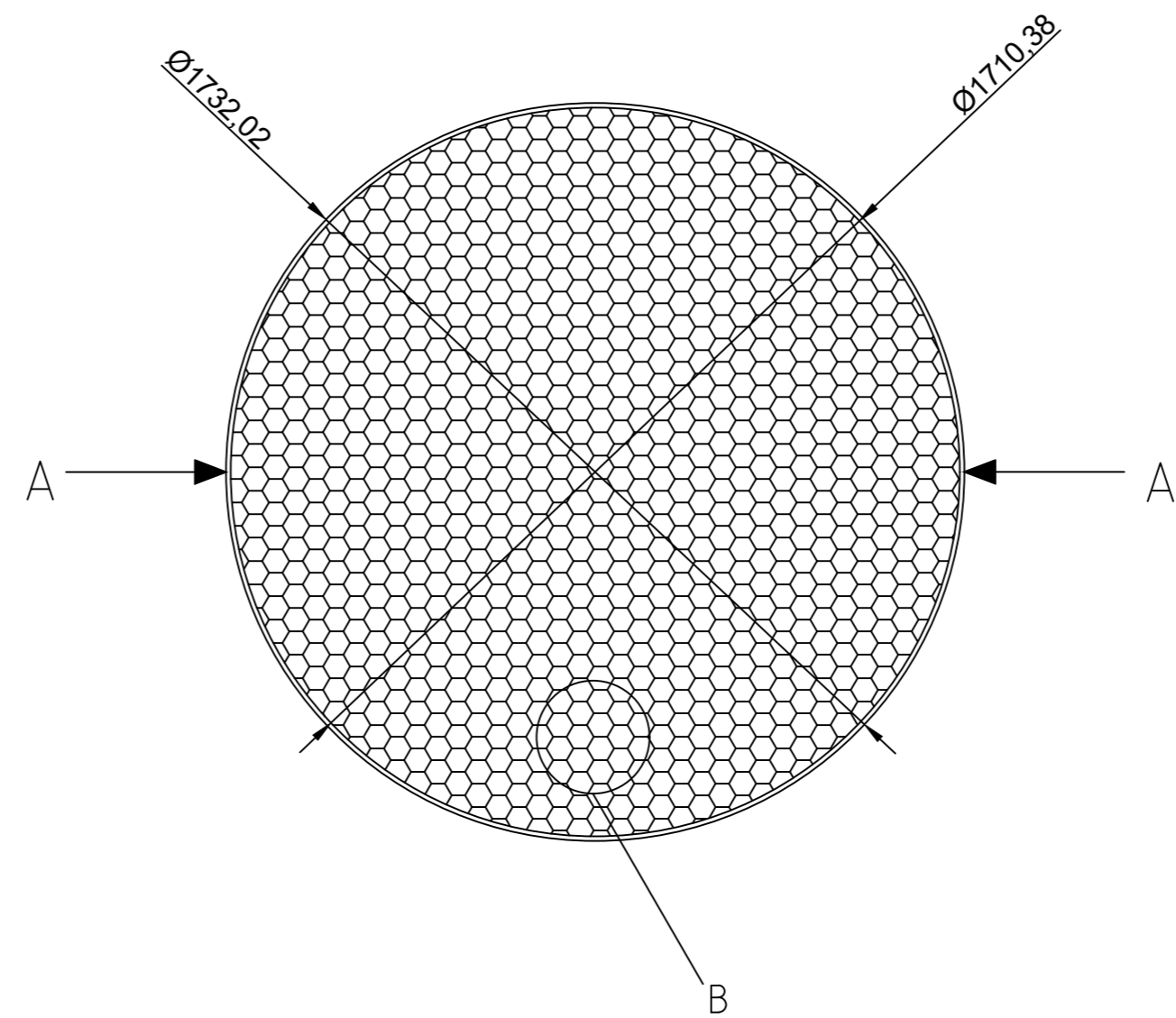
Reactor de burbujeo R-101

ESCALA 1:30



Detalle A: Sección del plato de burbujeo

ESCALA 1:16



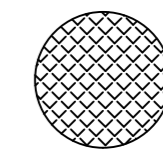
DATOS DEL EQUIPO

CÓDIGO DE DISEÑO: ASME BPV SEC. VIII

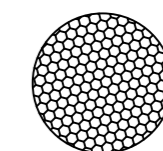
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN:
MONEL 400

