

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA
ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA



TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE 2-PROPENAL A
PARTIR DE PROPILENO

Fernández Soto, Andrea Estefanía
Jauregui Rodríguez, Alejandro José
Marques Cosme, Andrea Paola

Junio 2021

ÍNDICE GENERAL

Documento I: Memoria

Anexo I: Balances de materia y energía

Anexo II: Cálculos justificativos

Anexo III: Análisis de viabilidad económica

Documento II: Planos

Documento III: Estudios de entidad propia

Documento IV: Presupuesto

DOCUMENTO I:

MEMORIA

ÍNDICE

1.	Objeto	1
2.	Alcance	1
3.	Justificación	2
4.	Materias primas	2
4.1.	Propileno	2
4.1.1.	Propiedades físicas y termodinámicas.....	2
4.1.2.	Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud.....	3
4.2.	Helio.....	3
4.2.1.	Propiedades físicas y termodinámicas.....	4
4.2.2.	Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud.....	4
4.3.	Aire	4
4.3.1.	Propiedades físicas y termodinámicas.....	5
4.3.2.	Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud.....	5
5.	Producto: 2-propenal.....	5
5.1.	Propiedades físicas y termodinámicas.....	6
5.2.	Propiedades químicas	6
5.3.	Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud	8
6.	Subproductos	8
6.1.	Ácido acrílico	8
6.1.1.	Propiedades físicas y termodinámicas.....	9
6.1.2.	Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud.....	9
6.2.	Acetaldehído	10
6.2.1.	Propiedades físicas y termodinámicas.....	10
6.2.2.	Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud.....	10
6.3.	Ácido acético	11
6.3.1.	Propiedades físicas y termodinámicas.....	11
6.3.2.	Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud.....	12
7.	Estudio de mercado.....	12
7.1.	Propileno	12
7.1.1.	Importación y exportación.....	12
7.1.2.	Precios	13
7.1.3.	Empresas del sector	14
7.1.4.	Perspectivas futuras.....	14
7.2.	Helio.....	14
7.2.1.	Importación y exportación	15
7.2.2.	Precios	15
7.2.3.	Empresas del sector	16
7.2.4.	Perspectivas futuras.....	16
7.3.	2-propenal	17
7.3.1.	Estudio de las aplicaciones	17
7.3.2.	Producción y consumo.....	18
7.3.3.	Importación y exportación	19
7.3.4.	Empresas del sector	20
7.3.5.	Precios	21
7.4.	Ácido acrílico	21
7.4.1.	Estudio de las aplicaciones	21
7.4.2.	Producción y consumo.....	21
7.4.3.	Importación y exportación.....	21

7.4.4.	Empresas del sector	22
7.4.5.	Precios	23
7.5.	Acetaldehído	23
7.5.1.	Estudio de las aplicaciones	23
7.5.2.	Producción y consumo	23
7.5.3.	Importación y exportación	23
7.5.4.	Empresas del sector	24
7.5.5.	Precios	24
7.6.	Ácido acético	25
7.6.1.	Estudio de las aplicaciones	25
7.6.2.	Producción y consumo	25
7.6.3.	Exportaciones e importaciones	25
7.6.4.	Empresas del sector	26
7.6.5.	Precios	26
8.	Estudio de alternativas.....	27
8.1.	Oxidación parcial de propileno	27
8.2.	Deshidratación de glicerina	28
8.3.	Acoplamiento oxidativo de alcoholes	30
8.4.	Alternativa seleccionada	31
8.5.	Selección del catalizador	31
9.	Emplazamiento	33
9.1.	Selección del emplazamiento	33
9.2.	Características del polígono	34
9.2.1.	Selección de parcela	35
9.2.2.	Clima	36
9.2.3.	Suministros	38
9.2.4.	Sismicidad.....	38
9.3.	Medios de transporte	39
9.4.	Mano de obra.....	39
9.5.	Impacto ambiental y consideraciones políticas.....	39
10.	Estudio de viabilidad técnica.....	40
10.1.	Disponibilidad de materias primas y catalizador	40
10.2.	Disponibilidad de parcela y utilidades	41
10.3.	Disponibilidad de equipos y tecnologías.....	41
10.4.	Disponibilidad de mano de obra	42
10.5.	Seguridad del proceso	43
10.6.	Análisis económico preliminar.....	43
11.	Descripción del proceso	44
11.1.	Capacidad de producción	44
11.2.	Materias primas, subproductos y producto	44
11.3.	Servicios Auxiliares.....	44
11.4.	Secciones del proceso	44
11.4.1.	Sección 100: Acondicionamiento de las materias primas	44
11.4.2.	Sección 200: Reacción.....	45
11.4.3.	Sección 300: Separación y purificación.....	46
12.	Descripción de equipos.....	47
13.	Control e instrumentación.....	50
13.1.	Introducción	50
13.2.	Sistemas de control: variables y componentes.....	50
13.3.	Configuraciones de control.....	52
13.3.1.	Control <i>feedback</i>	52

13.3.2.	Control <i>feedforward</i>	53
13.3.3.	Control en cascada	53
13.4.	Algoritmos de control	54
13.5.	Selección y justificación de las variables controladas	55
13.6.	Instrumentación	58
13.7.	Simbología empleada	59
13.8.	Descripción de lazos de control	60
13.8.1.	Sección 100	60
13.8.2.	Sección 200	61
13.8.3.	Sección 300	61
13.9.	Capas de seguridad	64
13.9.1.	Indicadores	65
13.9.2.	Alarmas	65
13.9.3.	Dispositivos de alivio	66
14.	Seguridad	67
14.1.	Introducción	67
14.2.	Inventario de sustancias	67
14.3.	Clasificación según el reglamento CLP	68
14.4.	Clasificación de la instalación según la directiva Seveso	70
14.5.	Clasificación NFPA de las sustancias	71
14.6.	Estudio de reactividad química descontrolada	73
14.6.1.	Matriz de compatibilidad química	73
14.7.	Distancias de seguridad	74
14.8.	Índice DOW de incendios y explosiones	76
14.8.1.	Factor de material (FM)	76
14.8.2.	Riesgos generales del proceso	77
14.8.3.	Peligros especiales del proceso	77
14.8.4.	Formulario del índice de incendios y explosiones	77
14.8.6.	Factor de daño	79
14.9.	Documento de síntesis	80
15.	Legislación, normas y códigos de diseño	80
15.1.	Legislación	80
15.1.1.	General	80
15.1.2.	Seguridad	80
15.1.3.	Medio ambiente	82
15.2.	Normas y códigos de diseño	83
16.	Bibliografía	83

1. Objeto

El presente proyecto tiene como objeto el diseño de una planta de producción de 10.000 toneladas al año de 2-propenal a partir de propileno con un mínimo de 95% de pureza. La producción se realizará en continuo 24 horas al día y durante 320 días al año.

Para la obtención del 2-propenal mediante la oxidación parcial del propileno, la planta cuenta con un reactor catalítico (R-201), equipo que será diseñado por Andrea Estefanía Fernández Soto.

Para aumentar la concentración del 2-propenal, también conocido como acroleína, el efluente del reactor se hace pasar por diversos equipos de separación. Primero se introduce en una columna *quench* (T-301), donde se enfría la corriente y se elimina la mayor parte de los subproductos ácidos acrílico y acético.

Posteriormente, el gas es llevado a una columna de absorción (T-302) para eliminar los componentes no condensables y obtener una solución acuosa de acroleína, empleando agua como disolvente. Esta columna de absorción será diseñada por Alejandro José Jauregui Rodríguez.

La solución acuosa se introduce en una columna de desorción (T-303) para obtener acroleína bruta, la cual es finalmente llevada a una columna de destilación (T-304) para enriquecer la corriente de producto en acroleína. La columna de destilación será diseñada por Andrea Paola Marques Cosme.

Este proyecto se establece como el Trabajo de Fin de Grado de los alumnos Andrea Estefanía Fernández Soto, Alejandro José Jauregui Rodríguez y Andrea Paola Marques Cosme con el fin de obtener el título en Ingeniería Química otorgado por la Universidad de Santiago de Compostela.

2. Alcance

El presente proyecto se encuentra dividido en cuatro documentos, los cuales serán descritos a continuación.

El primer documento del presente proyecto corresponde a la Memoria. En este se presenta tanto una descripción generalizada del proyecto como la justificación para la realización del mismo. Además, cuenta con un análisis de viabilidad técnica y un estudio de mercado indispensable para un correcto desarrollo de la planta. En este documento, también se expone la justificación del emplazamiento y la alternativa de proceso más sostenible para la instalación. Se presenta un estudio de la seguridad del proceso (el cual incluye la clasificación según el Reglamento CLP, de la Directiva Seveso) y el sistema de control e instrumentación, con los lazos de control que se implementarán en la planta.

Adicionalmente, este primer documento incluye tres anexos con los siguientes fines, respectivamente: Balances de materia y energía, Cálculos justificativos y Análisis de viabilidad económica.

En el Anexo I se adjuntan los balances de materia y energía realizados para cada equipo de la instalación.

El Anexo II contiene los cálculos justificativos de los diseños. De modo que se presentan cinco partes, que corresponden a: consideraciones del diseño mecánico, el dimensionamiento de los equipos R-201, T-302 y T-304 (considerando las normativas y legislaciones pertinentes y la metodología del diseño), y por último, el dimensionamiento básico de los demás equipos presentes en el presente proyecto.

Se adjunta además un análisis económico en el Anexo III. En él se realiza una evaluación económica del proyecto considerando, entre otros aspectos, los indicadores VAN y TIR, así como también, se realizan análisis de sensibilidad, modificando ciertos parámetros.

Por otro lado, en un segundo documento se adjuntan los planos y diagramas de la planta incluyendo los diagramas de flujo, y de instrumentación y control. Así como los planos respectivos para cada equipo diseñado rigurosamente.

Asimismo, en el tercer documento se presenta el estudio con entidad propia, que corresponde al estudio ambiental, y en el cuarto documento se recoge el presupuesto del proyecto.

Por último, en documentación a parte, se recogerán las fichas de seguridad de los compuestos de la planta, el pliego de condiciones y el estudio de seguridad del proyecto.

3. Justificación

Cabe destacar, que se llevará a cabo el diseño de una planta de producción de acroleína debido a que este es un compuesto intermedio importante en los procesos de producción de una variedad de sustancias. Como es por ejemplo la DL-metionina, un aminoácido esencial empleado como complemento alimenticio para animales. Siendo de gran relevancia, dado que el sector cárnico representa un 15,6% del PIB en la rama industrial de España (1-2).

Asimismo, la acroleína es utilizada incluso comercialmente como un biocida para controlar el crecimiento de malezas acuáticas o algas, aunque principalmente es usada para la producción de ácido acrílico, 1,3 propanodiol, glutaraldehído, piridinas, aromas y fragancias (1).

Destaca, entre otros productos derivados de la acroleína, el *4-dihydro-2-methoxy-2H-pyran* pues con él se elabora el glutaraldehído. Este producto tiene un alto interés comercial, ya que se emplea para la producción de desinfectantes de equipos médicos y de laboratorio. Se puede estimar con la situación COVID-19 actual, la importancia de aumentar la producción de estos compuestos (1).

Teniendo en cuenta que la acroleína está clasificada como compuesto muy tóxico e inflamable y debe ser manipulada con equipos especialmente diseñados, su transporte es costoso, estando el transporte aéreo prohibido, el traslado en Europa se realiza mediante carreteras y ferrocarril. Se considera oportuno, dada la demanda nacional, la implantación de una planta de producción de acroleína en España, permitiendo satisfacer los pedidos con menor coste de transporte. Promoviendo asimismo una mayor producción de compuestos derivados de la acroleína (1).

4. Materias primas

4.1. Propileno

El propileno, también denominado propeno, fue una de las primeras sustancias empleadas como materia prima en la industria química. Se obtiene principalmente como subproducto de la refinación del petróleo y de la producción de etileno. Antiguamente, el propileno se utilizaba para la producción de isopropanol. Sin embargo, a partir de 1965, las aplicaciones del propileno fueron aumentando debido a la gran expansión del etileno (3-4).

Actualmente, el propileno se emplea en la industria petroquímica como materia prima de alquilación para mejorar el índice de octano. Además, se utiliza ampliamente en la industria química para la producción de polipropileno, acrilonitrilo, oxoalcoholes, óxido de propileno, butanal y cumeno. De hecho, el polipropileno corresponde al principal consumidor de propileno (3-4).

4.1.1. Propiedades físicas y termodinámicas

El propileno, cuya fórmula molecular es C_3H_6 y número CAS 115-07-1, es un gas incoloro caracterizado por su ligero olor a petróleo. A continuación, en la Tabla 1, se muestran algunas de sus propiedades físicas y termodinámicas.

Tabla 1. Propiedades físicas y termodinámicas del propileno (3-5).

Propiedad	Valor
Masa molecular (g/mol)	42,08
Punto de ebullición (°C)	-47,70
Punto de fusión (°C)	-185,25
Temperatura crítica (°C)	91,76
Presión crítica (MPa)	4,62

Tabla 1 (Continuación). Propiedades físicas y termodinámicas del propileno (3-5).

Propiedad	Valor
Densidad a 20°C y 1 atm (g/cm ³)	0,58
Densidad relativa del gas (aire=1)	1,49
Solubilidad en agua (mg/l)	384,00
Presión de vapor a 20°C (bar(a))	10,20
Entalpía vaporización a 1 atm (kJ/mol)	18,42
Entalpía de formación a 25°C (kJ/mol)	20,43
Temperatura de auto-inflamación (°C)	485,00
Límite inferior de inflamabilidad a 1 bar y 20°C (%vol)	2,00
Límite superior de inflamabilidad a 1 bar y 20°C (%vol)	11,10

4.1.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud

Al manipular el propileno, se deben tomar precauciones de modo que se eviten incendios y riesgos para la salud. Esta sustancia es muy volátil, y puede almacenarse tanto como líquido a presión, así como también, a temperatura ambiente en tanques de almacenamiento construidos siguiendo el código ASME para recipientes a presión (*ASME Code for Unfired Pressure Vessels*). Los tanques y tuberías deben ser de acero y seguir las normas ANSI (4).