SOPORTE DEL EQUIPO: TIPO
FALDA ACERO AL CARBONO

LEYENDA



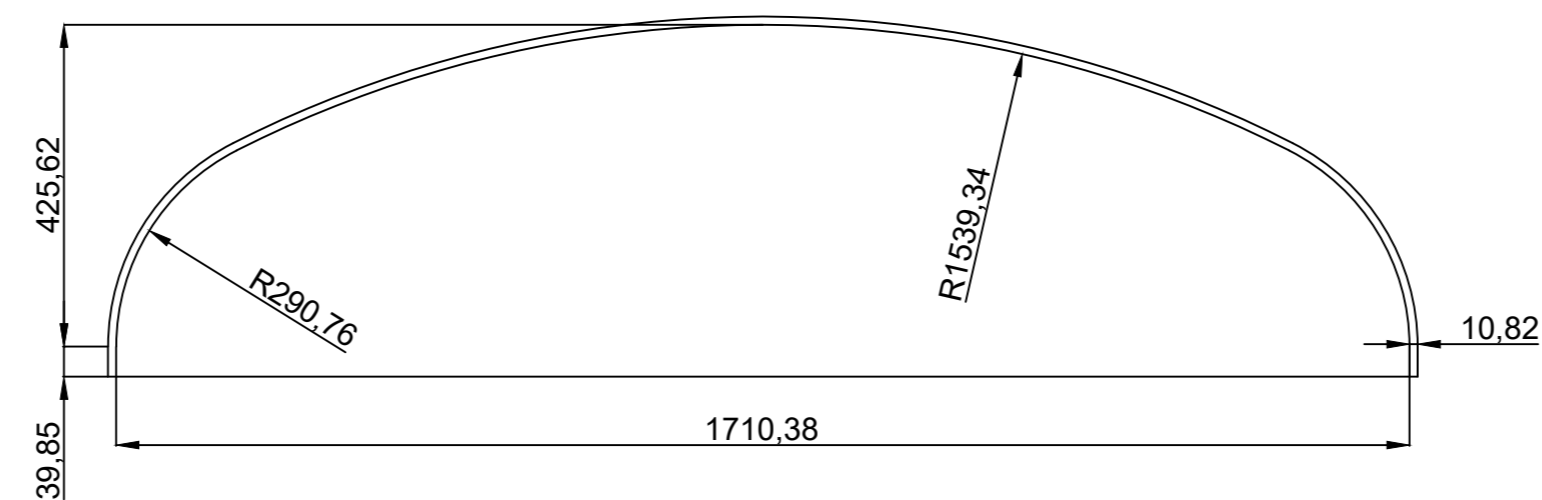
RELLENO DEL REACTOR



PLATO DE BURBUJEO

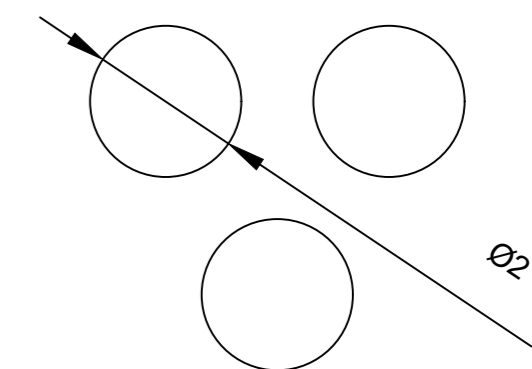
Cabezales del reactor

ESCALA 1:10



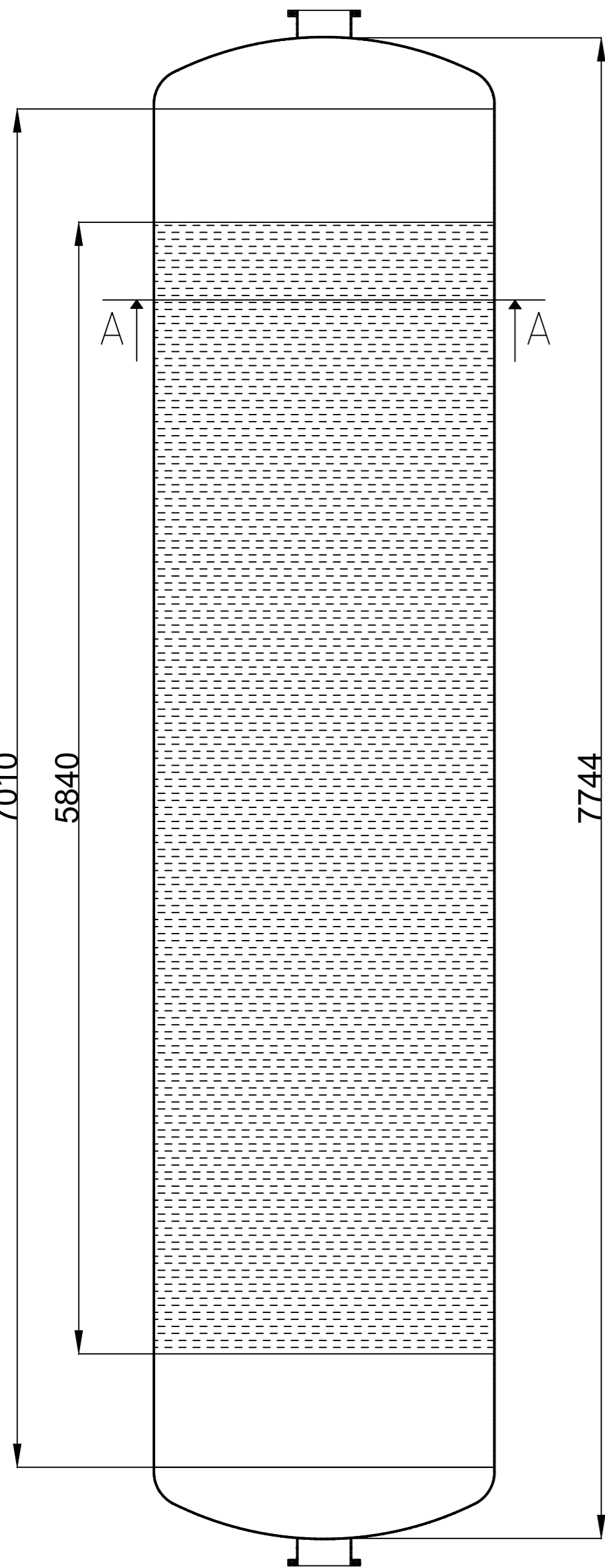
Detalle B: Poros del plato de Burbujeo

ESCALA 10:1

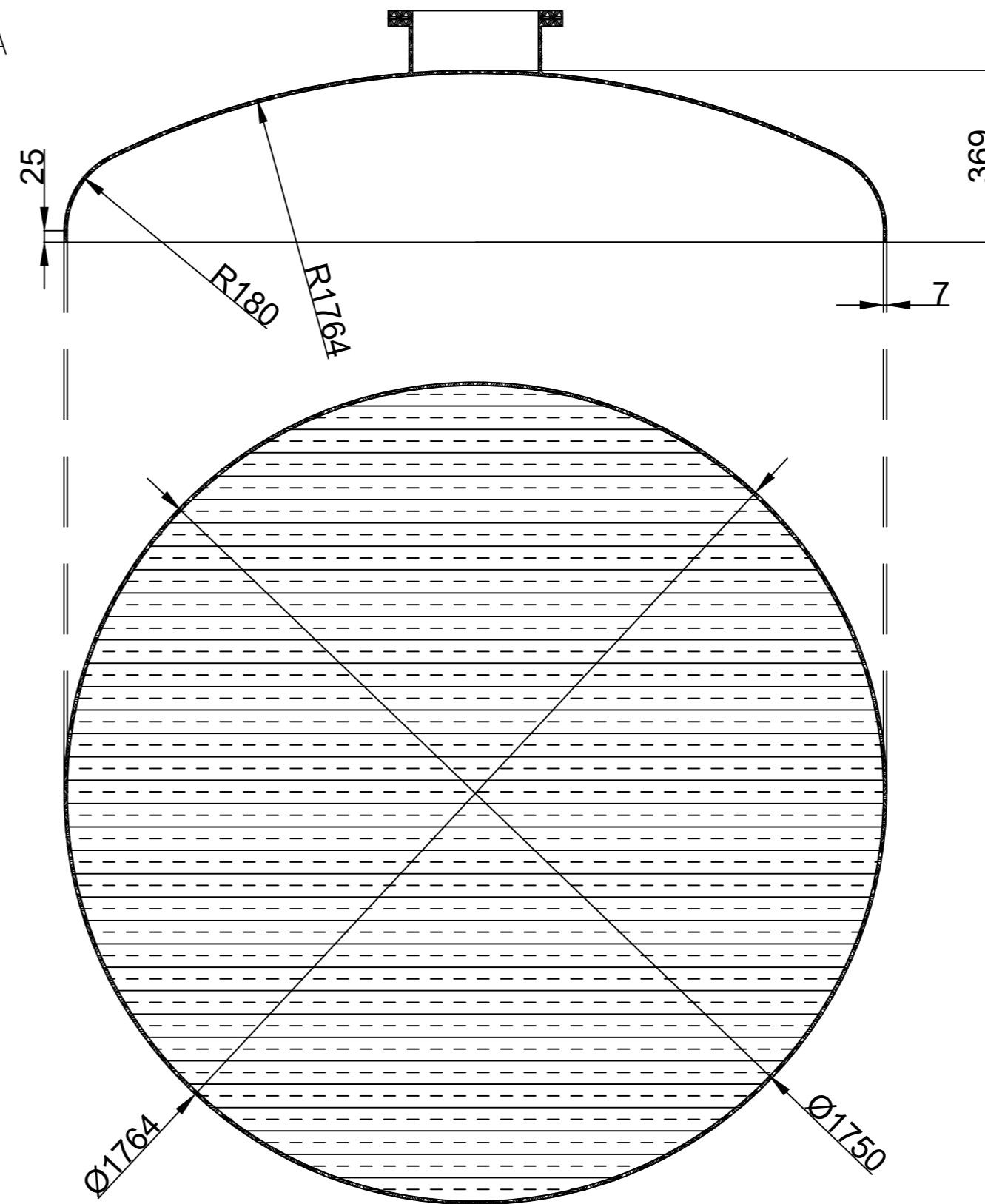


	FECHA	NOMBRE	FIRMA	GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA	
	Dibujado	08/01/2023	Martín Calvo Doce		
	Comprobado	10/01/2023			
Nº PLANO		DIAGRAMA DE FLUJO			
7/8		Planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft			

Escala
1:25



Detalle del corte A-A
Escala 1:12



DATOS DEL EQUIPO

CÓDIGO ASME BPV SEC.VIII DIV I

CARCASA Y CABEZALES
Material de construcción: MONEL 400

SOPORTE TIPO FALDA
Material de construcción: ACERO INOXIDABLE 304

PESO

Vacío: 173,55 kN Lleno: 248,13 kN

PARÁMETROS DE OPERACIÓN

Presión operación: 2,4 bar

Temperatura de operación: 25 °C

Caudal másico: 22.073,84 kg/h

Masa de adsorbente: 14.231,08 kg

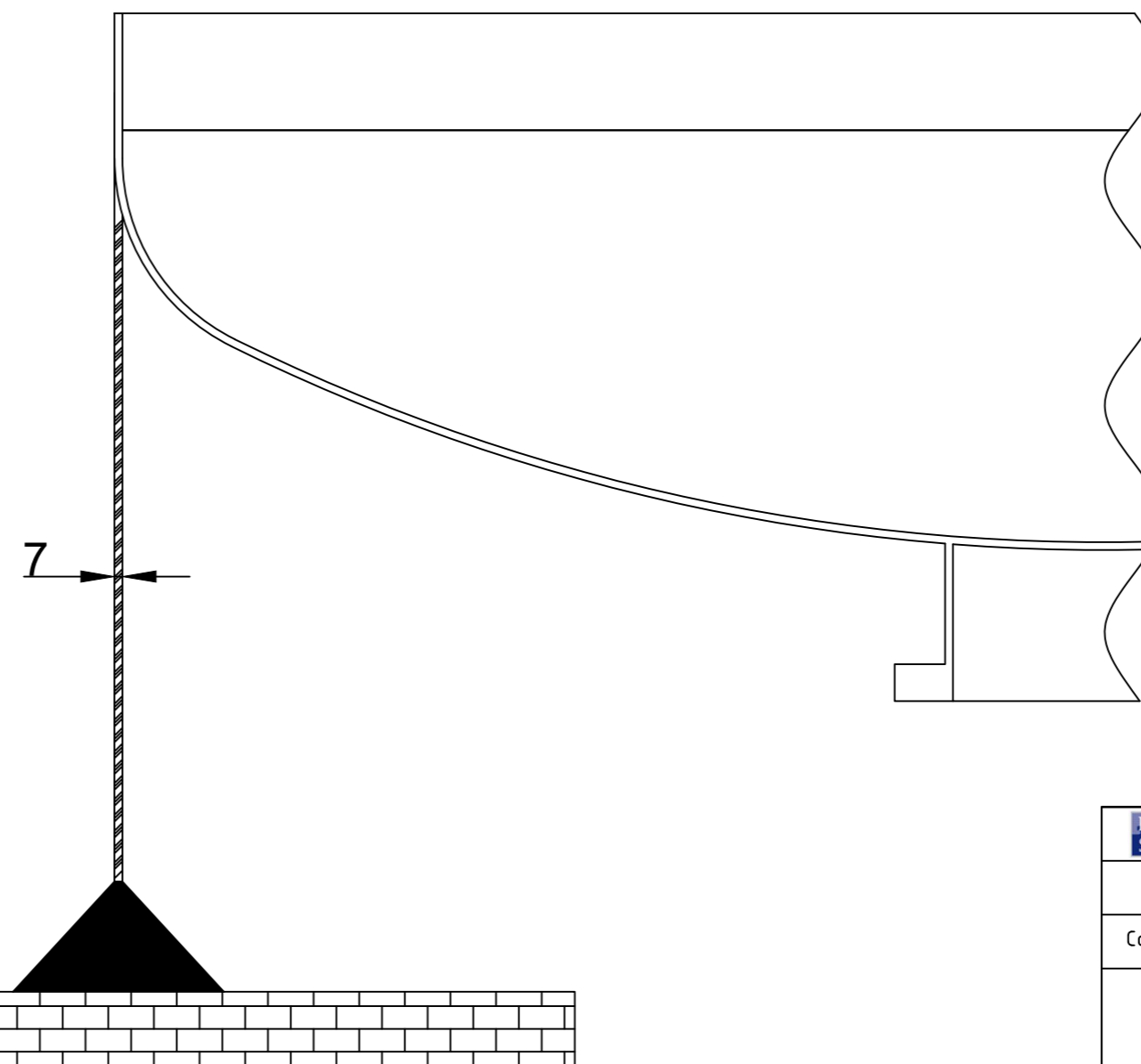
NOTAS

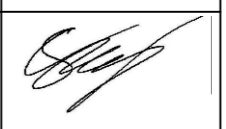
Medidas en milímetros, mm
Tipo de cabezal torisférico
No se consideran dimensiones de las conexiones

LEYENDA

 Resina SP700

Soporte tipo falda
Escala 1:6



	FECHA	NOMBRE	FIRMA	
Dibujado	03/01/2023	Carlos Iglesias García		GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
Comprobado	10/01/2023			
Nº PLANO	COLUMNA DE ADSORCIÓN T-201/T-202			
8/8	Planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft			

DOCUMENTO IV: ESTUDIOS CON ENTIDAD PROPIA*

** Los Estudios con Entidad Propia relativos al estudio de Seguridad y Salud se adjuntan en el archivo II de este proyecto.*

ÍNDICE

ESTUDIO DE IMPACTO AMBIENTAL	3
1. Introducción.....	3
2. Marco legislativo	3
3. Objeto y descripción del proyecto	3
4. Resumen de emisiones	5
5. Análisis ambiental del proceso	6
5.1. Justificación de la ubicación	6
5.2. Análisis medioambiental de las alternativas	6
6. Descripción del inventario ambiental e identificación de impactos	8
6.1. Medio físico	8
6.1.1. Clima	8
6.1.2. Hidrología.....	9
6.1.3. Geología	9
6.1.4. Calidad del aire.....	10
6.1.5. Paisaje.....	12
6.2. Medio biológico	12
6.2.1. Flora.....	12
6.2.2. Fauna	13
6.2.3. Red Natura 2000.....	13
6.3. Medio socioeconómico y cultural	14
6.3.1. Población y empleo	14
6.3.2. Uso del suelo	15
7. Identificación de impactos ambientales.....	15
8. Medidas para la mitigación de impactos	18
8.1. Medidas en la fase de construcción	18
8.2. Medidas en la fase de explotación	18
8.3. Medidas en la fase de desmantelamiento.....	20
9. Programa de Vigilancia Ambiental	20
10. Conclusiones	21
11. Bibliografía	22

ESTUDIO DE IMPACTO AMBIENTAL

1. Introducción

El presente documento compone el Estudio de Impacto Ambiental (EIA) de las instalaciones de producción de vainillina a partir de Lignina Kraft en el polígono industrial de A Reigosa, Ponte Caldelas, situado en la provincia de Pontevedra.

Este documento contiene la información necesaria para poder evaluar los efectos ocasionados sobre el medio ambiente tras la ejecución del proyecto. Permite la cuantificación e identificación de los mismos para así establecer medidas preventivas y correctoras oportunas.

2. Marco legislativo

Dada la ubicación de la planta, se sigue la normativa vigente en España, recogida fundamentalmente en la Ley 21/2013 de 9 de diciembre de Evaluación Ambiental. Se toman en cuenta las modificaciones establecidas por la Ley 9/2018, del 5 de diciembre con las que se transpone la Directiva 2014/54/UE del Parlamento Europeo y del Consejo.

Siguiendo la ley mencionada anteriormente, se implantan los fundamentos para realizar la evaluación ambiental del presente proyecto y se imponen las decisiones oportunas para un desarrollo sostenible del mismo.

En el Artículo I de dicha Ley, se “establecen las bases que deben regir la evaluación ambiental de los planes, programas y proyectos que puedan tener efectos significativos sobre el medio ambiente, garantizando en todo el territorio del Estado un elevado nivel de protección ambiental, con el fin de promover un desarrollo sostenible”.

El presente proyecto se encuentra sujeto al grupo 5 (Industria química, petroquímica, textil y papelera) destinado a instalaciones para la producción a escala industrial de sustancias mediante un proceso química o biológica debido al primer apartado correspondiente a “Productos químicos orgánicos”. Es por ello por lo que debe acreditar una evaluación ambiental ordinaria.