En ciertos países, como Estados Unidos y Bélgica, existe una red de gasoductos por la cual se puede transportar el propileno. En otros países se transporta por carretera y ferrocarril, en tanques presurizados a temperatura ambiente, y por barco, utilizando tanques presurizados pequeños o tanques atmosféricos grandes con dispositivos de licuefacción (3).

Los requerimientos de calidad impuestos al propileno dependerán de su aplicación. Generalmente, se emplean dos calidades: el propileno de grado químico, con una pureza entre el 92-95%, y el propileno de grado polimérico, con una pureza entre el 99,50-99,80%. Por lo tanto, de acuerdo con el uso del propileno, las concentraciones de impurezas variarán (3). No obstante, para el ámbito del presente proyecto, el propileno se considerará como un compuesto puro. Es importante resaltar que el propileno tiene propiedades anestésicas y puede causar asfixia si se encuentra en concentraciones elevadas. Su evaporación puede producir quemaduras cutáneas. En condiciones normales, el propileno es un gas inflamable, por lo que presenta peligro de explosión (4).

4.2. Helio

En 1868, el astrónomo Pierre Janssen, descubrió por primera vez el helio en la atmósfera gaseosa alrededor del Sol, pero fue en 1895 que el químico Sir William Ramsay descubrió este elemento en la Tierra. Después del hidrógeno, el helio es el segundo elemento más abundante en el universo, constituyendo el 23% de su masa, sin embargo, en la atmósfera terrestre solo existe en pequeñas cantidades. Generalmente, este elemento se obtiene de la desintegración espontánea de sustancias radiactivas, si bien grandes volúmenes de helio se han encontrado en gases naturales de Estados Unidos (6).

El helio se emplea como gas inerte en la soldadura de metales, para presurizar tanques de combustible en la propulsión de cohetes, para inflar globos y llenar dirigibles, y en actividades de respiración a altas presiones como el buceo. También, tiene aplicaciones a temperaturas muy bajas, como, por ejemplo, el desarrollo de la superconductividad (6-7). En el proceso de producción de acroleína del presente proyecto, el helio se utiliza como gas inerte con el objetivo de mantener los reactivos en sus proporciones adecuadas y evitar el riesgo de explosión por superar el límite inferior de inflamabilidad del propileno.

4.2.1. Propiedades físicas y termodinámicas

El helio es un gas noble, de símbolo He y número CAS 7440-59-7. Es un gas incoloro, inodoro, insípido e incombustible, sus propiedades físicas y termodinámicas más resaltantes se muestran a continuación en la Tabla 2.

Tabla 2. Propiedades físicas y termodinámicas del helio (7-10).

Propiedad	Valor
Masa molecular (g/mol)	4,00
Punto de ebullición (°C)	-268,90
Punto de fusión (°C)	-272,20
Temperatura crítica (°C)	-268
Presión crítica (psia)	33,22
Densidad a 20°C (g/cm ³)	0,18·10 ⁻³
Densidad relativa del gas (aire=1)	0,14
Viscosidad absoluta (cP)	0,02
Solubilidad en agua (mg/l)	1,50
Entalpía vaporización a -268,90 °C (J/kg)	23.300,00
Temperatura de auto-inflamación (°C)	No inflamable
Límite inferior de inflamabilidad a 1 bar y 20 °C (%vol)	No inflamable
Límite superior de inflamabilidad a 1 bar y 20 °C (%vol)	No inflamable

4.2.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud

Los recipientes destinados al almacenamiento del helio deben diseñarse según el código ASME. No se requieren materiales de construcción especiales puesto que el helio no es una sustancia corrosiva, si bien, deben ser apropiados para las condiciones de presión y temperatura a las que se almacene (8). El helio se puede transportar tanto en fase gas como en fase líquida. El helio gaseoso debe distribuirse en recipientes cilíndricos, contruidos con acero forjado o aleaciones de aluminio, a presiones en un rango de 60 a 410 atm. Por otro lado, para licuar el gas, el helio gaseoso debe pasar por una serie de intercambiadores de calor y expansores, hasta que su temperatura descienda a -270 °C, aproximadamente. El helio líquido se transporta en dos recipientes cilíndricos, uno dentro del otro, en el cual el espacio entre ellos contiene aislante para retardar pérdidas de calor. En estos casos, ciertos materiales, como el acero al carbono no son recomendables debido a que se fracturan a bajas temperaturas (8, 11).

La Asociación de Gas Comprimido (CGA por sus siglas en inglés) determina estándares de clasificación para el helio, basados en la cantidad y tipo de impurezas que contenga. El helio se puede comercializar a partir del grado M, con una pureza del 99,995%. Existen grados superiores, como el grado N, grado P y grado G, este último tiene una pureza del 99,9999%. Por lo tanto, para el ámbito del presente proyecto, se considerará el helio como un compuesto puro (11).

El helio no es una sustancia tóxica ni reacciona con otros compuestos en condiciones normales. Sin embargo, su inhalación en cantidades excesivas puede provocar asfixia, debido a que el helio desplaza al oxígeno del aire a niveles inferiores a los necesarios para las personas. También, puede causar mareos, náuseas, vómitos, pérdida de conocimiento y la muerte. La piel y los ojos pueden congelarse al establecerse contacto con el helio líquido (7-8).

4.3. Aire

El aire se compone de nitrógeno en un 78%, de oxígeno en un 21%, argón en un 0,93%, dióxido de carbono en un 0,035% y pequeñas cantidades de otros gases que conforman el porcentaje restante, entre los que se encuentran el neón, el helio y el criptón. El nitrógeno es un gas inerte, a diferencia del oxígeno que reacciona con facilidad (12).

En el proceso de producción de acroleína, se lleva a cabo la oxidación del propileno, por lo que es necesario el oxígeno como materia prima del proceso. Sin embargo, se ha decidido utilizar aire y tomarlo directamente del ambiente, en lugar de operar con oxígeno puro. Permitiendo disminuir los costes de operación, no solo evitando el gasto en la compra el oxígeno puro, sino que también permite la introducción de inertes necesarios para trabajar de forma segura, dado a los límites de inflamación del propileno.

4.3.1. Propiedades físicas y termodinámicas

A continuación, en la Tabla 3 se resumen algunas de las propiedades físicas y termodinámicas del aire.

Tabla 3. Propiedades físicas y termodinámicas del aire (13).

Propiedad	Valor
Masa molecular (g/mol)	28,97
Punto de ebullición a 1 bar (°C)	-194,40
Temperatura crítica (°C)	-140,52
Presión crítica (bar)	37,86
Densidad a 0°C y 1 bar(a) (kg/m ³)	1,28
Densidad relativa del gas (aire=1)	1,00
Viscosidad dinámica a 0°C y 1 bar(a) (cP)	1,72·10 ⁻²

4.3.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud

Como se expuso anteriormente, el aire tiene múltiples componentes, no obstante, para el proceso de producción de acroleína se considerará que su composición es de 79% nitrógeno y 21% oxígeno. No será necesario el almacenamiento de esta materia prima dado que será obtenido del propio ambiente sin necesidad de contactar con proveedores, evitando de esta forma también costes de transporte.

Asimismo, el aire del ambiente puede contener partículas sólidas en suspensión, como polvo, o partículas líquidas, como neblina. Es recomendable separar estas partículas del aire, para lo cual se pueden emplear ciclones, filtros, precipitadores electrostáticos, entre otros. El uso de estos dispositivos permite mantener la calidad del aire necesaria para el proceso (1).

El aire está presente en toda la Tierra y es la fuente de oxígeno del ser humano por lo que no constituye ningún riesgo para la salud ni para la seguridad de la planta.

5. Producto: 2-propenal

Este compuesto, denominado por la IUPAC como 2-propenal, también nombrado en el presente proyecto como acroleína, es el aldehído insaturado más simple, se trata de un líquido incoloro, volátil y tóxico. Redtenbacher fue quien lo descubrió en 1843 y su producción comercial empezó en 1942 por Degussa, mediante la condensación en fase gas catalizada de acetaldehído y formaldehído. Sin embargo, hoy en día la producción es mayoritariamente obtenida mediante la oxidación catalítica del propileno. Este compuesto es un intermediario importante para numerosas sustancias como la DL-metionina y el ácido acrílico (1).

Su característica principal es su alta reactividad, debido a la conjugación del grupo carbonilo con un grupo vinilo. La estructura del compuesto se muestra en la Figura 1.

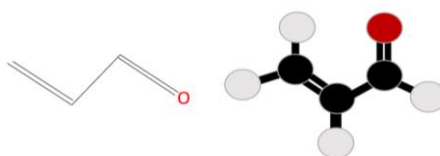


Figura 1. Estructura de la acroleína. Elaboración propia adaptado de (14).

Asimismo, su conjugados de vinilo y aldehído también aumenta la reactividad de la sustancia. Cabe destacar que de ocurrir la polimerización esta es altamente exotérmica (1).

5.1. Propiedades físicas y termodinámicas

La acroleína es un material altamente tóxico con propiedades lacrimógenas. Como se mencionó anteriormente es volátil e inflamable, a temperatura ambiente, es similar a la acetona respecto a estos parámetros, aunque a diferencia de la acetona, su solubilidad en agua es limitada. En la Tabla 4 se muestra algunas de las propiedades más relevantes de este compuesto (1).

Tabla 4. Propiedades físicas y termodinámicas de la acroleína (1).

Propiedad	Valor
Masa molecular (g/mol)	56,06
Punto de ebullición a 101,3 kPa (°C)	52,69
Punto de fusión (°C)	-86,95
Temperatura crítica (°C)	233,00
Presión crítica (MPa)	5,07
Densidad a 20°C (kg/l)	0,84
Densidad relativa del gas (aire=1)	1,28
Viscosidad 20°C (mPa·s)	0,35
Solubilidad en agua 20°C (g/kg)	260,00
Presión de vapor a 20°C (kPa)	29,30
Entalpía vaporización a 101,3 kPa (kJ/mol)	28,20
Entalpía de formación a 25°C (kJ/mol)	-74,50
Temperatura de auto-inflamación (°C)	234,00
Límite inferior de inflamabilidad a 1 bar y 20°C (%vol)	2,80
Límite superior de inflamabilidad a 1 bar y 20°C (%vol)	31,00

5.2. Propiedades químicas

La acroleína es altamente reactiva, debido a que tanto el doble enlace como los restos aldehídicos del compuesto participan en una variedad de reacciones. En las reacciones puede presentar tanto características de un aldehído como las de un compuesto insaturado. A continuación, se mostrarán el tipo de reacciones en las que participa junto con algunos ejemplos más relevantes (1, 15):

• Reacción Diels – Alder

Las reacciones Diels-Alder son aquellas que tienen lugar entre un dieno conjugado y un alqueno sustituido (que también pueden ser llamados dienófilos) para formar un derivado sustituido del ciclohexeno. La acroleína puede reaccionar como un dieno o un dienófilo. Cuando participa como dienófilo, por lo general son reacciones exotérmicas. Entre los compuestos que reaccionan rápidamente con la acroleína están los dienos como el ciclopentadieno y el 1-dietilamino-1,3-butadieno a temperatura ambiente.

Actuando como dieno y dienófilo, la acroleína se puede someter a la reacción Diels-Alder consigo misma para producir dímero de acroleína (*3,4-dihydro-2-formyl-2H-pyran*). Asimismo, la acroleína puede reaccionar como un 1,3-dieno. Este tipo de comportamiento ocurre cuando reacciona con dienófilo. De este tipo de reacciones destaca la formación de *3,4-dihydro-2-methoxy-2H-pyran*, mostrado en la Figura 2, mediante la reacción con metil vinil éter. Esta ocurre en los rangos de temperatura de 160 a 190 °C y con elevados rendimientos.

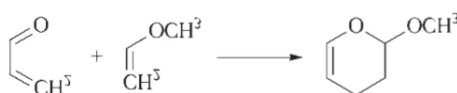


Figura 2. Ejemplo de una reacción Diels-Alder de la acroleína (1).

Por otro lado, este compuesto es utilizado para la producción de glutaraldehído, producto de alto interés comercial dado que se emplea para la producción de desinfectantes de equipos médicos y de laboratorio.

- **Adición al doble enlace carbono-carbono**

Debido a la presencia del grupo carbonilo, el átomo de carbono β se encuentra polarizado y se comporta como un electrófilo. De forma que los reactivos nucleofílicos se agregan con facilidad al doble enlace en presencia de catalizadores ácidos o básicos. Hay una larga lista de compuestos que pueden añadirse a la acroleína, como son los alcoholes, ácidos orgánicos e inorgánicos, tioles, aminas, entre otros. Se muestra en la Figura 3 ejemplos de dichas reacciones.

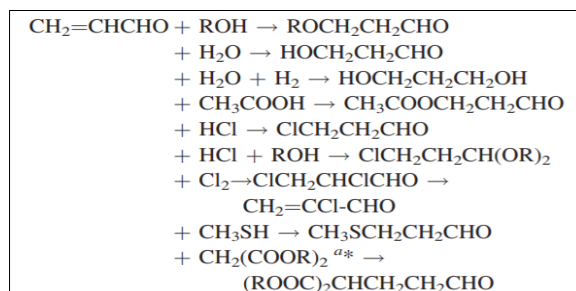


Figura 3. Ejemplo de reacciones que ocurren dado al doble enlace carbono-carbono de la acroleína (1).

Sin embargo, la más relevante industrialmente es la formación de 3-(metiltio) propionaldehído dado que se emplea en la síntesis del aminoácido esencial D, L-metionina.

- **Grupo aldehído**

En este tipo de reacción ocurre la acetalización. Particularmente, se producen derivados de cíclicos del acetal mediante la adición de ciertos glicoles y polioles a la acroleína. Estas reacciones pueden alcanzar altos rendimientos.

Cabe destacar, que los acetales de acroleína son valiosos intermediarios en la industria. Se ha aumentado el interés en estos compuestos en los últimos años dado que permiten un transporte seguro de la acroleína, sobre todo el 2-vinil-1,3-dioxolano. Estos acetales pueden ser transformados nuevamente en acroleína fácilmente en soluciones ácidas acuosas. Es por ello que, en concreto, se usan como herbicidas acuáticos y para eliminar el sulfuro de hidrógeno del agua residual de los campos petrolíferos.

- **Reacción simultánea del aldehído y grupos de vinilo.**

Asimismo, la condensación de acroleína y amoníaco sobre catalizadores multicomponente de Al_2O_3 o SiO_2 permite producir un 45% de 3-metilpiridina con un 20-25% de piridina como subproducto. Esta reacción, se lleva a cabo en un reactor de lecho fluidizado, por lo que es una de las rutas de síntesis universal de piridinas.

- **Reducción**

En fase vapor, la acroleína con alcohol isopropílico, en presencia de un catalizador de óxido de metal, produce el alcohol alílico. Esta reacción alcanza un rendimiento de 90,4% a una temperatura entre 300 - 500 °C.

- **Oxidación**

Este compuesto es fácilmente oxidado a ácido acrílico, normalmente se lleva a cabo en una mezcla gaseosa con aire, vapor y catalizadores, como con óxidos de molibdeno y vanadio. Cabe destacar que prácticamente todo el ácido acrílico formado en la industria proviene de la acroleína después de la reacción del propileno. Además, se puede llevar a cabo la formación directa de ésteres de ácido acrílico por oxidación de acroleína en la presencia de alcoholes inferiores. De esta forma se evita la intermediación del ácido acrílico.

• Polimerización

La acroleína puede polimerizarse con facilidad al ser calentada, expuesta a la luz o mediante la presencia de iniciadores. Las propiedades del polímero formado dependen de las condiciones operación mediante las que se elaboró, así como del tipo de iniciador. Alguno de los polímeros que se pueden formar se muestran en la Figura 4.

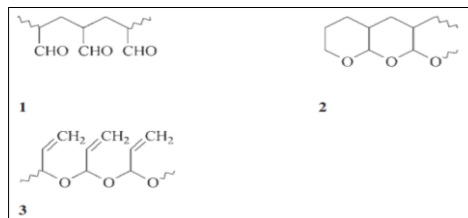


Figura 4. Polímeros obtenidos mediante la acroleína (1).

Estos polímeros son insolubles e infusibles en los disolventes comunes. Sin embargo, la mayoría de los derivados de poliacroleína son solubles en disolventes orgánicos y hasta en agua. Actualmente, estos polímeros han ganado interés debido a su actividad biocida. Cabe destacar, que el compuesto activo es estos biocidas es la acroleína, la cual es lentamente liberada del polímero. Además, las microesferas de poliacroleína pueden ser utilizadas en el área de nanotecnología.

5.3. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud

Comercialmente, la acroleína siempre se almacena con hidroquinona y ácido acético como inhibidores. Se requiere especial cuidado en la manipulación debido a la inflamabilidad, reactividad y toxicidad de la acroleína. A la hora de almacenarlo hay que considerar el inhibidor y evitar su destrucción. Además, no se debe almacenar en la presencia de una capa de agua. La acroleína suele comercializar con una pureza del 95 y 97% en peso. En la Tabla 5 se muestran los límites en porcentajes en peso aceptados de las impurezas.

Tabla 5. Límite de impurezas para la venta de acroleína. Elaboración propia, adaptada de (1, 16).

Componente	Límite (% en peso)
Impurezas de bajo punto de ebullición	2
Agua	4

Para asegurar la estabilidad, el pH de una solución al 10% v/v de acroleína en agua debe ser menor a 6, y los materiales de construcción más adecuados son el acero inoxidable y el aluminio. Asimismo, los tanques de almacenamiento deben tener un monitoreo de la temperatura con alarmas para detectar el inicio de reacciones no deseadas. Se recomienda una temperatura de almacenamiento inferior a 38 °C (1). Los peligros más frecuentes están relacionados con su toxicidad aguda por inhalación e irritación ocular y dado su alta volatilidad, incluso un derrame pequeño puede provocar una situación peligrosa.

Las concentraciones de vapor de acroleína tan bajas como 0,25 ppm pueden irritar el tracto respiratorio y causar tos, secreción nasal y malestar en el pecho. Si la concentración aumenta entre 2 a 4 ppm empieza a ser intolerable para la mayoría de las personas, mientras que a mayores concentraciones se considera inmediatamente peligrosa para la vida y la salud. Inhalar acroleína a altas concentraciones puede ocasionar daños en los pulmones y si se prolonga el tiempo de exposición puede ser letal (1).

6. Subproductos

6.1. Ácido acrílico

El ácido acrílico, también llamado ácido propenoico, es un ácido carboxílico moderadamente fuerte. Este compuesto es un líquido incoloro que se preparó por primera vez en 1847 mediante

oxidación con aire de acroleína. Se producía industrialmente a través de diversas rutas, como la hidrólisis de acrilonitrilo. Sin embargo, se han sustituido casi por completo por la oxidación catalítica del propileno a través de la acroleína. Se emplea principalmente como intermedio en la producción de acrilatos. En la década de 1980 empezó el aumento en su demanda, siendo usado sus polímeros para nuevas aplicaciones como superabsorbente en pañales y en la industria de los detergentes (1, 15).

6.1.1. Propiedades físicas y termodinámicas

A continuación, en la Tabla 6 se resumen algunas de las propiedades físicas y termodinámicas del ácido acrílico.

Tabla 6. Propiedades físicas y termodinámicas del ácido acrílico (17).

Propiedad	Valor
Masa molecular (g/mol)	72,06
Punto de ebullición (°C)	141,00
Punto de fusión (°C)	13,00
Temperatura crítica (°C)	342,00
Presión crítica (atm)	56,00
Densidad a 30°C (g/cm ³)	1,04
Densidad relativa del gas (aire=1)	1,02
Viscosidad a 20 °C (cP)	1,19
Solubilidad en agua (g/l)	1.000,00
Presión de vapor a 20°C (kPa)	1,03
Entalpía vaporización a 27°C (kJ/mol)	27,80
Entalpía de combustión a 25°C (kJ/mol)	1.376,00
Temperatura de auto-inflamación (°C)	412,00
Límite inferior de inflamabilidad en aire a 1atm (%vol)	2,40
Límite superior de inflamabilidad en aire a 1atm (%vol)	17,00

6.1.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud

El ácido acrílico normalmente se estabiliza con inhibidores como fenotiazina, hidroquinona o hidroquinona para evitar la formación de subproductos. Dado a que los inhibidores fenólicos solo son efectivos en presencia de oxígeno, se debe almacenar con aire. Para un manejo seguro de este compuesto se requiere el uso de equipo de protección especial, como guantes de goma, gafas y máscaras a prueba de vapor. Además, para prevenir la polimerización normalmente contiene entre 50 a 500 ppm de un inhibidor. Por ejemplo, se recomienda una concentración de 200 ppm si se emplea mequinol. Hoy en día este compuesto se fabrica a gran escala y está disponibles en purezas elevadas entre 98–99% (17).

Además, ha de tenerse en cuenta la temperatura y la humedad dado que altas temperaturas iniciarían la formación de peróxidos y otros productos, mientras que la humedad podría provocar una polimerización. Se debe tratar de mantener el ácido en estado líquido para permitir que el inhibidor se distribuya uniformemente. Cabe destacar, que el ácido acrílico tiene un punto de congelación alto, de 13 °C, y una vez congelado el inhibidor puede no inhibir la fase líquida (17).

En caso de que se diera la congelación del compuesto es importante que la fusión se realice a temperatura ambiente, 25 °C aproximadamente, y que en ningún momento se someta a temperaturas elevadas. Por otro lado, si se desea transportar o almacenar ácido acrílico puro, este debe mantenerse parcialmente cristalino durante toda la duración del transporte o almacenamiento. Asimismo, debido a la alta corrosividad debe almacenarse en equipos revestidos

o fabricados con vidrio, polietileno, polipropileno o acero inoxidable. La temperatura debe mantenerse entre 15 y 30 °C y alejarlo de la luz solar directa.

En cuanto a salud, el ácido acrílico puede quemar las membranas mucosas y subyacentes tejidos cuando se inhala o ingiere, aun en bajas concentraciones. Además, el contacto con el líquido puede causar quemaduras graves y daño ocular permanente. La Conferencia Americana de Industria Gubernamental Higienistas (ACGIH) tiene un valor límite de umbral de 2 ppm para una base promedio ponderada en el tiempo de ocho horas con piel notación (17).

6.2. Acetaldehído

El acetaldehído, también conocido como etanal, es un aldehído que se obtiene por la hidratación de acetileno, por oxidación de etanol o por la oxidación de etileno. Esta última vía de producción es la más utilizada en la actualidad. También, se puede obtener como subproducto en múltiples procesos, en los que se incluye la oxidación del propileno para la producción de acroleína (1).

Corresponde a un compuesto con múltiples aplicaciones gracias a su alta reactividad. Se utiliza como materia prima para la síntesis de ácido acético, anhídrido acético, acetato de etilo, butanol, alquilaminas, piridinas, entre otras sustancias. También, se emplea para la producción de aromatizantes, perfumes, colorantes, plásticos y resinas de poliéster (1, 18).

6.2.1. Propiedades físicas y termodinámicas

El acetaldehído, cuya fórmula molecular es C_2H_4O y número CAS 75-07-0, es un líquido incoloro que tiene un olor caracterizado por ser penetrante y sofocante, ligeramente afrutado cuando se encuentra diluido. En la Tabla 7, se agrupan algunas de sus propiedades físicas y termodinámicas (1).

Tabla 7. Propiedades físicas y termodinámicas del acetaldehído (1, 15, 19).

Propiedad	Valor
Masa molecular (g/mol)	44,05
Punto de ebullición a 1 atm (°C)	20,16
Punto de fusión (°C)	-123,50
Temperatura crítica (°C)	181,50
Presión crítica (MPa)	6,44
Densidad a 18°C (g/cm ³)	0,78
Densidad relativa del gas (aire=1)	1,52
Viscosidad a 20°C (cP)	0,21
Solubilidad en agua (mg/mL)	0,10 - 1,00
Presión de vapor a 50°C (kPa)	279,40
Entalpía vaporización a 20,2°C (kJ/mol)	25,73
Entalpía de formación a 25°C (kJ/mol)	-166,47
Temperatura de auto-inflamación (°C)	185,00
Límite inferior de inflamabilidad (%vol)	4,50
Límite superior de inflamabilidad (%vol)	60,50

6.2.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud

Los recipientes utilizados para almacenar el acetaldehído deben ser construidos con acero, estar a una temperatura menor a 20 °C, y contener termómetros y rociadores de agua. Estos recipientes tienen que colocarse en un lugar con ventilación y sin establecer contacto directo con la luz solar. Además, no deben tener cerca fuentes de ignición, de calor o de agentes oxidantes (20).

El acetaldehído si se encuentra en estado líquido no es corrosivo para la mayoría de los metales, no obstante, si se encuentra en fase gas se oxida con gran facilidad. Esta sustancia se suele transportar por carretera, en bidones de acero, o por vía férrea mediante vagones cisterna (15).

Para su comercialización, el acetaldehído debe cumplir con especificaciones que incluyen tener una pureza superior al 99,50%. Entre las sustancias que están presentes como impurezas se pueden mencionar el crotonaldehído, aldol, propanal, acetona, paraldehído y ácidos (21).

Este compuesto reacciona con facilidad con muchas sustancias químicas. Propiamente el acetaldehído no es corrosivo para los metales, pero debido a que se oxida rápidamente, forma ácido acético que si resulta ser corrosivo. Hay riesgo de incendio y de explosión si el acetaldehído reacciona con ácidos, hidróxido de sodio, metales, e incluso con materiales oxidados (20).

Si se inhala el acetaldehído gas puede tener diferentes riesgos dependiendo de su concentración. En caso de encontrarse en bajas concentraciones, causa irritación en las vías respiratorias, mientras que si se encuentra en altas concentraciones afecta al sistema nervioso, causando mareos, pérdidas de conocimiento e incluso parálisis respiratorias. El contacto directo con el acetaldehído líquido irrita la piel y puede causar dermatitis, en los ojos causa lagrimeo y visión borrosa. Si esta sustancia se ingiere causa alteraciones nerviosas, y solo en el caso de que sea consumido en grandes cantidades puede ser tóxico (20).

6.3. Ácido acético

El ácido acético es una sustancia muy conocida desde hace muchos años, debido a su presencia, en forma diluida, en muchos sistemas vegetales y animales. Un ejemplo muy conocido es el vinagre, que contiene entre un 4 y un 12% de este compuesto, y que se produce a través de la fermentación del vino. Las rutas de producción de ácido acético en la industria química incluyen la carbonilación del metanol y la oxidación en fase líquida de butano, nafta o acetaldehído. Siendo la primera mencionada, la preferida a escala industrial (1).

Este compuesto tiene diversas aplicaciones. No obstante, las más importantes corresponden a la producción de acetato de vinilo y de anhídrido acético. De hecho, más del 65% del ácido acético producido a nivel mundial se emplea para la fabricación de polímeros derivados del acetato de vinilo o de ésteres de celulosa (1).

6.3.1. Propiedades físicas y termodinámicas

El ácido acético, de fórmula molecular CH_3COOH y número CAS 64-19-7, es un líquido incoloro y corrosivo, caracterizado por tener un olor acre y ser una sustancia vesicante. A continuación, en la Tabla 8, se reúnen algunas de sus propiedades físicas y termodinámicas (1).