3. Objeto y descripción del proyecto

El objeto del presente proyecto es el diseño de una Planta de Producción de vainillina a partir de lignina Kraft. Cuenta con una producción de 500 t/año operando en régimen continuo durante 330 días al año durante 24 horas al día, para obtener una pureza de 98% de vainillina. El tiempo restante está destinado a tareas de mantenimiento y limpieza. Para el proceso de producción se selecciona la alternativa correspondiente a la oxidación de lignina Kraft en medio básico con separación por adsorción (pH>11,5).

La materia prima principal del proceso es la lignina tipo Kraft obtenida a partir de madera blanda. Esta debe ser acondicionada para la etapa de reacción hasta unos valores de presión absoluta y temperatura de 10 bar y 160°C, respectivamente. Además, para establecer las condiciones de medio básico necesarias para realizar el proceso, es necesaria la introducción de una corriente de hidróxido de sodio (NaOH) en disolución a las mismas condiciones de presión y temperatura que la materia prima.

El proceso de producción de vainillina cuenta con tres secciones explicadas brevemente a continuación:

- **Sección 100: Acondicionamiento de materias primas y reacción**

Inicialmente, entra en el proceso lignina Kraft, una solución de hidróxido sódico de y agua, a una temperatura de 25°C. Posteriormente se introducen dichas corrientes en el tanque de mezcla TM-101 para preparar la disolución de alimentación del reactor, que, tras juntarse con la corriente procedente de los equipos de ultra y nano filtración presentes en la Sección 200, se impulsa al mismo a partir de la bomba P-101 A/B. Después del acondicionamiento de la temperatura a 160°C, a través de los intercambiadores de calor E-101 y E-102, se introduce la corriente en el reactor R-101 con una concentración de 80 g/L y 60 g/L de NaOH y lignina, respectivamente, bajo unas condiciones de 10 bar y 160°C.

Para la reacción de despolimerización de lignina Kraft es necesaria la introducción de aire enriquecido al 50% de O₂ como oxidante. Este es purificado mediante un filtro de membranas, F-101 A/B y acondicionado a los parámetros de operación mediante un compresor multietapa y un intercambiador de calor a la salida del filtro.

- **Sección 200: Separación de productos de reacción**

Tras la salida del reactor R-101, se realiza la separación de los productos obtenidos. Para ello, es necesaria la adecuación previa de la temperatura (25°C) con la introducción de la corriente en el intercambiador de calor E-201. Una vez finalizado este paso, se alimenta la corriente en dos unidades de filtración F-201 A/B y F-202 A/B, de tal manera que se separa la lignina no depolimerizada, la cual será recirculada. Posteriormente, se realiza una separación por adsorción en la columna T-201 y paralelamente por desorción en la T-202, obteniendo una corriente de vainillina y de siringaldehído. Tras esta operación, se lleva a cabo la precipitación del siringaldehído de la corriente con vainillina en el precipitador PR-201, gracias a la adición de una disolución de NH₃ al 20%.

- **Sección 300: Purificación**

Una vez separada la vainillina del proceso de precipitación, se introduce la corriente en el spray dryer bajo condiciones de 1 bar y 25°C con el objetivo de purificar la vainillina hasta un 98%. Se obtienen dos corrientes finales; la corriente de residuos del spray dryer (corriente 40) y la corriente de producto, (corriente 41), formada por vainillina a la pureza establecida para el presente proyecto.

4. Resumen de emisiones

En el presente apartado se recogen las emisiones y efectos ambientales que genera la Planta de Producción de vainillina.

- Emisiones gaseosas. Tal y como se indica en bibliografía [19], los efluentes que contengan sustancias tóxicas o nocivas deben ser tratadas previa descarga a la atmósfera. En el presente proyecto, la corriente de purga del reactor R-101 y la corriente de desecho de la membrana F-101 A/B están formadas únicamente por nitrógeno y oxígeno. Ambas se consideran no tóxicas por lo que no debe ser tratadas antes de ser liberadas a la atmósfera.
- Efluentes líquidos. El proceso está formado por tres efluentes líquidos de salida. Estas son la corriente 33 de residuos de la operación de adsorción y la corriente 40 de residuo del spray dryer. Posteriormente se presentarán varias opciones, fuera del límite de batería del proyecto, para el tratamiento de dichas corrientes y posible revalorización y rehúso de los compuestos presentes en ellas. Se consideran efluentes líquidos las aguas residuales generadas en oficinas, servicios; agua derivada operaciones de limpieza y mantenimiento; las cuales deben de ser recogidas, canalizadas y correctamente tratadas.
- Residuos. La corriente de colas del filtro F-203 A/B contiene siringaldehído con un alto porcentaje de pureza, por lo que, gracias a las propiedades de este compuesto, puede ser revalorizado para su posterior comercialización. El estructurado del reactor forma parte de la estructura mecánica del mismo y no se sustituye anualmente. Debe ser considerados los residuos inertes derivados del periodo de construcción como pueden ser escombros, arena, vidrios, etc. También se incluyen residuos sólidos derivados de la actividad humana recogidos en contenedores de reciclaje.
- Ruidos. La contaminación acústica está enfocada al funcionamiento de compresores y bombas de la instalación. También se incluye el spray dryer como fuente de ruido. Durante la etapa de construcción de la planta se tienen en cuenta los ruidos derivados del transporte en vehículos pesados, equipos empleados en la propia construcción, etc. En referencia al ruido, se debe cumplir la Ley 37/2003 de 17 de noviembre, del Ruido en lo referente a la zonificación acústica, objetivos de calidad y emisiones acústicas.

5. Análisis ambiental del proceso

En este apartado se realiza una justificación de la ubicación elegida, además de un análisis de la alternativa seleccionada, de acuerdo con las especificaciones ambientales requeridas.

5.1. Justificación de la ubicación

La planta se ubica en el polígono de “A Reigosa”, Pontevedra. Cuenta con 52 parcelas industriales entre las cuales se han seleccionado dos de ellas (P-07 y P-08) para el presente proyecto, constituyendo un emplazamiento de 41.522,60 m².

Esta ubicación se encuentra apartado de los núcleos urbanos, de manera que se reducen los problemas con la comunidad con relación a ruidos, olores, etc. derivados de la propia actividad de la planta. La localización de la instalación se ha realizado estratégicamente: se encuentra cerca de ENCE Pontevedra, principal proveedor de materia prima para el proceso (lignina Kraft). Se accede al polígono a partir de carretera comarcal y las principales vías de comunicación son la nacional N-550, situada a siete kilómetros y la autopista del Atlántico (AP-9) a nueve kilómetros de la planta. Por otra parte, el polígono tiene prevista una extensión de un 20% para albergar una única empresa de manera que se originarán diversos impactos ambientales que serán analizados por la “Secretaría Xeral de Calidade e Avaliación Ambiental”. No serán objeto de estudio ya que dicha ampliación no afecta al desarrollo de la instalación del proyecto. [1]

El polígono de “A Reigosa” cuenta con los servicios auxiliares necesarios de abastecimiento de la planta. Siguiendo esto, próximo al polígono se encuentra una subestación eléctrica, de la cual se surte la planta, con una corriente alterna de baja tensión (igual o inferior a 1kV) o media tensión (1-36 kV). El suministro de agua viene dado de la red de abastecimiento y para la obtención del agua desionizada, se aplicará un tratamiento in situ (no objeto de este proyecto) de dicha agua. [2]

5.2. Análisis medioambiental de las alternativas

La alternativa seleccionada es la oxidación de lignina Kraft en medio básico y separación con adsorción en función de la seguridad y simplicidad del proceso, los costes de materias primas y los de operación.

La oxidación de lignina Kraft en medio básico con separación por adsorción garantiza una degradación menor de la vainillina, de manera que se obtiene una mayor eficiencia en el proceso. Así mismo, el aire enriquecido en O₂ en lugar de aire atmosférico da lugar a un mayor rendimiento de la reacción. Además, la separación de compuestos fenólicos a partir de un proceso de adsorción constituye una alternativa más simple que las propuestas en el resto de las alternativas definidas, suponiendo conjuntamente una buena separación de los compuestos de interés con menor número de equipos y utilidades.

Finalmente, el proceso de separación de siringaldehído y vainillina se simplifica al aplicar la alternativa seleccionada, de manera que se sigue un proceso de separación de los compuestos seguido de una purificación en lugar de una cristalización, debido las complicaciones que conlleva.

Por otra parte, tal y como se detalla en el apartado 6. *Estudio de alternativas* del Documento I del presente proyecto, en las alternativas posibles no escogidas se emplean sustancias perjudiciales para el medioambiente y/o para la salud:

- En la extracción empleando acetato de etilo como solvente, el disolvente es un líquido inflamable y presenta peligro de incendio. [3]
- En la extracción con benceno como disolvente, el benceno supone un elemento de grave impacto ambiental ya que sus efectos nocivos resultan marcadamente tóxicos para los organismos. [4]
- En la separación por medio de nanofiltración con solvente orgánico aparece metanol en el proceso, líquido altamente venenoso y nocivo para la salud. Se trata de una sustancia muy inflamable, a pesar de que es fácilmente degradable en el medio ambiente (entre 7 y 18 días). [5]
- En la separación mediante adsorción con zeolita, la zeolita es un compuesto que reduce el impacto ambiental, [6] sin embargo aparece ácido sulfúrico en el proceso (como en las alternativas antes mencionadas), líquido sumamente corrosivo que al entrar en contacto con muchas sustancias puede resultar inflamable y al aumentar de temperatura puede emitir vapores altamente tóxicos. [7]
- En la extracción líquido-líquido con destilación se vuelve a emplear acetato de etilo como solvente, presentando los impactos anteriormente mencionados, y aparece sulfato sódico en la extracción, sustancia tóxica para los organismos acuáticos que es recomendable no incorporar al ambiente. [8]
- En la extracción líquido-líquido en dos etapas vuelven a hallarse las sustancias acetato de etilo y sulfato de sodio cuyos efectos ambientales fueron detallados anteriormente.
- En la destilación a vacío vuelve a aparecer el sulfato de sodio ya analizado ambientalmente.
- En la oxidación en medio básico con separación por adsorción se adiciona NH_3 al proceso, sustancia que provoca acidificación de los suelos. [9]

En conclusión, la alternativa seleccionada presenta el impacto ambiental más bajo debido a que en el proceso no genera residuos sólidos (el siringaldehído presenta alta pureza y es aprovechado para su venta). En cuanto a los efluentes líquidos, la única sustancia que puede llegar a suponer un riesgo ambiental se corresponde con el amoníaco, para la cual se proponen medidas para su reaprovechamiento debido a las grandes cantidades que se emplean de este compuesto. Por otro lado, la instalación genera bajas emisiones de efecto invernadero.

No obstante, la principal ventaja medioambiental que presenta se basa en la revalorización de un residuo de gran relevancia en la industria, como es la lignina, para la obtención de un compuesto de gran valor añadido. Se evita así las diversas emisiones derivadas de la incineración o desecho de la lignina.

6. Descripción del inventario ambiental e identificación de impactos

En el presente apartado se recoge información sobre los distintos escenarios perjudicados en la fase de construcción, de operación y de desmantelamiento. El objetivo del actual inventario ambiental trata de suministrar una caracterización del medio para establecer las medidas necesarias en función de los posibles impactos ambientales dados con la ejecución del proyecto.

Los factores a analizar en el inventario ambiental se recogen en tres grandes ámbitos: medio físico, medio biológico y medio socioeconómico y cultural.

6.1. Medio físico

Dentro del medio físico se recogen los factores físicos afectados con la realización del proyecto, así como el clima, la calidad del aire, la hidrología, la geología y el paisaje.