Tabla 8. Propiedades físicas y termodinámicas del ácido acético (1, 22).

Propiedad	Valor
Masa molecular (g/mol)	60,05
Punto de ebullición a 1 atm (°C)	117,90
Punto de fusión (°C)	16,60
Temperatura crítica (°C)	321,45
Presión crítica (MPa)	5,79
Densidad a 20°C (g/cm ³)	1,05
Densidad relativa del gas (aire=1)	2,07
Viscosidad a 20°C (cP)	11,83
Solubilidad en agua a 23°C (mg/ml)	100,00
Presión de vapor a 20°C (mmHg)	11,40
Entalpía vaporización a 117,90°C (kJ/mol)	23,70
Entalpía de formación a 25°C (gas) (kJ/mol)	-432,25
Temperatura de auto-inflamación (°C)	465,00

Tabla 8 (Continuación). Propiedades físicas y termodinámicas del ácido acético (1, 22).

Propiedad	Valor
Límite inferior de inflamabilidad (%vol)	4,00
Límite superior de inflamabilidad (%vol)	16,00

6.3.2. Almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud

El ácido acético es una sustancia catalogada como corrosiva e incluso inflamable. Por lo tanto, esta sustancia se debe almacenar en lugares frescos, secos y sin entrar en contacto con materiales oxidantes. Se pueden utilizar recipientes revestidos con acero inoxidable, vidrio, polietileno o aluminio para su almacenamiento, y se debe evitar que el ácido acético se contamine con agua o con mercurio, debido a que estos aceleran la corrosión. Los recipientes destinados a su almacenamiento, aun estando vacíos, deben permanecer etiquetados por si existen cantidades residuales de este ácido en su interior (1).

Empleando dichos contenedores revestidos se puede transportar el ácido acético por carretera. Además, pueden ser empleados camiones cisterna para su transporte. También, se puede trasladar esta sustancia por ferrocarril o por avión, existiendo un límite de 1 litro o de 30 litros, dependiendo si son medios de transportes de pasajeros o de carga. Y, debido a que el ácido acético tiene un punto de fusión bajo, si se almacena o transporta en lugares de clima frío, los recipientes deben equiparse con medios de calefacción para evitar que el ácido cristalice (1).

Con respecto a los requerimientos de calidad necesarios para la venta del ácido acético, estos variarán de acuerdo al país donde se comercialice la sustancia y de los usos finales a los que se destine. Por ejemplo, en Estados Unidos solo existe un grado comercial del ácido acético, mientras que en otros países existen tres o más grados diferenciados por las cantidades presentes de metales pesados, cloruros, sulfatos, arsénico y hierro. Otra de las especificaciones importantes es el tiempo de permanganato, que corresponde a un método para medir impurezas oxidables. Por otro lado, en cuanto a sus usos finales, si se destina a la producción de acetato de vinilo, la presencia de haluros será importante y se valorará en su composición (1).

Se debe tener precaución al manipular el ácido acético. Esta sustancia irrita los ojos, la nariz y la garganta si se encuentra por encima de 10 ppm, si se entra en contacto repetidamente con el ácido acético a 26 ppm puede provocar efectos adversos, y si se encuentra por encima de 100 ppm puede afectar a órganos como el hígado y cerebro. En caso de entrar en contacto con esta sustancia, si se encuentra muy concentrada puede ser muy dañina para la piel, por lo que se debe lavar la zona con abundante agua. Si se ingiere ácido acético por vía oral, le causará a la persona dolores en el tracto digestivo y en la boca. Además, le puede producir vómitos, dificultad respiratoria y circulatoria (1).

7. Estudio de mercado

7.1. Propileno

Es importante tener una visión general sobre el mercado del propileno, puesto que se trata de una de las materias primas del proceso de producción de acroleína. Para ello, a continuación, se resumen datos de importación y exportación de este compuesto, los precios a los que se comercializa, las principales empresas que lo producen y las perspectivas futuras de su mercado.

7.1.1. Importación y exportación

Las importaciones y exportaciones del propileno no han seguido una tendencia estable, sino que han sufrido subidas y bajadas importantes desde el año 2011 hasta el 2019, como se puede ver en la Figura 5. Con los datos más recientes, que corresponden al año 2019, se tiene que las importaciones del propileno a nivel mundial alcanzan los 7,8 miles de millones de dólares, mientras que las exportaciones están por debajo, alrededor de los 6,6 miles de millones de dólares (23).

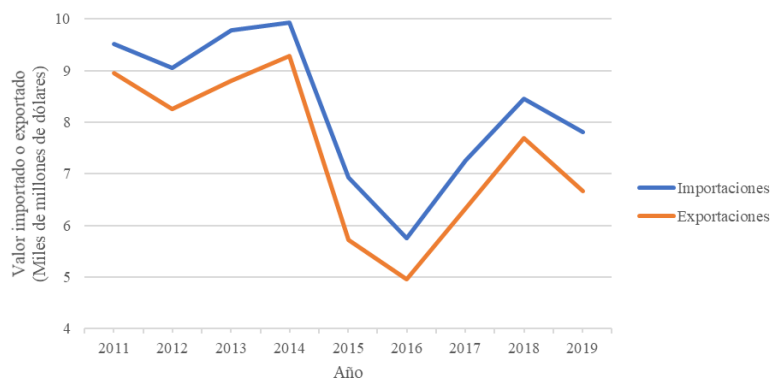


Figura 5. Evolución de las importaciones y exportaciones del propileno a nivel mundial. Elaboración propia, a partir de (23).

Como se puede observar en la Figura 6, los continentes que lideran las importaciones del propileno son Asia y Europa, con porcentajes de participación muy similares. A estos continentes les sigue América, y por último África y Oceanía en donde las actividades de importación no son representativas. En cuanto a los principales países involucrados en la importación del propileno son China, Alemania y Bélgica (23).

En el caso de las exportaciones del propileno, como se puede observar en la Figura 7, la situación es parecida a la expuesta anteriormente sobre las importaciones. Los principales continentes exportadores de propileno son Asia y Europa, seguidos por América. Se puede notar que tanto Asia como Europa importan más propileno de lo que exportan, a diferencia de América donde ocurre lo contrario. En este caso, la República de Corea, Países Bajos y Japón lideran las exportaciones de este compuesto (23).

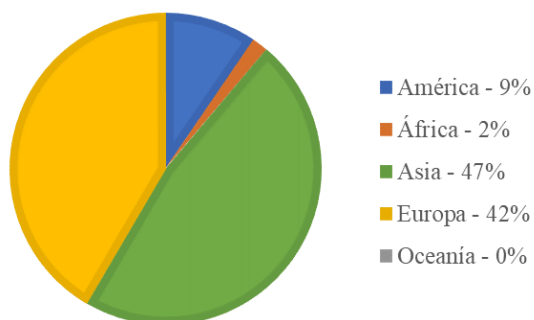


Figura 6. Participación por continentes en las importaciones del propileno para el año 2019. Elaboración propia, a partir de (23).

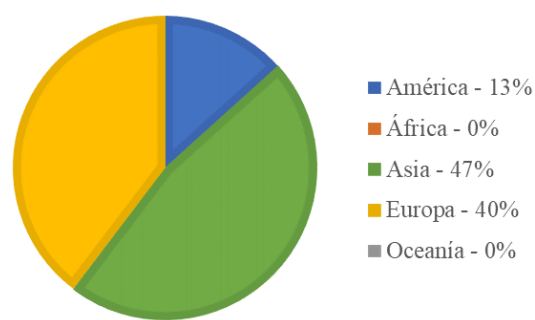


Figura 7. Participación por continentes en las exportaciones del propileno para el año 2019. Elaboración propia, a partir de (23).

7.1.2. Precios

El precio del propileno no es una cantidad que se mantiene estable a lo largo de los años, sino que varía dependiendo de diversos factores, entre los que se encuentra el precio de la materia prima a partir de la cual se obtiene (24). En términos generales, el precio del propileno experimentó un descenso en el año 2019 con respecto al año anterior (25). No obstante, en la Figura 8 se incluyen precios más recientes del propileno y se puede notar que desde julio de 2020 hasta enero de 2021 ha aumentado significativamente, alcanzando un precio de 1.155 dólares por tonelada (26).



Figura 8. Evolución del precio de propileno. Adaptada de (26).

7.1.3. Empresas del sector

Las empresas implicadas en el mercado del propileno a nivel mundial son varias, AGC Chemicals Company, Archer Daniels Midland (ADM), Asahi Kasei Corporation, BASF, Chevron Phillips Chemical Company y China National Petroleum Corporation (CNPC) destacan entre ellas (27).

En España, destaca Repsol con varios complejos petroquímicos que tienen gran importancia tanto a nivel nacional como continental. En el Complejo Industrial de Repsol ubicado en Tarragona se producen 380.000 toneladas anuales de propileno, en el ubicado en Puertollano se producen 110.000 toneladas anuales de propileno, y el ubicado en A Coruña recientemente se ha ampliado su producción anual a aproximadamente 81.000 toneladas (22-24). También, el Grupo BASF tiene presencia en España, y específicamente en La Canonja, Tarragona, a través de la empresa conjunta BASF SONATRACH Propanchem, tienen una capacidad de producción de 350.000 toneladas anuales de propileno (31).

7.1.4. Perspectivas futuras

El mercado del propileno a nivel mundial ha gozado de un crecimiento significativo, ya que desde el año 2015 posee una tasa de crecimiento anual compuesta (TCAC) del 2,95% y alcanzó un valor estimado de 83,7 mil millones de dólares en el año 2019. Sin embargo, se espera que para el año 2023 su mercado tenga un valor de 77,8 mil millones de dólares, esto es, que crezca con una TCAC negativa, del -1,81%. Las razones de estas perspectivas futuras se deben principalmente a las regulaciones de seguridad referentes a la fabricación y el transporte de este compuesto, limitando de gran manera su mercado. Debido a las características del propileno, compuesto muy inflamable y tóxico, los proveedores deben invertir en equipos y tecnologías nuevas, los cuales aumentan sus costos de operación y limitan el crecimiento del mercado (27).

Por otro lado, las petroquímicas están desarrollando nuevas tecnologías para la producción de propileno como producto principal y no como subproducto, con el objetivo de satisfacer su creciente demanda. En el año 2017, el consumo mundial de propileno superó los 100 millones de toneladas, y se espera que para el año 2025 su demanda mundial sea de 135 millones de toneladas. Es importante mencionar también que países como China, que actualmente es el principal importador de propileno como se expuso anteriormente, tiene como objetivo producir suficiente propileno para cubrir su propia demanda (27, 32).

7.2. Helio

Tal como se realizó con el propileno, también es importante considerar ciertos aspectos del mercado del helio, debido a que se necesita como gas inerte en el proceso de producción de acroleína. Datos de importación y exportación de este compuesto, los precios a los que se comercializa, las principales empresas que lo producen y perspectivas futuras de su mercado, se resumen a continuación.

7.2.1. Importación y exportación

En los países de la Unión Europea, el suministro del helio depende en su gran mayoría de las importaciones de otros países. De hecho, en la Figura 9 se puede observar que las cantidades de helio importado son considerablemente mayores a las cantidades de helio exportadas. Esto se puede explicar debido a que solo pocos países dentro de la Unión Europea producen helio, y corresponden a Polonia principalmente y a Alemania (33).

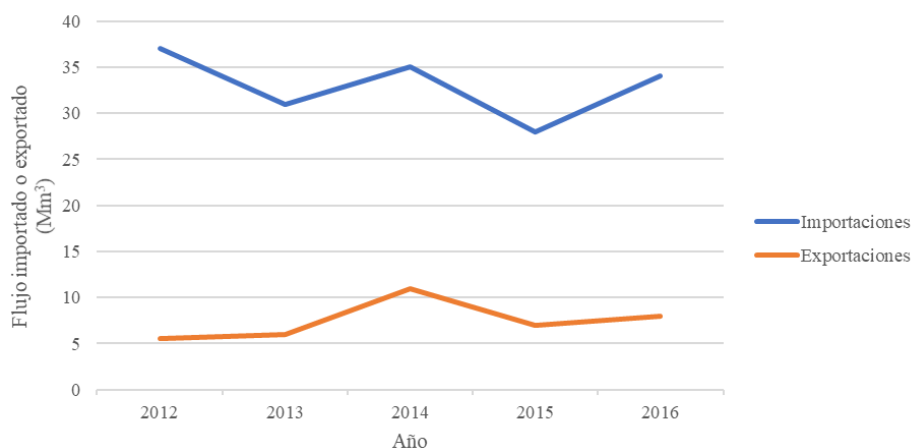


Figura 9. Evolución de las importaciones y exportaciones del helio en la Unión Europea. Elaboración propia, a partir de (33).

Las importaciones del helio en la Unión Europea provienen principalmente de Estados Unidos y de Argelia, a estos les sigue Qatar, y por último países de Europa que no forman parte de la Unión Europea como lo son Rusia y Reino Unido. Esto se puede observar en el gráfico de la Figura 10. Se estima que entre los años 2012 y 2016, las importaciones de helio en la Unión Europea fueron de 33,4 Mm³ en promedio (33).

A nivel mundial, los principales países involucrados en la producción del helio y que lideran las exportaciones de este gas son Estados Unidos, Qatar y Argelia, como se puede observar en la Figura 11. Entre los años 2012 y 2016, la producción media anual de helio a nivel mundial fue de 169,3 Mm³ aproximadamente (33).