6.1.1. Clima

El clima en la zona de Ponte Caldelas presenta un clima oceánico húmedo, caracterizado principalmente por veranos suaves e inviernos frescos, con temperaturas de entre los 4°C y los 25°C, siendo la media de 22°C en la época templada y 14°C en la época fresca, tal y como se puede observar en la *Figura 1*. Las precipitaciones en Ponte Caldelas suponen una variación muy importante en función de la estación del año, alcanzando desde los 148 mm de precipitación en el mes más lluvioso (diciembre) hasta los 21 mm de precipitación en el mes más seco (julio).

En cuanto al viento, la velocidad media varía desde los 9 km/h en los meses más ventosos (octubre-mayo) hasta una velocidad media de 8,1 km /h en los meses menos ventosos (mayo-octubre); concretamente, en el año 2021 la velocidad media del viento en Ponte Caldelas registrada fue de 10 km/h. [10]

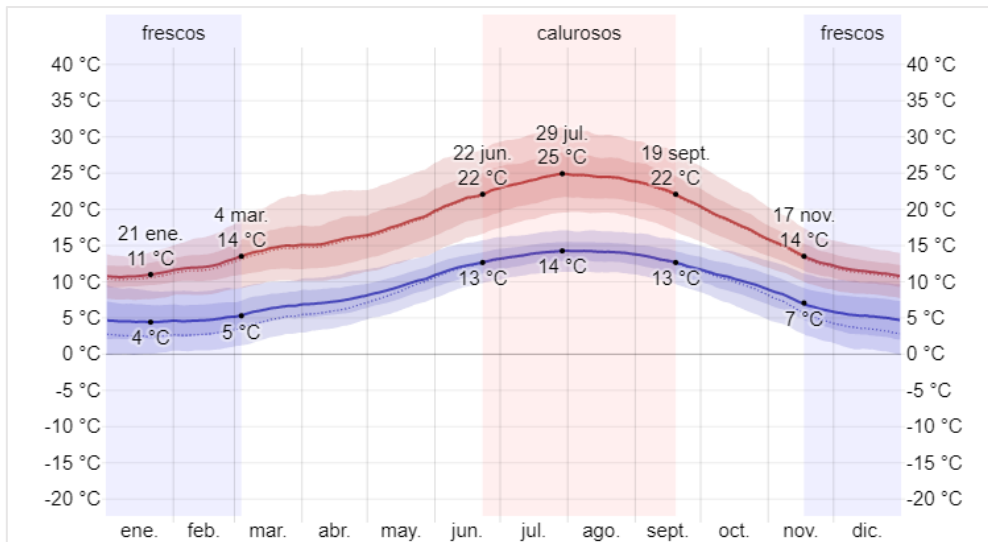


Figura 1: Evolución anual de temperaturas máximas (línea roja) y mínimas (línea azul) medias en Ponte Caldelas. Fuente: [10].

6.1.2. Hidrología

La hidrología en el presente proyecto no es un aspecto relevante, ya que la costa se encuentra a 6,5 km aproximadamente. Asimismo, es conveniente mencionar los posibles vertidos en el río Umia y en la Rega de Reigosa, próximos al área industrial seleccionada, a pesar de que el proceso no contenga sustancias perjudiciales para el medio ambiente.

6.1.3. Geología

La mayor concentración de terremotos de Galicia se encuentra en la región limitada en la Figura 2, que se corresponde con el área comprendida en la zona Asturoccidental leonesa. Esta región no queda definida dentro de los límites del proyecto, ya que está situada en otra área, por lo que se concluye que existe poca actividad sísmica.

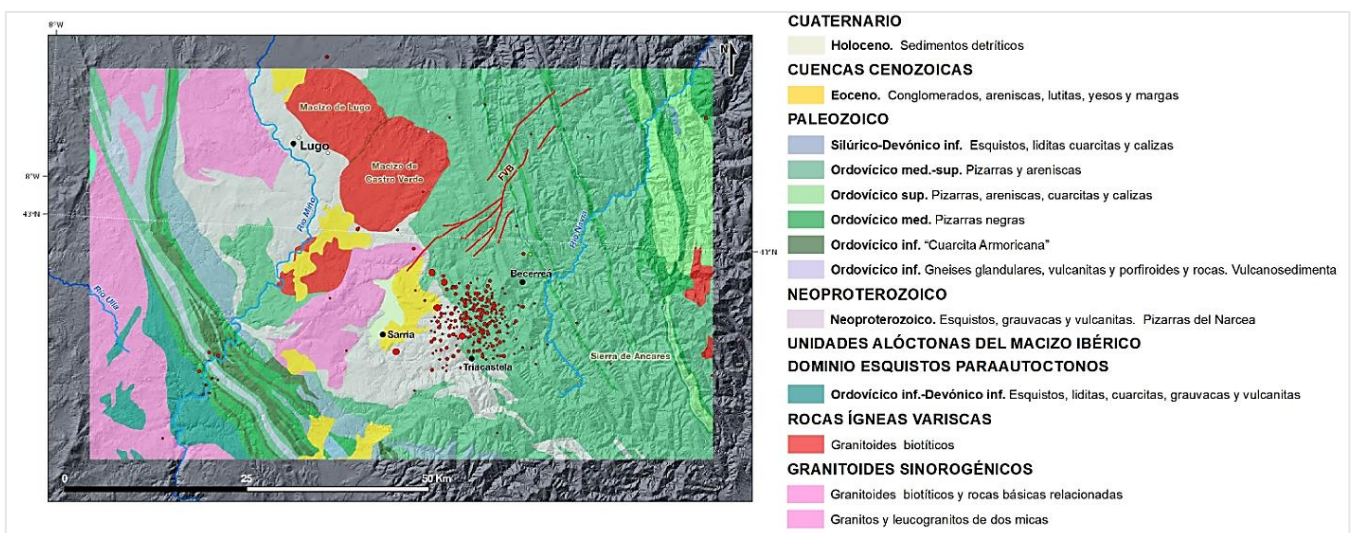


Figura 2: Geología y sismicidad de Galicia. Fuente: [11].

El índice considera el análisis de sustancias para evaluar el nivel de calidad del aire, tales como O₃, PM_{2.5}, PM₁₀, CO, NO₂ y SO₂. [14]. En la *Figura 4* se muestran los distintos rangos de calidad de aire y su significado.

ICA	Nivel de contaminación del aire	Implicaciones para la salud	Declaración de precaución (para PM _{2.5})
0 - 50	Bueno	La calidad del aire se considera satisfactoria y la contaminación del aire presenta poco o ningún riesgo.	Ninguno
51 -100	Moderado	La calidad del aire es aceptable; sin embargo, para algunos contaminantes puede haber una preocupación de salud moderada para un número muy pequeño de personas que son inusualmente sensibles a la contaminación del aire.	Los niños y adultos activos, y las personas con enfermedades respiratorias, como el asma, deben limitar los esfuerzos prolongados al aire libre.
101-150	Insalubre para grupos sensibles	Los miembros de grupos sensibles pueden experimentar efectos en la salud. No es probable que el público en general se vea afectado.	Los niños y adultos activos, y las personas con enfermedades respiratorias, como el asma, deben limitar los esfuerzos prolongados al aire libre.
151-200	Insalubre	Todos pueden comenzar a experimentar efectos en la salud; los miembros de grupos sensibles pueden experimentar efectos de salud más graves	Los niños y adultos activos, y las personas con enfermedades respiratorias, como el asma, deben evitar el esfuerzo prolongado al aire libre; todos los demás, especialmente los niños, deben limitar el esfuerzo prolongado al aire libre
201-300	muy poco saludable	Advertencias sanitarias de condiciones de emergencia. Es más probable que toda la población se vea afectada.	Los niños y adultos activos, y las personas con enfermedades respiratorias, como el asma, deben evitar todo esfuerzo al aire libre; todos los demás, especialmente los niños, deben limitar el esfuerzo al aire libre.
300+	Peligroso	Alerta de salud: todos pueden experimentar efectos de salud más graves	Todo el mundo debe evitar todo esfuerzo al aire libre.

Figura 4. Rangos de valor del ICA. Fuente: [14].

En la *Figura 5* se muestra el IDCA en Pontevedra, localidad más próxima de la cual se han podido obtener datos.

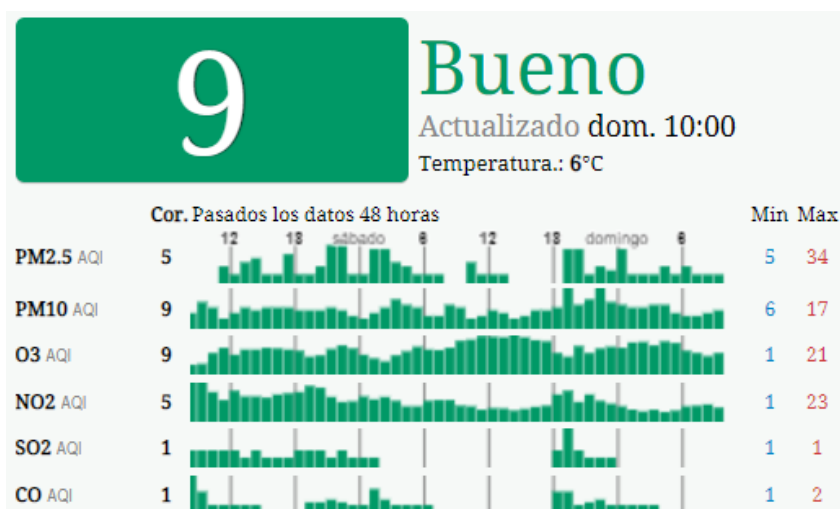


Figura 5. Índice de la calidad del aire en Pontevedra. Fuente: [14].

Actualmente, la calidad del aire en Pontevedra tiene un ICA de 9 por lo que entra dentro del rango de nivel de contaminación del aire bueno, siendo el principal contaminante las partículas finas de P_{10} y el O_3 . No obstante al tratarse de una calidad buena quiere decir que no se anticipan impactos a la salud para dicho valor.

6.1.5. Paisaje

El paisaje de Ponte Caldelas destaca por el contorno del río Verdugo, además del arbolado situado en sus márgenes que se describe a lo largo de las aguas cristalinas del mismo.

En concreto, en el área industrial el terreno está adecuado a edificios industriales por lo que la calidad paisajística es sumamente baja. En la *Figura 6* se muestra una fotografía aérea del polígono y en rojo se concreta la parcela en la que se sitúa la planta.[15]



Figura 6. Vista aérea del polígono de A Reigosa: Localización de la planta en rayado rojo. Fuente: [26].

6.2. Medio biológico

Dentro del medio biológico se recogen los factores bióticos afectados con la realización del proyecto, tales como la flora y la fauna. De acuerdo con lo indicado en la Ley 21/2013 de 9 de diciembre de Evaluación Ambiental, es necesario un apartado específico para la evaluación de las repercusiones del proyecto sobre espacios Red Natura 2000.

6.2.1. Flora

La flora existente en Ponte Caldelas es variada, contando con especies caducifolias reducidas a lo largo del tiempo por la actividad humana y la introducción del pino y del eucalipto, de manera sustitutiva. Tal y como se muestra en la *Figura 7*, la flora destacable en un radio de 10 km se corresponde con eucaliptales, zona agrícola y prados artificiales, bosque autóctono, matorrales, bosque de plantación y pinares, entre otros. [16]

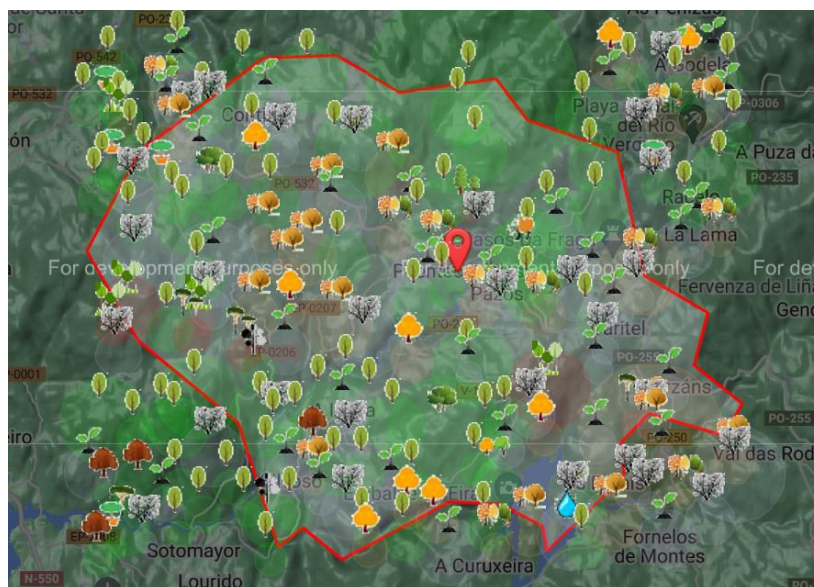


Figura 7: Flora de Ponte Caldelas. Fuente: [16]

6.2.2. Fauna

La fauna presente en Ponte Caldelas es variada, acorde con la flora mencionada. Se trata de una zona de gran biodiversidad, en la que se recogen especies tan representativas como la abubilla, el herrerillo capuchino, el halcón peregrino, el avión roquero, el aguilucho pálido, el pito real, el escarabajo gallego, el zorro, la nutria europea, el jabalí, el desmán de los Pirineos, el corzo, el lobo, la boga del Duero, la anguila, la culebra de collar, la lagartija gallega, la culebra viperina, entre otras. [16]

6.2.3. Red Natura 2000

La Directiva 92/43/CEE del Consejo, de 21 de mayo de 1992, relativa a la conservación de los hábitats naturales y de la fauna y flora silvestre, crea una red ecológica europea coherente denominada Natura 2000 que constituye un instrumento fundamental de la política de la Unión Europea en materia de conservación de la biodiversidad.

Esta Red Natura 2000 está compuesta por los lugares de importancia comunitaria (LIC), por las zonas especiales de conservación (ZEC) y por las zonas de especial protección para las aves (ZEPA), declaradas según las disposiciones de la Directiva 2009/147/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 30 de noviembre de 2009, relativa a la conservación de las aves silvestres. La red deberá asegurar el mantenimiento o el restablecimiento, en caso de ser necesario, de los tipos de hábitats naturales. Este fin concuerda con la ascendente conciencia ciudadana que respalda un cambio de comportamiento con el medio, de tal manera que se preste mayor importancia a la biodiversidad biológica y al mantenimiento de los sistemas necesarios para la conservación de la biosfera.

A modo de síntesis, la Directiva tiene la finalidad de fomentar la disposición del territorio, la gestión de los elementos del paisaje que abarcan importancia en la flora y la fauna silvestres, así como garantizar la aplicación de un sistema de vigilancia del estado de conservación de los hábitats naturales. [17]

La Planta de Producción de vainillina no se encuentra situada en ninguna de las zonas especificadas anteriormente afectadas por la Red Natura 2000, tal y como se puede ver en la *Figura 8*.

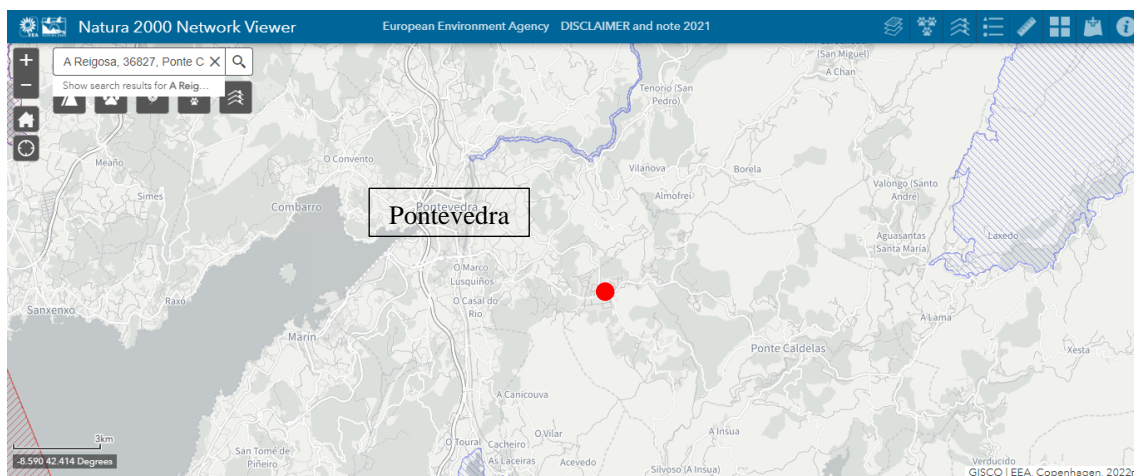


Figura 8. Mapa de Red Natura 2000 de la zona próxima a la instalación (punto rojo). Fuente: [22].

6.3. Medio socioeconómico y cultural

Dentro del medio socioeconómico y cultural se recogen los factores socioeconómicos y culturales afectados con la realización del proyecto, tales como la población y el empleo, el uso del suelo y la vulnerabilidad ante accidentes.

6.3.1. Población y empleo

El municipio de Ponte Caldelas registró una población de 5.548 habitantes en el año 2021, contando con una gran mayoría dentro del rango de población activa. Además, la localización cercana de grandes núcleos urbanos, como Vigo o Pontevedra, que cuentan con una alta tasa de población activa, beneficia la disponibilidad de mano de obra y, por tanto, el empleo.









Evolución del Paro Ponte Caldelas (Pontevedra)				
Fecha	Tasa de Paro Registrado		Nº de parados registrados	Población
Junio 2022	14,82%		357	5.548
2021	17,56%		415	5.548
2020	20,33%		485	5.533
2019	20,54%		483	5.494
2018	21,95%		504	5.491
2017	23,16%		538	5.562
2016	26,58%		615	5.573
2015	28,19%		650	5.540

Figura 9: Evolución anual de la tasa de paro en Ponte Caldelas. Fuente: [18].

Tal y como se refleja en la *Figura 9*, la tasa de paro registrada hasta junio de 2022 es del 14,82%, por lo que la implantación del proyecto en la zona tendría un resultado beneficioso ya que generaría puestos de trabajo directos e indirectos que disminuirían dicha tasa de desempleo.

6.3.2. Uso del suelo

Como la ejecución de la planta se lleva a cabo en el polígono de “A Reigosa”, constituye un terreno destinado a fines industriales que tiene un impacto de uso del suelo mínimo.

7. Identificación de impactos ambientales

La identificación y cuantificación de impactos ambientales ocasionados a partir de la instalación del presente proyecto tiene lugar a partir de la Matriz de Leopold. Esta matriz tiene el objetivo de establecer una relación de causa y efecto ambiental de un proyecto en desarrollo, de tal manera que se determinan los impactos ambientales generados por la planta clasificándolos en factores ambientales (filas de la matriz) y acciones ejecutadas por el hombre (columnas de la matriz). A su vez, los factores ambientales se agrupan en aspectos físicos, aspectos biológicos y aspectos socioeconómicos, definidos anteriormente en el apartado correspondiente a *Descripción del inventario ambiental e identificación de impactos*.

Por otra parte, las acciones del proyecto se disponen en:

- Fase de construcción. Se recogen acciones de construcción y edificación, además de la puesta en marcha del proyecto.
- Fase de explotación. Se disponen acciones de funcionamiento del proceso del proceso productivo y del manejo de residuos.

DOCUMENTO IV. ESTUDIOS CON ENTIDAD PROPIA

- Fase de desmantelamiento. Reúne las acciones propias para el desmantelamiento de la planta y la generación de residuos.

Para analizar el efecto de los impactos ambientales, la matriz de Leopold establece una medida de la Magnitud (M) y de la Importancia (I) de los mismos, de manera que se asignan valores de -5 a 5 en el primero de los casos (M) y de 1 a 5 en el segundo (I). Los valores negativos indican un impacto perjudicial para el medio ambiente mientras que los valores positivos representan un impacto beneficioso tal y como se recoge en la *Tabla 1*.

Tabla 1: Escala de medidas de magnitudes e importancias de la matriz de Leopold. Fuente: [Elaboración propia].

Valor	Magnitud	Importancia
1	Muy baja	Ninguna
2	Baja	Baja
3	Media	Media
4	Alta	Alta
5	Muy alta	Muy alta

Tal y como se puede observar en la *Figura 10*, se obtiene un valor de impacto total de la presente planta de producción de vainillina a partir de lignina Kraft de 119 tras realizar la Matriz de Leopold. De este modo, se concluye que el impacto producido por el proyecto es positivo debido a que los impactos positivos, alcanzados en el ámbito socioeconómico, son superados por los impactos negativos, producidos en el ámbito físico y en el ámbito biológico.

8. Medidas para la mitigación de impactos

En este apartado se recogen las medidas establecidas para la prevención y reducción de los impactos ocasionados por la Planta de producción de vainillina a partir de lignina Kraft que fueron analizados en la matriz de Leopold, tal y como se puede observar en la *Figura 10*.

8.1. Medidas en la fase de construcción

Para disminuir los impactos generados en la fase de construcción, es necesario tomar medidas para reducir principalmente las acciones asociadas al acondicionamiento del terreno, a la cimentación y estructuras y a la instalación de la obra. De este modo, se mejorarán las tecnologías de la maquinaria empleada en esta fase y se llevará a cabo el mantenimiento y la supervisión de las mismas.

Por otra parte, el horario de trabajo en esta fase debe ser adecuado para afectar mínimamente a la población cercana, de modo que se operará en un periodo correspondiente a la menor molestia de los habitantes por el ruido ocasionado. Teniendo esto en cuenta, también es necesario trabajar con un equipamiento que minimice la propagación de ruido y las vibraciones generadas.

Cabe mencionar, que la construcción de las estructuras debe basarse en la legislación vigente, asimismo el material empleado debe garantizar la disminución de la dispersión de partículas hacia la atmósfera, así como de la generación de residuos. Del mismo modo, estos residuos ocasionados deben ser clasificados e identificados en función de su origen y composición para el desecho controlado de los mismos.

8.2. Medidas en la fase de explotación

En la fase de explotación se adoptan las medidas de prevención más influyentes a lo largo de la vida del proyecto, puesto que es la fase más larga del mismo y, por tanto, la de mayor importancia y repercusión.

Las precauciones establecidas en la mejora del ámbito físico son similares a las adoptadas en la fase de construcción, con especial atención a las emisiones atmosféricas, que en este proceso resultan mínimas, al mantenimiento de los equipos y a las emisiones acústicas generadas, de manera que se garantice el empleo de equipamiento silencioso junto con un control periódico de los niveles.

En lo referente al cuidado de la calidad del agua residual proveniente de la limpieza de los equipos, se procede a su depuración en caso de ser necesario; para cumplir los límites establecidos en la legislación vigente.

Para el tratamiento de los efluentes líquidos, se proponen los siguientes posibles tratamientos para acondicionar las corrientes de residuo tanto para su vertido como su posible revalorización.