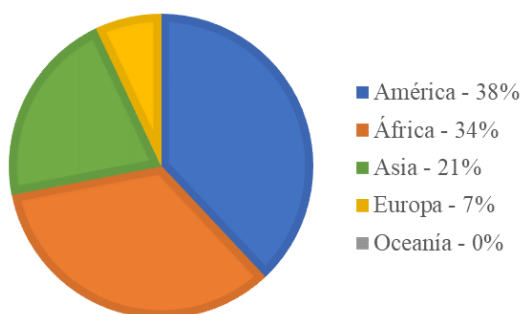


Figura 10. Importaciones del helio en la UE en el periodo 2012-2016. Elaboración propia, a partir de (33).

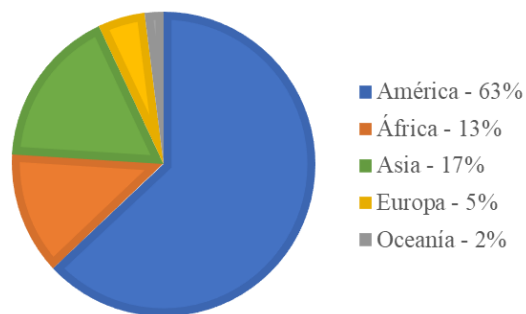


Figura 11. Producción del helio en la UE en el periodo 2012-2016. Elaboración propia a partir de (33).

7.2.2. Precios

Como se puede observar en la Figura 12, el precio del helio ha adoptado una tendencia creciente a lo largo de los años. De hecho, se duplicó en el periodo 1998-2018. También, se puede apreciar que entre los años 2014 y 2016 se produjo un aumento marcado en su precio, debido a las limitaciones que había en cuanto a su oferta, pero luego se estabilizó (33).

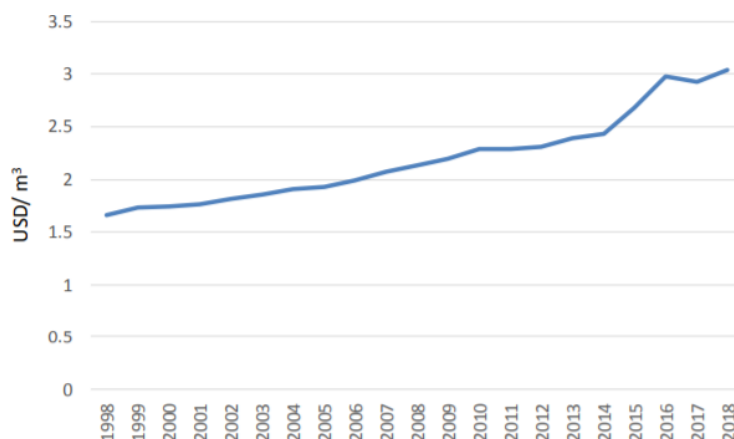


Figura 12. Evolución del precio del helio (33).

Para el año 2018, el precio del helio crudo para usuarios gubernamentales era de 3,10 USD/m³ y para usuarios no gubernamentales era de 4,29 USD/m³. Asimismo, en los países de la Unión Europea, entre los años 2012-2016, el precio unitario de las importaciones y exportaciones del helio fue de 1 €/m³ y 2,7 €/m³, respectivamente (33).

7.2.3. Empresas del sector

Existe una gran variedad de empresas involucradas en el mercado del helio a nivel mundial, pero son pocas las empresas dedicadas a su exploración y producción. Muchas de ellas surgieron en los últimos años y han provocado un aumento en su precio. Entre los principales productores de helio se encuentran Gazprom, Exxon, US Federal Helium Reserve, Qatargas, Sonatrach, PGNiG y Saudi Aramco. Por otro lado, destacan tres principales compradores del helio, que constituyen la mayor parte de su mercado mundial, los cuales son Linde, Air Liquide y Air Products & Chemicals (34).

En la Figura 13 se pueden apreciar los lugares en donde se produce este gas noble cercanos a España. En Europa destaca PGNiG ubicada en Odolanow, Polonia, y en el norte de África la empresa argelina Sonatrach, ubicada en Skikda y Arzew, que tiene acuerdos comerciales con la empresa española Naturgy (35).



Figura 13. Lugares donde se produce el helio (34).

7.2.4. Perspectivas futuras

El mercado del helio a nivel mundial alcanzó un valor de 10,6 mil millones de dólares en el año 2019, y se espera que su valor aumente en el futuro cercano. Ya para el año 2023 se estima que su mercado llegue a los 15,75 mil millones de dólares, con una tasa de crecimiento anual compuesta (TCAC) del 11% (36). Es cierto que la extracción y el transporte de helio resultan costosos, no obstante, las perspectivas futuras apuntan a que su mercado no dejará de crecer. Son diversas las aplicaciones de este gas noble que hacen que su demanda sea alta (33). Por otro lado, se espera que la oferta del helio crezca alrededor de un 5% en el período 2020-2025 en función de los proyectos planificados. Se estima que para el 2025, la producción de Estados Unidos

disminuirá y surgirán nuevas capacidades de producción de Rusia, Qatar, nuevos proyectos en América del Norte y Tanzania (34).

7.3. 2-propenal

7.3.1. Estudio de las aplicaciones

Entre las principales aplicaciones de la acroleína se encuentra la fabricación de ácido acrílico, así como también, la producción de metionina. Esta última es utilizada en la industria lechera ya que es un aminoácido limitante en las vacas lecheras. En menor medida, la acroleína también se utiliza para la fabricación de pesticidas, agentes de tratamiento de aguas, glutaraldehído, entre otros (37-38). En la Figura 14 se pueden observar, en porcentaje, las ventas de acroleína para la fabricación de los productos anteriormente mencionados.

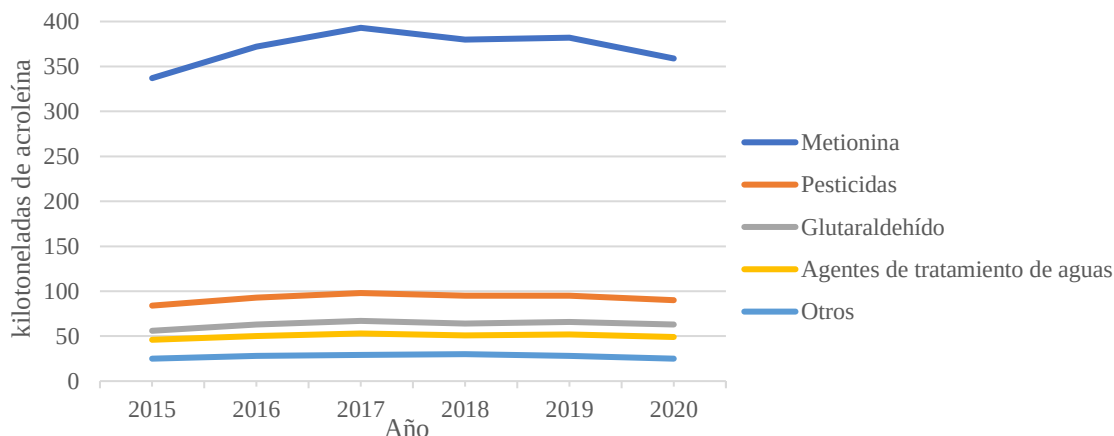


Figura 14. Ventas de acroleína por aplicación a nivel mundial. Elaboración propia, a partir de (38).

Se observa que una gran parte de la producción de acroleína va destinada a la producción de metionina. A nivel global, la producción de metionina consume el 61,23% del mercado. En la Figura 15 se muestra el pronóstico de dichas ventas para los años por venir.

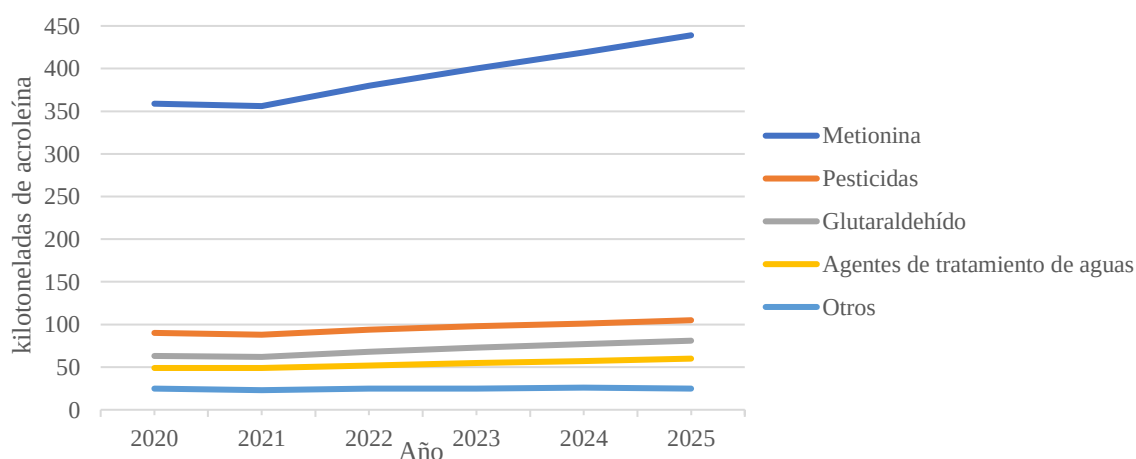


Figura 15. Pronóstico de las ventas de acroleína por aplicación a nivel mundial. Elaboración propia, a partir de (38).

Se observa un crecimiento claro en la producción de metionina, mientras que el resto de las aplicaciones se mantienen más o menos constantes en el tiempo. Por último, en la Figura 16 se muestran los datos de venta de acroleína para sus aplicaciones en el ámbito europeo.

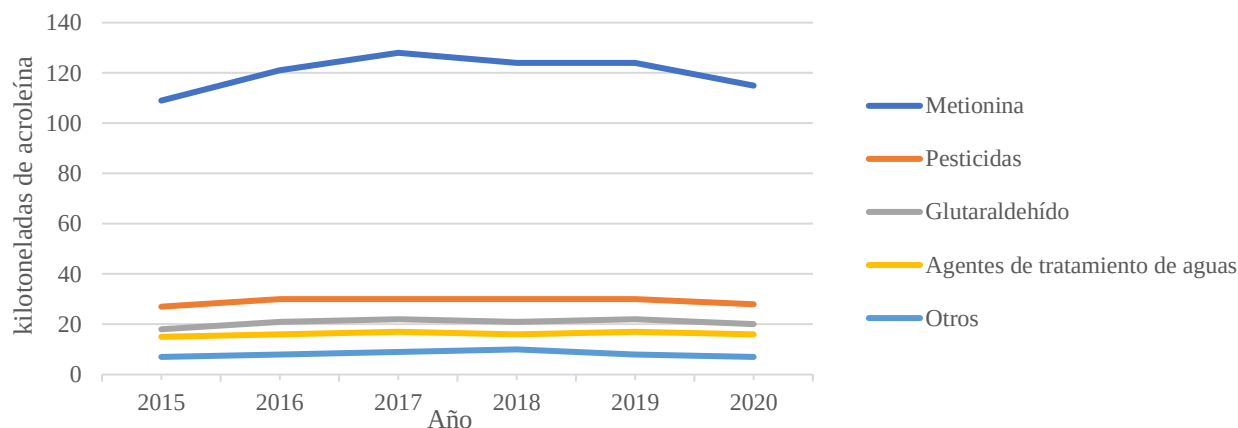


Figura 16. Ventas de acroleína por aplicación a nivel europeo. Elaboración propia, a partir de (38).

Como se puede observar, la metionina es el compuesto que destaca notoriamente respecto al resto. Se conoce que, en España, en la planta de Villalonquér se aumentará la producción de metionina un 15% para el 2021, con lo cual se aumentaría a su vez la demanda de acroleína (39).

7.3.2. Producción y consumo

Las ventas de acroleína a nivel mundial se posicionaron en un valor de 586 kilotoneladas para el año 2020 siendo un 31,85% de estas en el continente europeo. Se espera que el mercado de acroleína alcance un valor de 1.510 millones de dólares para el 2024 (38, 40). La acroleína se obtiene mayoritariamente por dos alternativas diferentes, oxidación del propileno y deshidratación de glicerina. En la Figura 17 se puede observar cómo varía la producción de acroleína a través de los años, según el tipo de alternativa empleada.

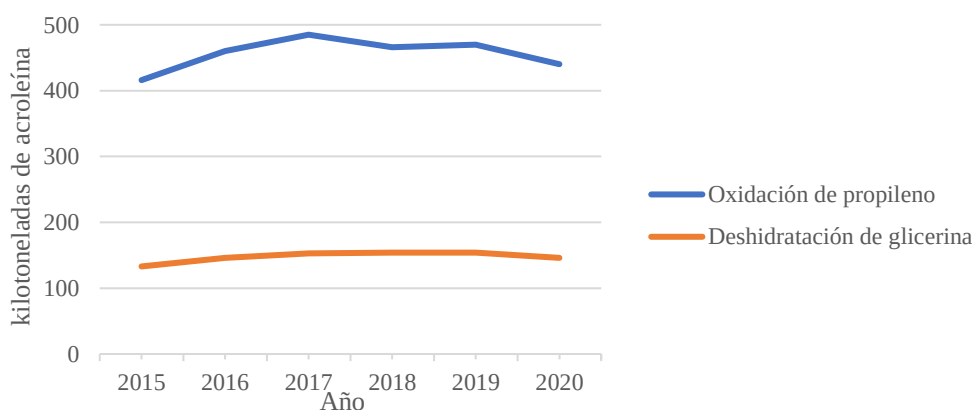


Figura 17. Ventas de acroleína producida por diferentes métodos a nivel mundial. Elaboración propia, a partir de (38).

Existe una gran diferencia entre la producción a partir de la oxidación de propileno y la deshidratación de glicerina, esto es debido a la facilidad que existe a la hora de conseguir propileno como materia prima. Seguidamente, en la Figura 18 se observa un pronóstico sobre la producción, utilizando los mismos métodos.