La corriente de residuos de la operación de adsorción está compuesta en su mayoría por compuestos X y por etanol. Los compuestos X engloban principalmente compuestos fenólicos como el syringol, catecol, fenol, etc. De acuerdo con lo reflejado en bibliografía [24] [25], se propone el lavado con disoluciones alcalinas para extraer los compuestos ya que es el método más común. No obstante, también se propone la alternativa mediante una extracción líquido-líquido empleando líquidos iónicos permite separar los compuestos fenólicos.

Este método evita problemas de emisiones de gases a la atmósfera gracias a la baja volatilidad de los líquidos iónicos. Otra de sus características es la alta estabilidad térmica y la posibilidad de reutilización. Separados los compuestos X, se plantea una destilación azeotrópica común para la separación del etanol de la disolución, formada en su mayoría por agua.

Por otro lado, la corriente 40 de desecho del spray dryer, está formada por una disolución amoníaco-agua con una pequeña cantidad de vainillina y siringaldehído. Un posible tratamiento para la recuperación de esta corriente sería la instalación de un filtro de membrana (nanofiltración, microfiltración) para eliminar los compuestos aromáticos, cuyo peso molecular es de un orden de magnitud superior al del NH_3 y el agua. Una vez retirados la vainillina y el siringaldehído, la disolución de amoníaco purificada es ajustada hasta la concentración deseada con la corriente de entrada fresca del mismo compuesto. De esta manera se evitaría la pérdida de grandes caudales de un compuesto de alto coste, suponiendo un gran ahorro para la instalación y reduciendo el impacto que supondría sobre el ambiente.

Para el tratamiento de las corrientes de sólidos, se considera la salida por colas del filtro F-203, formada en un 98% por Siringaldehído. Debido al creciente uso del siringaldehído como aromático, es un compuesto con propiedades bioactivas tal y como se refleja en el *Apartado 9.1.1 Siringaldehído de la Memoria*.

Teniendo en cuenta la alta pureza con la que se separa este compuesto en el proceso, se decide aprovechar este producto para ser comercializado como compuesto aromático de origen sintético. Posee con un amplio mercado en los sectores farmacéutico, alimentario, cosmético, etc. [23]

Dentro del ámbito biológico, se propone la reducción de la contaminación lumínica, mitigación de vertidos peligrosos que den lugar a la contaminación de la zona (que en este caso son inexistentes) y la minimización de los ruidos, ya comentada previamente. Por último, en el ámbito socioeconómico, se establecerá una comunicación transparente y de confianza entre la empresa y la comunidad. De este modo, se fomentará el empleo local para impulsar el desarrollo económico y mejorar la percepción social del área circundante a la industria. Además, se precisará la posesión de los equipos de protección individual correspondientes y de un periodo de formación previo a la contratación de los empleados.

8.3. Medidas en la fase de desmantelamiento

En lo referente a la fase de desmantelamiento, vuelve a ser relevante el tránsito de vehículos pesados, la contaminación atmosférica y el ruido principalmente en el área física, cuyas medidas se comentaron previamente en la fase de construcción. En concreto, en esta fase destacan la generación de residuos sólidos que serán destinados al tratamiento de residuos para valorizar su reutilización, reciclado o desecho en función del origen y de la composición que presenten.

9. Programa de Vigilancia Ambiental

El Programa de Vigilancia Ambiental (PVA) tiene como objetivo establecer un plan que garantice el cumplimiento de las medidas preventivas y correctoras adoptadas anteriormente, además de las posteriores modificaciones o adiciones que puedan tener a lo largo del desarrollo del proyecto. En concreto, se garantizará el cumplimiento de la normativa de la Ley 21/2013 del 9 de diciembre de evaluación ambiental.

El Programa de Vigilancia Ambiental cuenta con tres apartados correspondientes con cada una de las fases: construcción, explotación y desmantelamiento. Es recomendable que el seguimiento del plan se realice mediante una empresa externa, para garantizar su correcto cumplimiento.

En la fase de construcción se identifican y se corrigen las desviaciones llevadas a cabo, se garantiza el desarrollo correcto de las medidas ambientales como la calidad del aire y del agua, el ruido, la explotación del terreno, la gestión de los residuos y los impactos socioeconómicos; se evalúa si es necesario realizar modificaciones en las medidas establecidas inicialmente y se realiza un control de la evolución correcta de los elementos ambientales.

El tiempo de la fase de explotación se determina en el estudio de impacto ambiental dependiendo de la importancia de los factores ambientales que tengan lugar. En esta fase se garantiza que las medidas adoptadas en la fase anterior se lleven a cabo correctamente y se realiza un análisis para conocer la respuesta del entorno tras la instalación de la planta.

En la fase de desmantelamiento, se realizan controles similares a los de la primera fase, de manera que se combinan la erosión y modificación de la estructura del suelo con el equipamiento necesario para demoler las instalaciones con los residuos derivados de realizar esta acción.

10. Conclusiones

El Estudio de Impacto Ambiental llevado a cabo en este Documento, analiza y cuantifica los impactos generados a partir de la puesta en marcha de la planta de producción de vainillina a partir de lignina Kraft, así como la adopción de medidas preventivas y correctoras para mitigar los impactos evaluados en el estudio realizado.

Inicialmente, se enmarca el presente estudio de acuerdo con la legislación vigente. A continuación, se realizó una descripción del proceso a partir de la cual se fueron indicando las posibles consecuencias ambientales en cada una de las alternativas, de tal manera que se realizó una justificación ambiental de la alternativa y de la ubicación seleccionada. Con esto y conociendo las actividades desarrolladas en las tres fases del proyecto (construcción, explotación y desmantelamiento), se lleva a cabo la construcción de la Matriz de Leopold del proyecto. Se extrae que el impacto negativo tiene lugar en el ámbito físico y en el ámbito biológico, superado por el impacto positivo asociado al ámbito socioeconómico, y se establecen una serie de medidas correctoras y preventivas para reducir dichos impactos.

A pesar de haber obtenido un proyecto ambientalmente rentable; además, se propuso un Plan de Vigilancia Ambiental para velar por el cumplimiento de las medidas establecidas y modificarlas en caso de que sea necesario.

En Santiago de Compostela, a día 3 de enero de 2023.

Firman, los autores del proyecto,



Carlos Iglesias García



Martín Calvo Doce

11. Bibliografía

- [1]. La ampliación de A Reigosa podría empezar en verano | Galicia Naves [Consulta: 1 Julio, 2022]. Disponible en: <https://galicianaves.com/la-ampliacion-de-a-reigosa-podria-empezar-en-verano/>.
- [2]. PONTEVEDRA, N. D. -. El Análisis Ambiental Del Plan Para Ampliar A Reigosa Alerta De Sus Impactos "Negativos", 2012 [Consulta: 1 Julio, 2022] Disponible en: <https://www.farodevigo.es/pontevedra/2012/02/27/analisis-ambiental-plan-ampliar-reigosa-17681217.html>.
- [3]. Hoja Informativa Sobre Sustancias Peligrosas, Julio, 2002. [Consulta: 1 Julio, 2022] Disponible en: <https://www.nj.gov/health/eoh/rtkweb/documents/fs/0841sp.pdf>.
- [4]. Benceno. [Consulta: 1 Julio, 2022] Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/atmosfera-y-calidad-del-aire/calidad-del-aire/salud/benceno.aspx>.
- [5]. 4.19.Metanol. [Consulta: 1 Julio, 2022] Disponible en: <http://documentacion.ideam.gov.co/openbiblio/bvirtual/018903/Links/Guia19.pdf>.
- [6]. JOHN, Clara M., et al. La Zeolita En La Disminución Del Impacto Ambiental Del Nitrógeno. Centro de Investigaciones. GEOCUBA, IC. [Consulta: 2 Julio, 2022] Disponible en: <https://www.zeocat.es/docs/suelonitrogen2.pdf>.
- [7]. Resumen De Salud Pública: Anhídrido Sulfúrico Y Ácido Sulfúrico (Sulfur Trioxide and Sulfuric Acid) | PHS | ATSDR. -01-25T07:18:09Z, 2021. [Consulta: 2 Julio, 2022] Disponible en: https://www.atsdr.cdc.gov/es/phs/es_phs117.html.
- [8]. Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo. Sulfato De Sodio Y Dodecilo, 2018. [Consulta: 2 Julio, 2022] Disponible en: https://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=0502&p_version=2&p_lang=es.
- [9]. Amoniaco Sus Efectos Y Usos - BM Editores. 2020 [Consulta: 2 Julio, 2022] Disponible en: <https://bmeditores.mx/entorno-pecuario/amoniac-sus-efectos-y-usos/>.
- [10]. El Clima En Ponte Caldelas, El Tiempo Por Mes, Temperatura Promedio (España) - Weather Spark. [Consulta: 19 Abril, 2022] Disponible en: <https://es.weatherspark.com/y/32578/Clima-promedio-en-Ponte-Caldelas-Espa%C3%B1a-durante-todo-el-a%C3%B1o>.
- [11]. Sismicidad En Galicia. [Consulta: 3 Julio, 2022] Disponible en: https://www.ign.es/web/resources/sismologia/tproximos/sismotectonica/pag_sismotectonicas/galicia_detalle.html.

- [12]. Instituto Geológico y Minero de España. Mapa Geológico De España: Puente Caldelas. [Consulta: 3 Julio, 2022] Disponible en: <http://info.igme.es/cartografiadigital/datos/magna50/memorias/MMagna0186.pdf>.
- [13]. MONTESERÍN LÓPEZ, V. Mapa Geológico De España. 05-10, 1978. http://info.igme.es/cartografiadigital/datos/magna50/pdfs/d1_G50/Magna50_186.pdf.
- [14]. PROJECT, T.W.A.Q.I. Contaminación del aire de Campolongo, Pontevedra, Galicia, España: Índice PM2.5 de Calidad del Aire (ICA) en tiempo real. [Consulta: 27 Enero, 2023]. Disponible en: <https://aqicn.org/city/spain/galicia/pontevedra/campolongo/es/>.
- [15]. Espacios Naturales. [Consulta: 4 Julio, 2022] Disponible en: <https://www.pontecaldelas.org/index.php/turismo/espacios-naturales>.
- [16]. Ponte Caldelas, Pontevedra, 2019. [Consulta: 4 Julio, 2022] Disponible en: <http://www.spainviajes.com/que-ver-en-pontevedra/ponte-caldelas>.
- [17]. Decreto Del DOG N° 62 De 2014/3/31 - Xunta De Galicia. [Consulta: 4 Julio, 2022] Disponible en: https://www.xunta.gal/dog/Publicados/2014/20140331/AnuncioCA02-270314-0001_es.html.
- [18]. Paro Por Municipios: Ponte Caldelas - (Pontevedra), 2022. [Consulta: 4 Julio, 2022] Disponible en: <https://datosmacro.expansion.com/paro/espana/municipios/galicia/pontevedra/ponte-caldelas>.
- [19]. TOWLER, G., SINNOTT, R., BOSTON, A. •, HEIDELBERG, •, LONDON, •, SAN, P. •, SAN, D., SINGAPORE, F. • y TOKYO, S. •. *CHEMICAL ENGINEERING DESIGN Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*. S.l.: Butterworth-Heinemann. ISBN 978-0-7506-8423-1.
- [20]. Real Decreto 39/2017, De 27 De Enero, Por El Que Se Modifica El Real Decreto 102/2011, De 28 De Enero, Relativo a La Mejora De La Calidad Del Aire. 28 de enero de, 2017.
- [21]. Natura 2000 Network Viewer. [Consulta: 23 Enero]. Disponible en: <https://natura2000.eea.europa.eu/>.
- [22]. NASIR, M., IBRAHIM, M., ADAM, F., et al., 2012. A concise review of the natural existence, synthesis, properties, and applications of syringaldehyde, ISSN 1930-2126. Disponible en: https://www.researchgate.net/publication/224961714_A_concise_review_of_the_natural_existence_synthesis_properties_and_applications_of_syringaldehyde.

[24]. GONZÁLEZ GÓMEZ, E.J. y AIRA, V.R. APLICACIÓN DE LOS LÍQUIDOS IÓNICOS EN LA EXTRACCIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS PRESENTES EN EL ACEITE DE PIRÓLISIS. [Consulta: 27 Enero, 2023]. Disponible en: https://oa.upm.es/56075/1/TFG_VICTOR_REY_AIRA.pdf.

[25]. VÁSQUEZ, C., RUIZ, C., ARANGO, D., CAICEDO, R., SÁNCHEZ, M., RÍOS, L. y RESTREPO, G. PRODUCCIÓN DE ETANOL ABSOLUTO POR DESTILACIÓN EXTRACTIVA COMBINADA CON EFECTO SALINO PRODUCTION OF ANHYDROUS ETHANOL BY EXTRACTIVE DISTILLATION WITH SALT EFFECT. [Consulta: 27 Enero, 2023]. ISSN 0012-7353. Disponible en: <http://www.scielo.org.co/pdf/dyna/v74n151/a06v74n151.pdf>.

[26]. XESTIÓN DO SOLO DE GALICIA-XESTUR, S.A - Ficha Parque Empresarial. 25/07/2022 Disponible en: https://www.xesturgalicia.com/index.php?seccion=solo_empresarial&opcion=fichape&iid=308.

DOCUMENTO V: PRESUPUESTO

ÍNDICE

1.	Introducción al presupuesto.....	3
2.	Estimación del coste de equipos.....	3
2.1.	Actualización de coste y cambio de moneda.....	7
2.2.	Coste de equipos por catálogo.....	7
2.3.	Coste total de equipos.....	8
3.	Coste total de capital.....	8
3.1.	Presupuestos de capital fijo, C_F	8
3.1.1.	Costes directos.....	9
3.1.2.	Costes indirectos.....	10
3.1.3.	Cálculo del presupuesto de capital fijo.....	10
3.2.	Presupuesto de capital circulante, C_C	10
4.	Desglose de partidas presupuestarias.....	11
5.	Presupuesto final de la planta.....	12
6.	Bibliografía.....	14

1. Introducción al presupuesto

Finalmente, en el presente documento se realizará el presupuesto necesario para la construcción y puesta en marcha de la planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft.

Para ello, se empleará un método preliminar o de estimación de costes de Clase 4 según la asociación “Advancement of Cost Estimating International” o AACE International. Este permite establecer los costes aproximados con una precisión de $\pm 30\%$, siendo la más usada en este tipo de proyectos industriales para la elaboración del presupuesto.[1]

En las distintas partes que componen este documento, se explicará con detalle el cálculo del coste de equipos, el cual se realizará en base a los datos obtenidos en el *Anexo II. Cálculos justificativos*, sección *Dimensionamiento básico de equipos*; así como de las distintas partidas presupuestarias.

2. Estimación del coste de equipos

Para el cálculo del coste de los equipos se utilizará el método factorial, el cual se basa en la aplicación de factores dados por heurísticas en función del equipo a analizar. [1]

El cálculo se realiza a partir de la *Ecuación (1)*.

$$C_E = a + b \cdot S^n \quad (1)$$

Siendo a, b, S, n los factores dados por las tablas aportadas en la bibliografía. [1]

A continuación, en la *Tabla 1* se muestran los valores típicos de los parámetros en base al tipo de equipo.

Tabla 1: Factores para la estimación de coste de equipos. Fuente: Adaptado de [1].

Equipo	Unidad base, S	Slower	Supper	a	b	n
Recipientes a presión (CS)	Masa carcasa (kg)	160	250.000	10.000	29	0,85
Recipientes a presión (304 SS)	Masa carcasa (kg)	120	250.000	15.000	68	0,85
Bombas	Caudal (L/s)	0,2	126	6.900	206	0,9
Motor de bomba	Potencia (kW)	1	2.500	-950	1.770	0,6
Compresores recíprocos	Potencia (kW)	93	16.800	220.000	2.300	0,75
Reactor con camisa	Volumen (m ³)	0,5	100	53.000	28.000	0,8

Equipo	Unidad base, S	S_{lower}	S_{upper}	a	b	n
Relleno estructurado 304 SS	Volumen (m ³)	-	-	-	6.900	1,0
Distribuidor de gas	Diámetro (m)	0,5	5	290	550	1,9
Agitador	Potencia (kW)	5	75	15.000	990	1,05
Intercambiadores de calor carcasa y tubos	Área (m ²)	10	1.000	24.000	46	1,2
Spray dryer	Caudal evaporado (kg/h)	400	4.000	350.000	1.900	0,7

El factor S se ha calculado previamente para cada equipo en el *Anexo II. Cálculos justificativos*, sección *Dimensionamiento básico de equipos*, teniendo en cuenta la característica necesaria para estimar el coste en base a la *Tabla 1*. El valor obtenido de S para cada equipo debe encontrarse dentro del rango inferior y superior que marca dicha tabla. En el caso de que el valor supere el límite superior, se asumirá el valor del límite superior para la estimación del coste, y viceversa.

El resto de los factores, “a,b,n” permiten la obtención del coste del equipo, C_E , para el año 2007 y empleando los dólares estadounidenses como unidad monetaria, el cual se actualizará posteriormente debido a la inflación al coste real del año en el que se realiza el presente presupuesto.

Por otra parte, cabe destacar que el coste de los equipos de filtración y precipitación vienen determinados por el catálogo del fabricante, al no disponer de datos suficientes para la estimación de su coste por el método factorial. A pesar de que el spray dryer se adquiere por catálogo, su coste se determinará con el método factorial al no disponer del precio de mercado por parte del proveedor.

Este método factorial permite el cálculo del coste de equipos utilizando un material, presión y temperatura base. Debido a que los equipos implementados para el proceso propuesto en este proyecto no cumplen esas características base, se deberá aplicar una serie de factores de corrección. Estos factores de corrección se recogen en la *Tabla 2*,

Tabla 3 y *Tabla 4*, extraídas de la bibliografía [1] [2].

Tabla 2: Factor de corrección para material. Fuente: Realizada a partir de [1].

Material	Factor de corrección (f_m)
Acero al carbono	1,00
Aluminio y bronce	1,07
Acero	1,1
Acero inoxidable 304	1,3
Acero inoxidable 316	1,3
Acero inoxidable 321	1,5
Monel	1,65
Níquel e Inconel	1,7

Tabla 3: Factor de corrección por temperatura. Fuente: Realizado a partir de [2].

Rango de temperatura (°C)	Factor de corrección (ft)
0-100	1,00
300	1,6
500	2,1

Tabla 4: Factor de corrección por presión. Fuente: Realizado a partir de [2].

Rango de Presión (bar)	Factor de corrección (fp)
0,01	2,00
0,1	1,3
0,5-7	1,0
50	1,5
100	1,9

Cabe destacar que los factores de corrección para material, temperatura y presión se establecen, según las tablas, para ciertos valores concretos. Debido a que los valores de estas propiedades en los equipos no siempre se corresponden al valor exacto aportado por las tablas, se procederá a realizar la interpolación de los factores en base al valor real de cada equipo. Este paso resulta fundamental ya que, la utilización de los factores dados por las tablas, aproximando al valor siguiente más grande, conllevaría a una variación muy importante en la estimación del coste de equipos y representaría un error considerable en cuanto a la presentación del presupuesto.

A continuación, teniendo en cuenta lo descrito anteriormente, se muestra en la *Tabla 5* los costes obtenidos de los equipos en base a los datos de dimensionamiento previamente calculados.

Tabla 5: Coste de equipos. Fuente: [Elaboración propia]

Equipo	Unidad base, S	N° uds	f_m	f_p	f_t	Coste equipos (\$)
TM-101	2.616,02	1	1,65	1	1	54.948,27
Agitador TM-101	29,01	1	1	1	1	48.986,80
P-101 A/B	5,86	2	1,65	1,03	1	26.891,26
Motor P-101 A/B	7,53	2	1	1	1	9.987,22
P-201 A/B	7,81	2	1,65	1,27	1	34.407,88
Motor P-201 A/B	30,79	2	1	1	1	25.772,54
P-202 A/B	4,41	2	1,65	1,03	1	26.115,13
Motor P-202 A/B	4,79	2	1	1	1	7.161,59
P-203 A/B	6,00	2	1	1	1	15.866,49
Motor P-203 A/B	650,03	2	1	1	1	170.589,75
P-204 A/B	5,98	2	1	1	1	15.860,29
Motor P-204 A/B	520,7	2	1	1	1	149.092,65
P-301 A/B	6,54	2	1	1	1	16.033,15
Motor P-301 A/B	1	2	1	1	1	1.640,00
R-101	15,72	1	1,65	1,03	1,18	615.058,78
Relleno 316 SS	0,83	1	1,3	1,03	1,18	9.019,34
Plato burbujeo	1,71	1	1,65	1,03	1,18	3.638,31
T-201/T-202	2.931,69	2	1,65	1	1	117.715,38
V-201	958,08	1	1,65	1	1	32.870,93
V-202	4.331,14	1	1	1	1	98.872,73
C-101 A/B	243,45	2	1	1	1,1	795.858,69
C-102 A/B	110,46	2	1	1,03	1,42	872.782,30
E-101	1.000	1	1	1,03	1,04	221.876,90
E-102	105,9	1	1	1,03	1,18	44.213,22
E-103	10	1	1	1,03	1,42	36.168,71
E-201	169,29	1	1	1,03	1,18	55.583,63
SD-301	4.000	1	1	1	1	981.241,58
Coste de equipos (\$), año 2007						4.488.253,53

2.1. Actualización de coste y cambio de moneda

Las fluctuaciones sobre el valor del dinero con el tiempo es un parámetro a tener en cuenta a la hora de calcular los costes de adquisición de equipos. La actualización de los costes se realiza por medio de la *Ecuación (2)*:

$$\frac{Coste_{año\ referencia}}{Coste_{año\ 2022}} = \frac{I_1}{I_2} \quad (2)$$

Siendo:

$Coste_{año\ referencia}$: El coste obtenido en el año de referencia, enero 2007

$Coste_{año\ 2022}$: Coste año actualizado

I_1 : Índice año enero 2007 (509,7)

I_2 : Índice año septiembre 2022 (821,3) [3]

Una vez actualizado el coste de adquisición, debe realizarse el cambio de divisa de dólares norteamericanos (\$) a euros (€). Para ello, se tendrá en cuenta el valor de cambio de moneda en el momento de la realización de este documento, el cual asciende a 1,07 \$/€ [4]. En la *Tabla 6* se presenta el coste total actualizado en ambas divisas.

Tabla 6: Coste de equipos actualizado al año 2022 en distintas divisas. Fuente: [Elaboración propia]

Parámetro	Valor
Coste de equipos (\$), año 2007	4.488.253,53 \$
Coste de equipos (\$), año 2022	7.232.102,46 \$
Coste de equipos (€), año 2022	6.758.974,26 €

2.2. Coste de equipos por catálogo

Tal y como se mencionó anteriormente, el coste de los filtros y del precipitador vendrán dados por catálogo, con precios actualizados.

En el caso de los filtros F-201 A/B y F-202 A/B, se estima un coste a partir de bibliografía [5], siendo el precio de cada filtro de 61.400\$, que aplicando el cambio de moneda descrito en el apartado anterior, resulta en 57.383,18€. Teniendo en cuenta que en total hay un grupo de 4 filtros, el precio asciende a 229.532,72€.