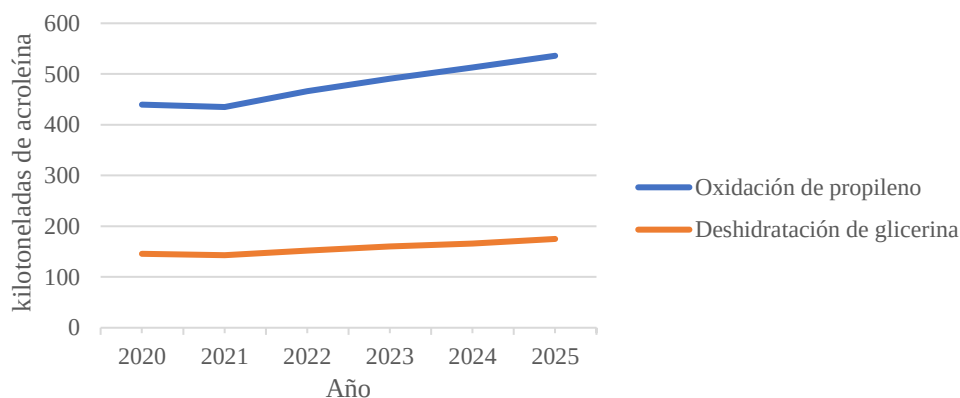


Figura 18. Pronóstico de las ventas de acroleína producida por diferentes métodos. Elaboración propia, a partir de (38).

Se puede observar claramente un crecimiento en las ventas del método de oxidación de propileno a partir del 2021. Por último, en la Figura 19 se muestran los datos europeos para los mismos métodos.

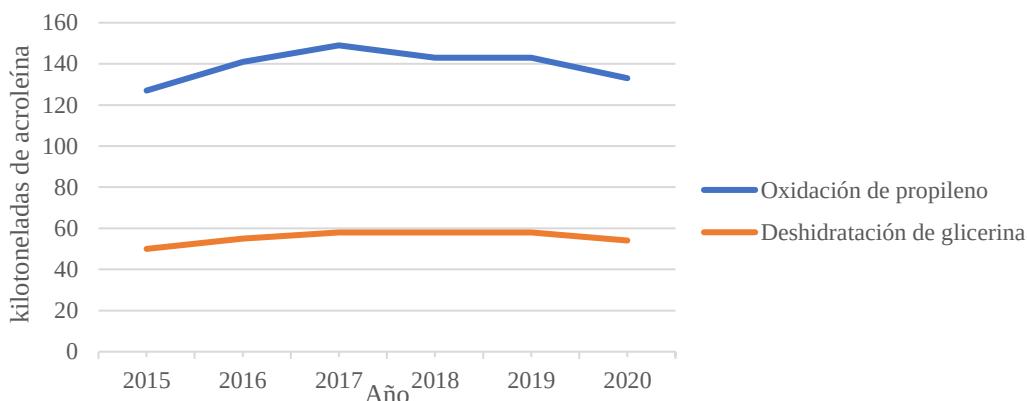


Figura 19. Ventas de acroleína producida por diferentes métodos a nivel europeo. Elaboración propia, a partir de (38).

Como en los casos anteriores, la oxidación de propileno es muy superior en ventas, en comparación a la deshidratación de glicerina.

7.3.3. Importación y exportación

Los mayores productores de acroleína a nivel mundial son Japón, Europa y Estados Unidos. Estos últimos esperan un crecimiento en la exportación en los años venideros. Por otra parte, China es la que presenta la mayor importación debido a su gran industria química y el crecimiento en la producción de plásticos en el país. En la Figura 20 se puede observar un gráfico de las ventas de acroleína por región, en el periodo de 2015 a 2020.

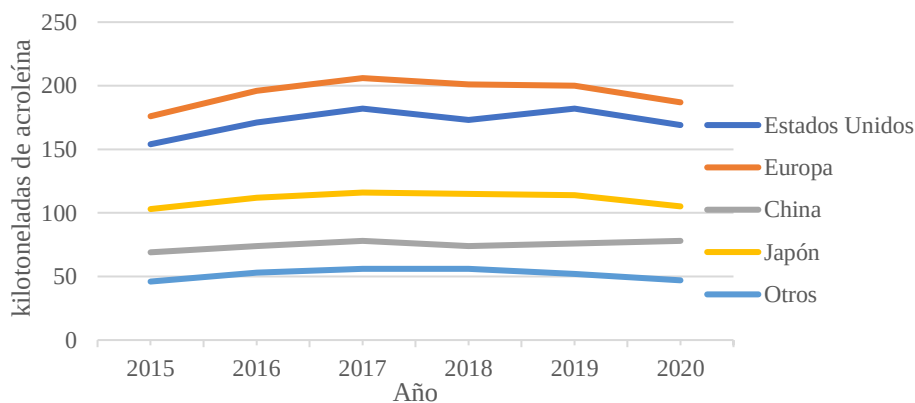


Figura 20. Ventas de acroleína a nivel mundial. Elaboración propia, a partir de (38).

Como se mencionó con anterioridad, el mayor productor es Europa, seguido de Estados Unidos y Japón. Se puede destacar la gran diferencia que existe entre los dos primeros con respecto al resto. Por otra parte, en la Figura 21 se observa un pronóstico de la evolución de las ventas a nivel mundial.

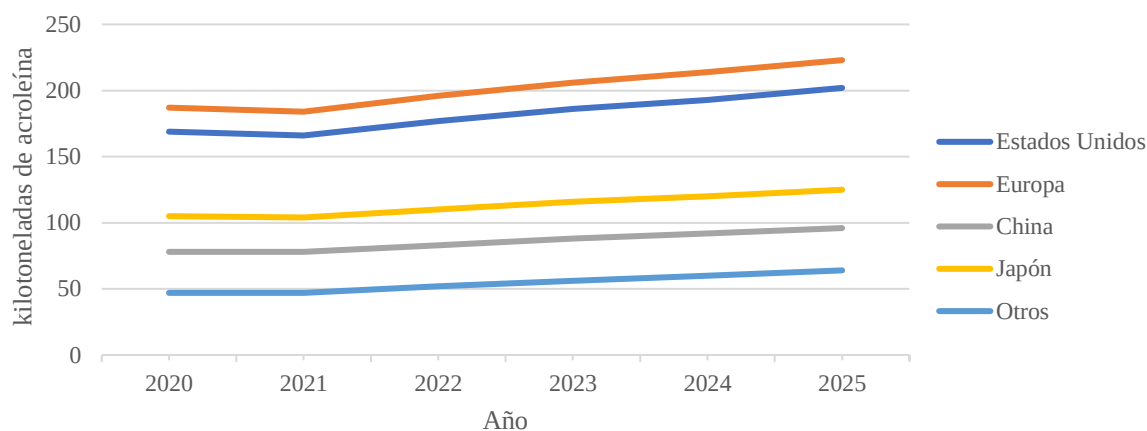


Figura 21. Pronóstico de las ventas de acroleína a nivel mundial. Elaboración propia, a partir de (38).

Destaca un pequeño crecimiento a partir del año 2021 de manera generalizada. Se espera que se mantenga sin variaciones hasta el 2025. Por último, en la Figura 22 se muestran las ventas a nivel europeo de la acroleína.

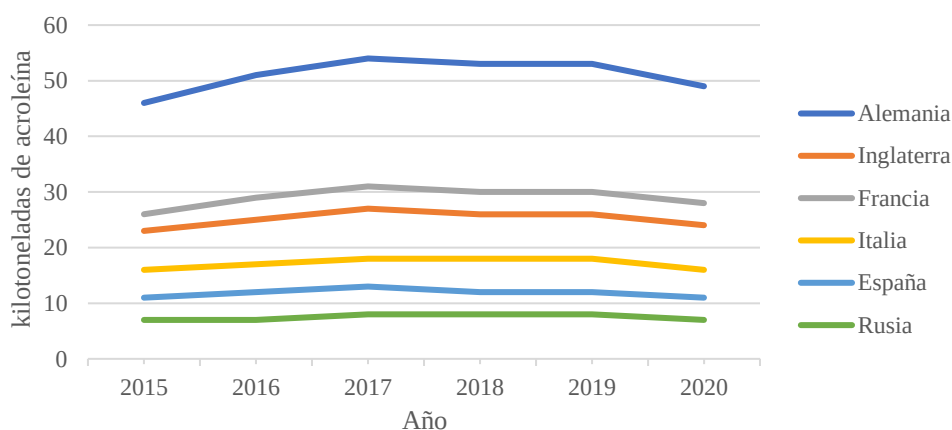


Figura 22. Ventas de acroleína a nivel europeo. Elaboración propia, a partir de datos recogidos en (38).

Se observa que las mayores ventas las tiene Alemania, seguido de Inglaterra y Francia. España para el 2020 presenta unas ventas de 11 kilotoneladas, lo cual deja al país de quinto en toda Europa. En Alemania se encuentra una de las empresas con más importancia a nivel mundial en el mercado de la acroleína, llamada Evonik. Esta representaba un 24,3% del mercado para el 2016 y hoy en día sigue siendo una de las más importantes en lo que respecta a la acroleína en Europa (41).

7.3.4. Empresas del sector

Entre las empresas más importantes por región se pueden encontrar en Europa: Evonik (Alemania), Adisseo (Francia), Arkema (Alemania) y AkzoNobe (Holanda). Estas son de gran importancia a nivel mundial, tal como fue mencionado anteriormente. En Asia las empresas más importantes del mercado son: Daicel, en Japón, y Hubei Shengling Technology, Wuhan Ruiji Chemical, Hubei Jinghong Chemical, Zibo Xinglu Chemical, Puyang Shenghuade Chemical, Wuhan Youji y Hubei Xinjing New Material, ubicadas en China. Donde se puede destacar Daicel al ser uno de los mayores exponentes del mercado de la acroleína en Asia (40).

Por último, en el continente americano se encuentran: Baker Petrolite Corporation, Degussa Corporation y Dow Chemical, las tres ubicadas en Estados Unidos (42).

7.3.5. Precios

El precio de la acroleína se ve fuertemente afectado por el coste del propileno y el crudo de petróleo. Por lo tanto, históricamente se sabe que este precio sufre de fluctuaciones, más notorias por ejemplo han sido las sufridas por sequías graves o la crisis del 2008 (43).

Sin embargo, desde 2007 al 2017 el precio no ha tenido cambios significativos. El rango de precio varía desde 1.800 hasta 5.200 dólares por tonelada. La diferencia de estos precios es debida al tipo de planta que produzca la acroleína, teniendo precios más económicos aquellas empresas que vendan la acroleína a granel. No obstante, ambos precios son competitivos en la industria porque la compra de acroleína a granel implica unos elevados gastos de almacenamiento y transporte. Posteriormente, se profundizará más en el precio de la acroleína en el *Anexo III: Análisis de viabilidad económica* (14, 43).

7.4. Ácido acrílico

7.4.1. Estudio de las aplicaciones

El ácido acrílico tiene múltiples aplicaciones en la fabricación de diversos productos, entre los cuales se encuentran: detergentes, aditivos plásticos, adhesivos, selladores, pañales tanto de niño como de adulto, recubrimiento de superficies, entre otros. Esta última en el 2014 abarcó la gran mayoría del mercado del mundial de ácido acrílico (44).

Otro de los productos que presenta un gran crecimiento es la producción de polímeros superabsorbentes (SAP) en la cual se emplea dicho ácido. El SAP es utilizado para la fabricación de pañales debido a su gran capacidad para retener grandes cantidades de líquido, se estima que el consumo del 30% del mercado mundial de ácido acrílico se destina a la producción de SAP (45).

7.4.2. Producción y consumo

Se espera que para el 2022 el mercado del ácido acrílico sea de 19 mil millones de dólares. Su crecimiento se debe a la gran demanda de polímeros super absorbentes a nivel mundial, sin embargo, este crecimiento se puede ver mermado por las crecientes políticas ambientales que lo catalogan como un contaminante del aire lo cual restringe en gran medida su producción en base a hidrocarburos. Últimamente, se ha estudiado su posible producción a partir de materia prima más respetuosa con el medio ambiente, para de esta manera, poder mantener su mercado (46-47).

Se prevé un crecimiento en la demanda asiática debido a un aumento en la producción de compuestos que utilizan el ácido acrílico como materia prima, al igual como por el crecimiento poblacional de Estados Unidos y Canadá, se estima un aumento en la demanda de SAP lo cual influye directamente a la demanda de ácido acrílico.

7.4.3. Importación y exportación

Las importaciones y exportaciones de ácido acrílico han tenido un comportamiento bastante irregular a lo largo de los años, teniendo subidas importantes, así como caídas pronunciadas, como se puede observar en la Figura 23. Con los datos más recientes, que corresponden al año 2019, se tiene que las importaciones del ácido acrílico a nivel mundial alcanzan los 0,77 miles de millones de dólares. Mientras que, las exportaciones están por encima, alrededor de los 0,84 miles de millones de dólares.

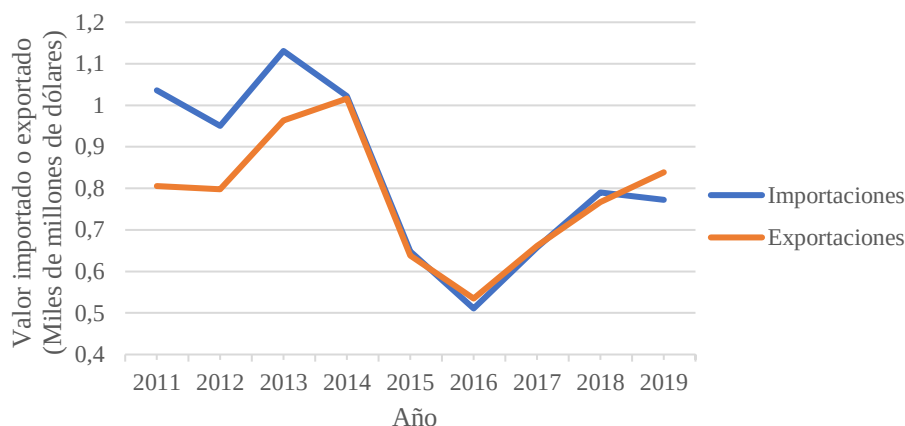


Figura 23. Evolución de las importaciones y exportaciones del ácido acrílico a nivel mundial. Elaboración propia, a partir de (23).