En el caso del filtro F-101 A/B, su coste se calcula a partir de los datos del fabricante en función de las toneladas de oxígeno en la corriente de salida del filtro [6], ascendiendo el coste total a 126.051,23\$, que al cambio suponen 117.804,89 € por cada filtro. Teniendo en cuenta la existencia de dos filtros, el coste asciende a 235.609,78€.

Por último, en el caso del precipitador, se adquiere una unidad industrial que pueda ser compatible con el proceso. Se ha optado por la elección de una unidad comercial cuyo precio asciende a 100.000\$, que, al cambio, supone un coste de 93.457,94€. [7]

Debe recordarse que, a pesar de que el equipo spray dryer, perteneciente a la sección 300 del proceso, se adquiere mediante catálogo al proveedor, el cálculo de su coste se ha realizado mediante la estimación por el método factorial debido a que el precio real de dicho equipo no se ha puesto en conocimiento por parte del proveedor.

2.3. Coste total de equipos

Una vez obtenido el coste de todos los equipos, tanto estimados como adquiridos, se realiza la suma para obtener el coste total de adquisición de los equipos necesarios para el proceso, mostrado en la *Tabla 7*.

Tabla 7: Coste total de equipos. Fuente:[Elaboración propia]

Coste de equipos calculado, año 2022	6.758.974,26 €
Coste de equipos por catálogo, año 2022	558.600,44 €
Coste total de equipos, año 2022	7.317.574,70 €

3. Coste total de capital

El coste total de capital hace referencia al capital dispuesto para llevar a cabo la materialización de la planta industrial. Este resulta de la suma de los costes de capital fijo, C_F , y de los costes de capital circulante, C_c .

En el caso de las plantas químicas, el coste total de capital se suele realizar mediante el empleo de un método de factores individualizados para cada partida, lo que contribuye a la elaboración de un presupuesto de mayor precisión.

A continuación, se desarrollarán los distintos costes que conforman el coste total de capital. [1]

3.1. Presupuestos de capital fijo, C_F

El siguiente punto de análisis para el presupuesto será el cálculo del capital necesario para la construcción de la planta y preparación para su operación, denominado como capital fijo o inmovilizado. Este engloba los costes directos e indirectos pagados a los contratistas para la ejecución del proyecto y que incluyen las siguientes partes [1]:

- Los equipos implementados en la instalación.
- Sistema de tuberías, equipamiento, instrumentación y control.
- La ingeniería civil contemplada en el proyecto.
- Adquisición del terreno y “offsites”.
- Diseño e ingeniería.
- El capital de contingencia.

3.1.1. Costes directos

Los costes directos engloban los costes dentro de los límites de batería (C_{ISBL}) que, además del coste de adquisición de equipos, incluye los costes derivados de su montaje y estructuras necesarias, el coste de tuberías, electricidad, instrumentación, edificios y estructuras auxiliares, revestimiento y pintura. Además, dentro de los costes directos se incluyen los costes de adquisición del terreno y los costes derivados de los “offsites” (C_{OSBL}), destinados a proporcionar apoyo y servicios a la planta, como son sistemas de protección y comunicación y accesos o aparcamientos, entre otros. [1] [2]

El cálculo de C_{ISBL} se realizará a partir de la siguiente *Ecuación (3)*.

$$C_{ISBL} = \sum_{i=1}^{i=M} C_{ei} \cdot [(1 + f_p)f_m + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l)] \quad (3)$$

Los factores han sido extraídos de la bibliografía “Sinnot” [1] y se recogen a continuación en la *Tabla 8* y *Tabla 9*.

Tabla 8: Factores de corrección para C_{ISBL} . Fuente: [1].

Partida	Factor
Instalación de equipos, f_{er}	0,3
Tuberías, f_p	0,8
Instrumentación y Control, f_i	0,3
Instalación eléctrica, f_{el}	0,2
Ingeniería civil, f_c	0,3
Estructuras y edificios, f_s	0,2
Revestimiento y pintura, f_l	0,1

Tabla 9: Factor de corrección para C_{OSBL} . Fuente: [1]

Partida	Factor
Offsites, OS	0,3

3.1.2. Costes indirectos

Los costes indirectos engloban los costes de diseño e ingeniería, el fondo o capital de contingencia, reservado para circunstancias imprevistas durante todas las etapas de construcción de la planta. [1]

El coste de cada partida que forman los costes indirectos se obtiene mediante la *Ecuación (4)*:

$$C_{\text{indirecto partida}} = C_{ISBL} \cdot f \quad (4)$$

Siendo:

$C_{\text{indirecto partida}}$: El coste de cada partida que forma parte de los costes indirectos (€).

C_{ISBL} : Coste de capital dentro de los límites de batería (€).

f : Factor de cada partida.

Los factores de cada partida, previamente mencionados, para el cálculo de costes indirectos se recogen en la *Tabla 10*.

Tabla 10: Factores para costes indirectos. Fuente: [1]

Partida	Factor
Diseño e Ingeniería, D&E	0,3
Capital de contingencia, X	0,1

3.1.3. Cálculo del presupuesto de capital fijo

Finalmente, el coste de capital fijo, C_F , puede calcularse mediante la *Ecuación (5)*. [1]

$$C_F = C_{ISBL} \cdot (1 + OS) \cdot (1 + D\&E + X) + C_{\text{terreno}} \quad (5)$$

Siendo:

OS : Factor correspondiente a “offsites”

$D\&E$: Factor correspondiente a diseño e ingeniería

X : Factor correspondiente a la contingencia

C_{terreno} : Coste del terreno (€)

3.2. Presupuesto de capital circulante, C_C

Se corresponde al capital necesario para la puesta en marcha de la planta hasta la obtención de ingresos. El capital circulante incluye la adquisición de materias primas y catalizadores empleados en la operación, el almacenamiento de productos o el pago de salario de trabajadores, entre otros.

El capital circulante, C_C , se corresponde con el 15% de la suma del coste de C_{ISBL} y el coste de “offsites”, tal y como se muestra en la *Ecuación (6)*: [1]

$$C_C = 0,15 \cdot (C_{ISBL} + OS) \quad (6)$$

4. Desglose de partidas presupuestarias

En este punto se recogerán los costes de capital fijo, junto con el desglose de las distintas partidas, así como los costes de capital circulante. Dichos datos se recogen en la siguiente *Tabla 11, Tabla 12 y Tabla 13*.

Tabla 11: Desglose de partidas dentro de los costes de capital fijo. Fuente: [Elaboración propia]

COSTES DE CAPITAL FIJO, C_F				
<i>Partida</i>	<i>Descripción</i>	<i>Medida</i>	<i>Coste (€)</i>	
Costes Directos				
C_{ISBL}	Adquisición de equipos	Coste de los equipos y entrega	Partida alzada	7.317.574,70
	Instalación de equipos	Montaje en planta	Partida alzada	2.195.272,41
	Tuberías	Instalación y acondicionamiento de las conducciones	Partida alzada	5.854.059,76
	Instrumentación y control	Sistemas e instrumentos para el control del proceso	Partida alzada	2.195.272,41
	Instalación eléctrica	Sistemas eléctricos e iluminación	Partida alzada	1.463.514,94
	Ingeniería civil	Obras de adecuación del lugar como caminos o aparcamientos	Partida alzada	2.195.272,41
	Estructuras y edificios	Emplazamientos para laboratorio, almacén, etc.	Partida alzada	1.463.514,94
	Revestimiento y pintura	Material y trabajos de acondicionamiento de edificios y equipos	Partida alzada	731.757,47
	<i>Coste total C_{ISBL}</i>			23.416.239,06
C_{OSBL}	Offsites	Sistemas de protección y comunicación, accesos, etc.	Partida alzada	7.024.871,72
	Adquisición del terreno	Coste de la parcela	41.522,60 m ²	2.745.474,31

Costes Indirectos			
Diseño e ingeniería	Coste de los servicios profesionales para el diseño	Partida alzada	7.024.871,72
Contingencia	Fondo de reserva	Partida alzada	2.341.623,91

Tabla 12: Coste de capital fijo. Fuente: [Elaboración propia]

	Coste (€)
COSTE DE CAPITAL FIJO, C_F	45.363.029,39

Tabla 13: Coste de capital circulante. Fuente: [Elaboración propia]

	Coste (€)
COSTE DE CAPITAL CIRCULANTE, C_c	4.566.166,62

5. Presupuesto final de la planta

Una vez obtenido los distintos costes relativos a la construcción, puesta en marcha de la planta y operación, se elabora el presupuesto total de la planta, recogido en la *Tabla 14*.

Tabla 14: Presupuesto general de la planta. Fuente: [Elaboración propia]

Partida	Importe (€)
Adquisición de equipos	7.317.574,70
Instalación de equipos	2.195.272,41
Tuberías	5.854.059,76
Instrumentación y Control	2.195.272,41
Instalación eléctrica	1.463.514,94
Ingeniería civil	2.195.272,41
Estructuras y edificios	1.463.514,94
Revestimiento y pintura	731.757,47
Offsites	7.024.871,72
Diseño e ingeniería	7.024.871,72
Contingencia	2.341.623,91
Adquisición del terreno	2.745.474,31
Capital circulante	4.566.166,62
PRESUPUESTO TOTAL (€)	49.929.196,01

Se concluye que, el presupuesto total de la planta de producción de vainillina (4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído) a partir de lignina Kraft asciende a *CUARENTA Y NUEVE MILLONES NOVECIENTOS VEINTINUEVE MIL CIENTO NOVENTA Y SEIS EUROS CON UN CÉNTIMO*.

En Santiago de Compostela, a día 3 de enero de 2023.

Firman, los autores del proyecto,



Carlos Iglesias García



Martín Calvo Doce

6. Bibliografía

- [1]. SINNOT, Ray; and TOWLER, Gavin. *Diseño En Ingeniería Química*. Quinta ed. Barcelona: Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
- [2]. SMITH, R., 2005. *Chemical Process Design and Integration*. S.l.: John Wiley & Sons, Ltd. ISBN : 0-471-48680-9 (HB); 0-471-48681-7 (PB).
- [3]. MAXWELL, C., 2023. Cost Indices – Towering Skills. [en línea]. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.toweringskills.com/financial-analysis/cost-indices/>>.
- [4]. Calculadora de conversión de divisas. [Consulta: 29 enero 2023]. Disponible en: <<https://www.xe.com/es/currencyconverter/>>.
- [5]. LOUNICI, Hakim; HOCINE, Griband MAMERI, Nabil. Economic Study of the Treatment of Surface Water by Small Ultrafiltration Units. *Water SA*, Abril, 2001, vol. 27, no. 2. ISSN 0378-4738. Disponible en: <https://www.researchgate.net/publication/267981788_Economic_study_of_the_treatment_of_surface_water_by_small_ultrafiltration_units>.
- [6]. MICARI, Marina; and AGRAWAL, Kumar Varoon. Oxygen Enrichment of Air: Performance Guidelines for Membranes Based on Techno-Economic Assessment. *Journal of Membrane Science*, Enero, 2022, vol. 641, no. 1. Disponible en: <<https://doi.org/10.1016/j.memsci.2021.119883>>.
- [7]. Wet Precipitador Electrostático Para Planta De Acero. [Consulta: 10 Julio, 2022] Disponible en: <https://es.made-in-china.com/co_jszgjdd/product_Jdw-4X16-Wet-Electrostatic-Precipitator-for-Steel-Plant_ennuohgoy.html>.