Como se puede observar en la Figura 24, los continentes que albergan la mayor importación de ácido acrílico son Asia, seguido por Europa y América, y por último se encuentran África y Oceanía, los cuales no cuentan con grandes niveles de importación de dicho ácido. Los principales países importadores son: China, Estados Unidos e India.

Por otro lado, en las exportaciones se puede observar en la Figura 25 un comportamiento parecido al anterior, ocupando la mayoría de las exportaciones el continente asiático, seguido en menor medida por Europa y América. Los mayores países exportadores serían: Arabia Saudita, China y Alemania.

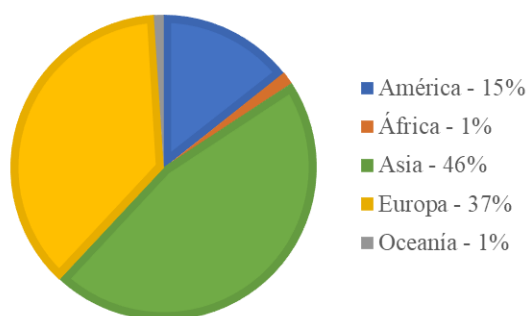


Figura 24. Participación por continentes en las importaciones del ácido acrílico para el año 2019. Elaboración propia, a partir de (23).

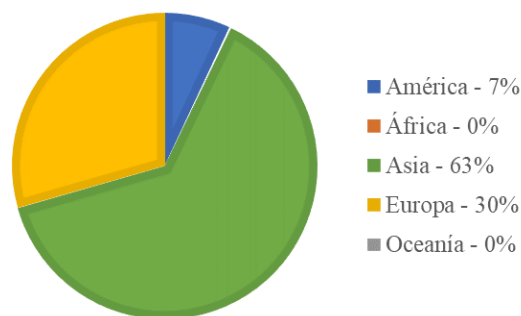


Figura 25. Participación por continentes en las exportaciones del ácido acrílico para el año 2019. Elaboración propia, a partir de (23).

7.4.4. Empresas del sector

Existen una gran variedad de empresas que producen ácido acrílico pero las más destacadas en Europa son: Arkema (Francia), BASF SE (Alemania), Evonik Industries (Alemania) y PJSC Sibur Holding (Rusia). En Asia, las empresas más destacadas son: Nippon Shokubai Co. Ltd (Japón), LG Chem Ltd (Corea del sur) y Mitsubishi Chemical Holdings Corporation (Japón). Al ser Asia la región con mayor producción a nivel mundial de ácido acrílico, estas empresas son de gran importancia para el mercado. Por último, en Norte América se encuentran empresas como: The Dow Chemical Company (EE.UU.) y Hexion Inc (EE.UU.). En el caso de Dow, esta ha tenido que disminuir su producción debido a la sobreproducción que tenían, lo que conllevó a la parada de una de sus 5 plantas de producción (47).

7.4.5. Precios

En el siguiente gráfico, de la Figura 26, se puede observar de la evolución en el precio del ácido acrílico en un periodo de 6 meses. Se observa que el precio para el 18 de enero del 2021 es de 1.459 dólares por tonelada métrica (48).

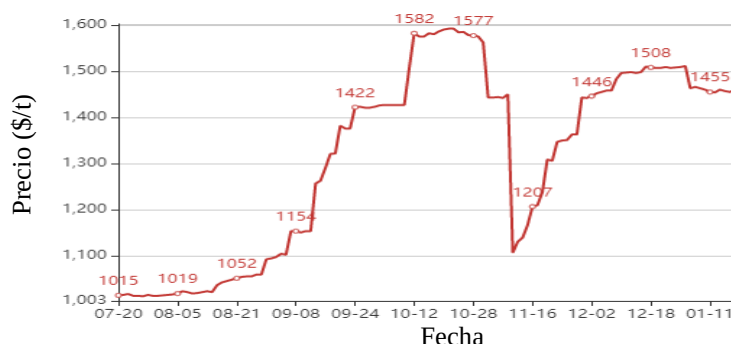


Figura 26. Evolución del precio del ácido acrílico (48).

El precio del ácido acrílico en el mercado depende en gran medida del precio del mercado de propeno ya que este es una de las principales materias primas para su producción.

7.5. Acetaldehído

7.5.1. Estudio de las aplicaciones

El acetaldehído presenta diversas aplicaciones a la hora de fabricar distintos productos entre los que destacan materiales de construcción, pinturas anti inflamables, explosivos y lubricantes sintéticos. A su vez, es de gran utilidad tanto en la industria alimentaria como en la farmacéutica. En la primera, es utilizado para la producción de conservantes en zumos y en la segunda, utilizado en la producción de vitaminas y sedantes. Por último, se debe destacar su utilización en la industria química en la fabricación de ácido acético, ésteres de acetato, aldehído acético, ácido peracético, pentaeritritol, piridina y en el tratamiento de aguas (49-50).

7.5.2. Producción y consumo

Se espera que para el 2026 el mercado alcance un valor de 2,25 mil millones de dólares. El gran crecimiento del acetaldehído se debe a diversos factores, siendo el primero de estos, el auge de la industria química. Así como a su vez, en la industria alimentaria, donde se ha notado un crecimiento exponencial en su utilización. Otro de los factores del crecimiento es su demanda en el tratamiento de aguas (49-50).

Una de las regiones cruciales para el mercado del acetaldehído es Norte América y presenta un crecimiento consistente a través de los años. También, se puede destacar que países asiáticos como China, India y Corea del Sur, los cuales esperan un gran crecimiento en el mercado a futuro debido a su gran desarrollo industrial sumado a mano de obra más económica (49, 51).

7.5.3. Importación y exportación

Las importaciones y exportaciones de acetaldehído han tenido un comportamiento bastante irregular a lo largo de los años, aunque en general ha ido decayendo, ha tenido subidas importantes, así como caídas pronunciadas, como se puede observar en la Figura 27. Con los datos más recientes, que corresponden al año 2019, se tiene que las importaciones acetaldehído a nivel mundial alcanzan los 0,058 miles de millones de dólares, mientras que las exportaciones están por debajo, alrededor de los 0,045 miles de millones de dólares.

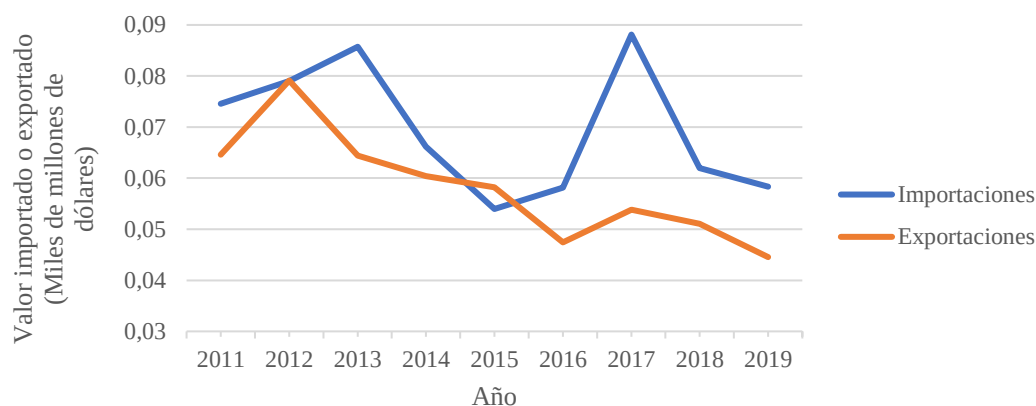


Figura 27. Evolución de las importaciones y exportaciones del acetaldehído a nivel mundial. Elaboración propia, a partir de (23).

En la Figura 28 se observan los porcentajes de importaciones por continentes donde se tiene que el continente con mayor importación de acetaldehído es Europa, teniendo un 89% de las importaciones, muy por debajo se encuentran Asia y América. Los principales países importadores de acetaldehído son: Francia, España y Alemania.

En cuanto a las exportaciones, en la Figura 29 se puede observar que sigue siendo el continente europeo el mayor exportador, así como importador, seguido en menor medida por América y Asia. Los países con mayor exportación de acetaldehído son: Alemania, Rusia y Estados Unidos.

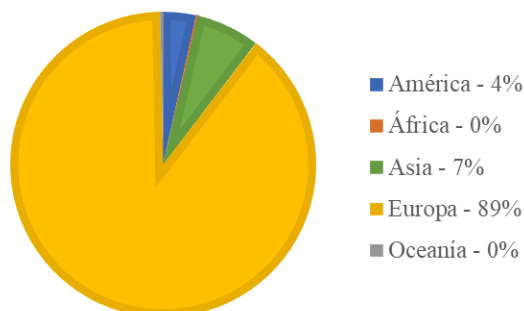


Figura 28. Participación por continentes en las importaciones del acetaldehído para el año 2019. Elaboración propia, a partir de (23).

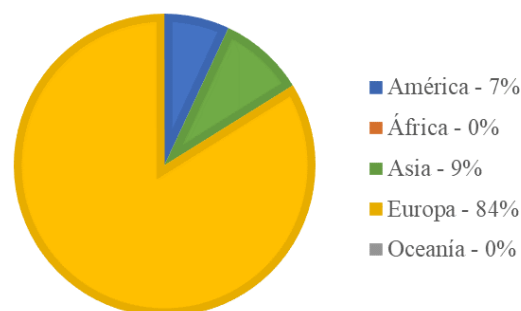


Figura 29. Participación por continentes en las exportaciones del acetaldehído para el año 2019. Elaboración propia, a partir de (23).

7.5.4. Empresas del sector

Existen una gran variedad de empresas que producen acetaldehído, pero las más destacadas en Europa son: Merck KGaA (Alemania), Lonza Group Ltd. (Suiza) y BASF (Alemania). En Asia, las empresas que más destacan son las siguientes: Showa Denko K.K. (Japón), Sumitomo Chemical Co. Ltd (Japón), Ashok Alco-Chem Ltd. (Japón), Jubilant Life Sciences (India) y CNPC (China). Por último, en Norte América se pueden destacar las siguientes empresas: Celanese Corporation (EE.UU.) y Eastman Chemical Company (EE.UU.) (51).

Estas empresas son las más destacadas en el mercado dado a la diversidad en los productos que ofrecen y su constante desarrollo e investigación para obtener avances tecnológicos (51).

7.5.5. Precios

En lo que respecta al precio del acetaldehído se puede observar en la Figura 30 que ha fluctuado en gran medida, obteniéndose un valor de 975 dólares por tonelada métrica (52).

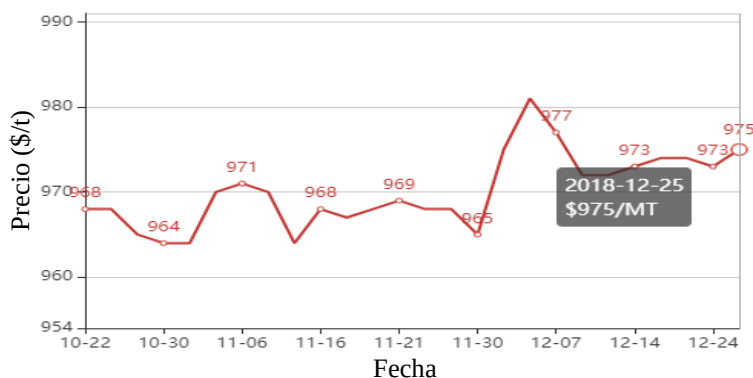


Figura 30. Evolución del precio del acetaldehído (52).

7.6. Ácido acético

7.6.1. Estudio de las aplicaciones

El ácido acético es un compuesto orgánico utilizado en una gran diversidad de áreas a nivel industrial como pueden ser: la producción de plásticos y polímeros, la industria alimentaria, pinturas y recubrimientos, la industria farmacéutica, la industria cosmética, entre otros. Unos de los compuestos producidos a partir del ácido acético, que presentan gran relevancia en su mercado, son el acetato de vinilo, utilizado como adhesivo en construcción y en la fabricación de goma de mascar (53), y el ácido tereftálico, utilizado para la fabricación de poliéster para la industria textil (54).

7.6.2. Producción y consumo

Se prevé que para el año 2027 el mercado global del ácido acético alcance los 21,65 mil millones de dólares americanos. La producción de acetato de vinilo es uno de los factores determinantes del crecimiento en la demanda de ácido acético a nivel mundial, en el 2019 suponía el 35% del mercado global, debido al gran crecimiento que presenta la industria cosmética (55). Debido a la demanda de construcción en la región de Asia Pacífico el mercado de ácido acético ha visto un crecimiento, dicha región consumía un 60% del mercado global para el año 2016. A su vez, debido al gran crecimiento en la industria farmacéutica en Japón e India, se espera un gran crecimiento en la demanda de ácido acético ya que solamente la industria farmacéutica en India representaba unos ingresos de 16 mil millones de dólares americanos para el 2016 (56).

7.6.3. Exportaciones e importaciones

En la Figura 31 se observa como el comportamiento de las importaciones y exportaciones a través de los años ha sido prácticamente igual, denotando las pequeñas subidas y bajadas que presentaron entre los años 2011 al 2014, y la gran subida presentada desde el 2015 hasta el 2018. Cabe destacar que ambos valores de exportación e importación se mantienen entre 1 y 2,5 mil millones de dólares americanos.

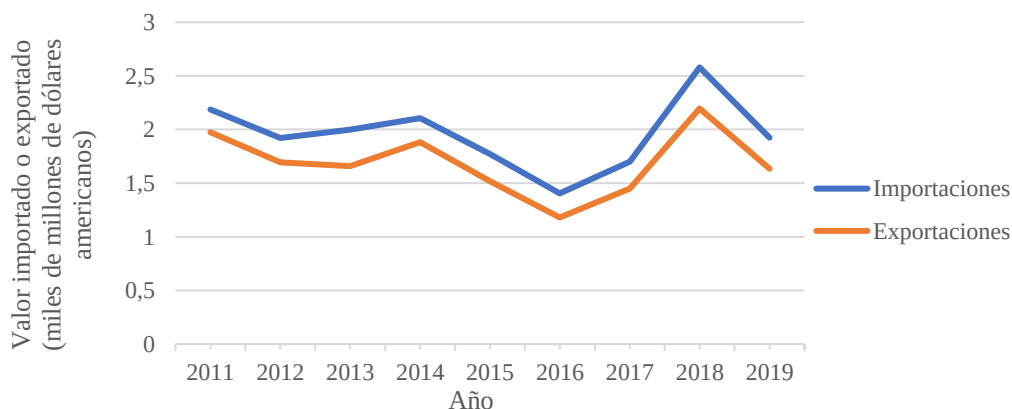


Figura 31. Evolución de las importaciones y exportaciones del ácido acético a nivel mundial. Elaboración propia, a partir de (23).

En la Figura 32 se muestran los porcentajes de importación por continente, siendo el europeo el mayor importador de ácido acético para el año 2019 con un 44% de las importaciones a nivel global seguido por Asia y América. Los países que más importan se encuentran: India, Bélgica y Alemania.

Por último, en las exportaciones por continente para el 2019, en la Figura 33 se observa que el continente asiático presenta la mayor parte de las exportaciones de ácido acético a nivel mundial con un 43% seguido de Europa y América. Los países exportadores son: Estados Unidos, Bélgica y China.

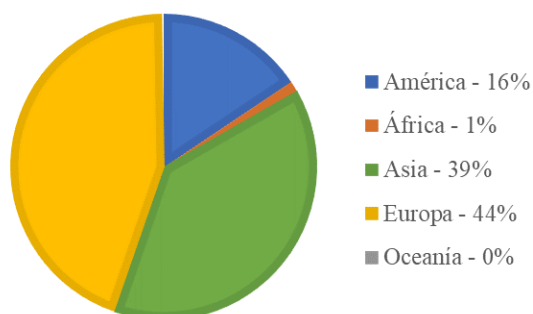


Figura 32. Importaciones del ácido acético para el año 2019. Elaboración propia, a partir de (23).

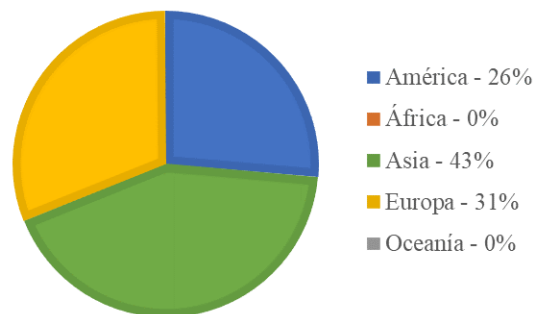


Figura 33. Exportaciones del ácido acético para el año 2019. Elaboración propia, a partir de (23).

7.6.4. Empresas del sector

Las empresas más destacadas en el mercado de ácido acético en Asia son: Mitsubishi Chemical Corporation (Japón), Saudi International Petrochemicals (Arabia Saudita), Jiangsu Sopo (China), GNFC Limited (India), Sinopec (China), Daicel Corporation (Japón) y PetroChina (China) (56).

En Europa se encuentran: LyondellBasell (Países Bajos), HELM AG (Alemania), Wacker Chemie (Alemania) y British Petroleum (Reino Unido). Por último, en Norte América se pueden destacar las siguientes empresas: Celanese Corporation, Eastman Chemical Company y DuPont (EE.UU.) (56).

7.6.5. Precios

En el año 2016 el precio del ácido acético se encontraba en 485 dólares por tonelada. En lo que respecta a Europa para el año 2011, en la Figura 34 se puede observar cómo varió el precio del ácido acético, siendo para mediados de mayo, de 900 euros por tonelada. Para principios de junio, el precio disminuyó a 750-800 euros por tonelada y siguió disminuyendo, llegando a 670-760 euros por tonelada a comienzos de julio y, por último, presentó un precio de 600 – 680 euros por tonelada para finales del año (57-58).

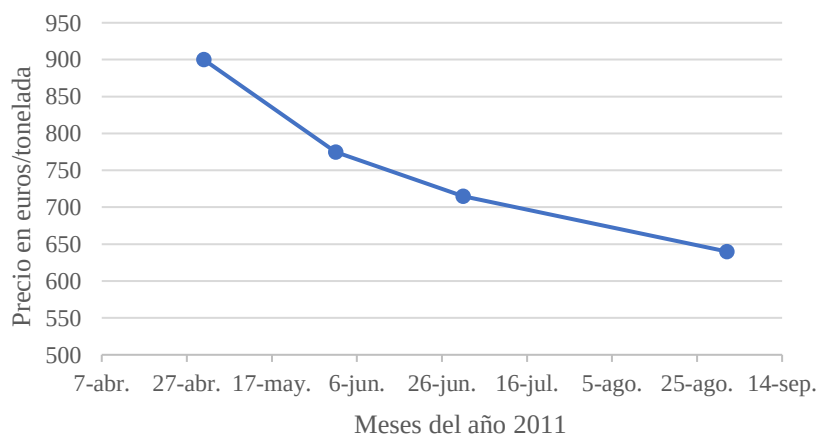


Figura 34. Evolución del precio del ácido acético en el año 2011. Elaboración propia, a partir de (58).

8. Estudio de alternativas

Desde principios del siglo XX se ha investigado sobre la producción de la acroleína, pero fue en el año 1942 que la empresa alemana Degussa desarrolló el primer proceso industrial para la síntesis de acroleína, mediante la condensación aldólica de formaldehído y acetaldehído. A lo largo de los años diferentes procesos han surgido, sin embargo, no todos se implementan a nivel industrial debido a diversos inconvenientes. En la Figura 35, se muestran las diferentes alternativas para la producción de acroleína (59).

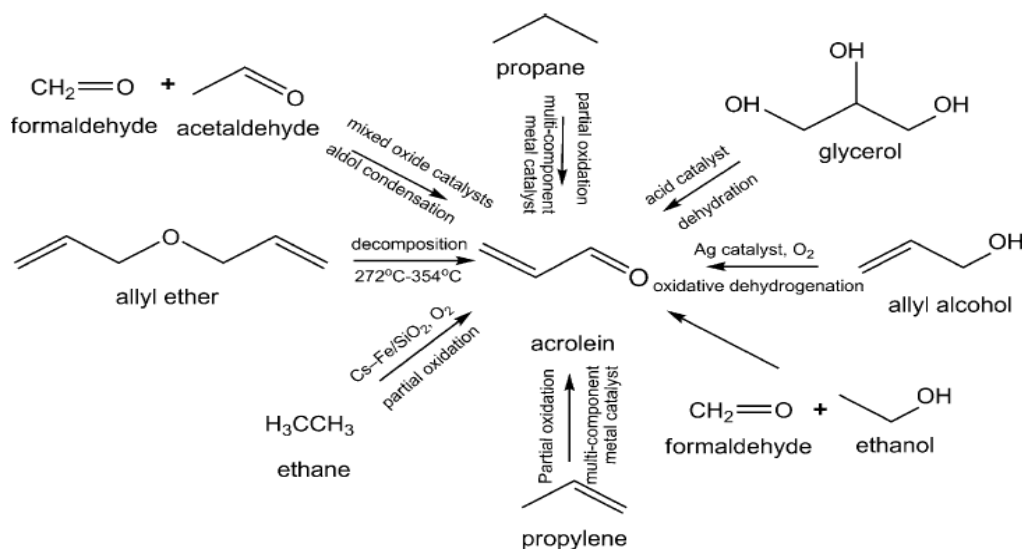


Figura 35. Diferentes alternativas para la producción de acroleína (14).

La vía de síntesis a partir de formaldehído y acetaldehído presenta desventajas en cuanto a la conversión de las materias primas, lo que dificulta la separación de los productos. Posteriormente, se empezó a emplear la oxidación parcial del propileno para la síntesis de acroleína, convirtiéndose en la alternativa más utilizada. El propano surgió como alternativa de materia prima, con la mira de sustituir el propileno por su menor coste, no obstante, la producción de acroleína a partir de la oxidación parcial de propano no resulta viable debido al bajo rendimiento de la reacción hacia la acroleína (59).

Los procesos que parten de alcohol alílico, formaldehído y etanol, etano, y éter alílico no se implementan a gran escala principalmente debido a razones como poca disponibilidad y elevados precios de materias primas, gran demanda de energía que aumentan considerablemente los costos del proceso, y la baja selectividad del producto deseado (59).

Recientemente se ha considerado una vía para la producción de acroleína a partir de glicerina. Esta alternativa se clasifica como una ruta biológica, lo que despierta un gran interés en su utilización. También ha resultado muy atractivo el proceso de acoplamiento oxidativo de alcoholes, específicamente metanol y etanol, gracias a que se trata de un proceso de un solo paso con costes de capital reducidos. Esta última alternativa no se incluye en la Figura 35 (14, 59).

Teniendo en cuenta lo expuesto, en el presente proyecto solo se considerarán tres alternativas para la producción de acroleína: la oxidación parcial de propileno, la deshidratación de glicerina y el acoplamiento oxidativo de alcoholes. A continuación, estas alternativas se explicarán con mayor detalle.

8.1. Oxidación parcial de propileno

El proceso de producción de acroleína a partir de la oxidación parcial de propileno fue desarrollado por primera vez por la compañía Shell en 1958. Luego, otras compañías entre las que destaca Sohio descubrieron otros sistemas catalíticos con los que el proceso se mejoraba. A continuación, en la Figura 36, se muestra el diagrama de bloques del proceso (1).

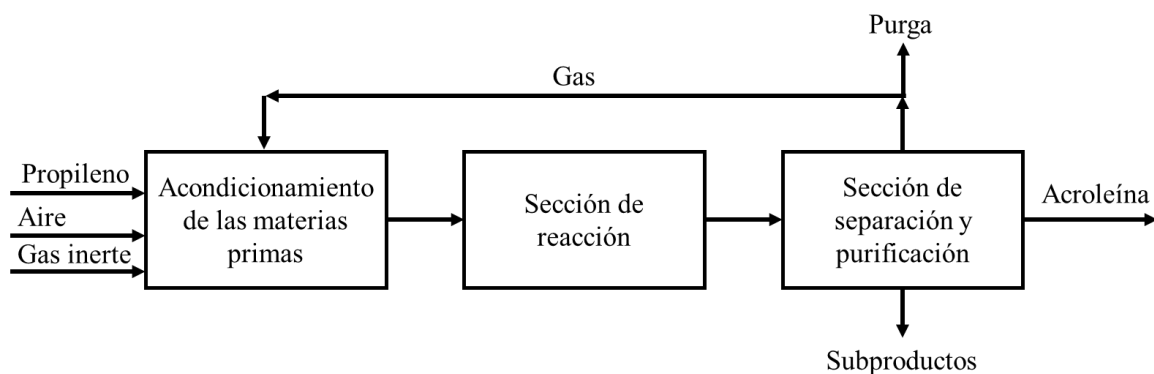


Figura 36. Diagrama de bloques del proceso de producción de acroleína a partir de la oxidación parcial del propileno. Elaboración propia, a partir de (1).

En este proceso, el propileno se mezcla con aire y gas inerte en una relación molar de 1:8:(1-6), aproximadamente. Esta mezcla gaseosa entra en el reactor, el cual opera entre 300-400 °C y presiones entre 150-250 kPa, alcanzando una conversión del propileno mayor al 96% con una alta selectividad respecto a la acroleína, superior al 75%. El producto principal del proceso es la acroleína, sintetizada llevando a cabo la Reacción [1], y entre los subproductos de la reacción resaltan el ácido acrílico y acetaldehído. Asimismo, se forman gases residuales como los óxidos de carbono (1).



$$\Delta H = -340,8 \text{ kJ/mol}$$

A la salida del reactor, el gas se lava con agua o mezclas de agua y disolvente con la finalidad principal de eliminar el ácido acrílico. Este subproducto se suele formar en pequeñas cantidades. Posteriormente, el gas se introduce en un absorbedor y se obtiene una disolución rica en acroleína, absorbiendo el gas en agua fría. El gas que sale de este equipo contiene el propileno que no reaccionó, óxidos de carbono, oxígeno, nitrógeno, e inerte. Parte de esta corriente puede ser tratada para su recirculación al reactor. El resto del gas debe pasar por un sistema de combustión para finalmente purgarse (1).

La disolución de acroleína se dirige a una columna de desorción, de la cual se obtiene acroleína cruda. La corriente líquida a la salida de este equipo se puede enfriar y reutilizar como absorbente. Mientras que, la corriente que contiene la acroleína cruda se destila para obtener una corriente de producto enriquecida en acroleína. De esta forma, se obtiene el producto deseado del proceso con un porcentaje de pureza superior al 95% (1).

En cuanto al tipo de reactor, generalmente se utilizan reactores multitubulares de lecho fijo, empleando catalizadores metálicos multicomponentes cuya vida útil suele ser de cinco a diez años. Como se puede observar con la ΔH , la reacción de oxidación parcial del propileno es muy exotérmica, por lo que se debe controlar la temperatura para evitar explosiones. Una manera de conseguir este control de la temperatura es incorporando un sistema de intercambio de calor, de modo que se establezcan condiciones isotérmicas. También se ha considerado la utilización de reactores de lecho fluidizado circulante, el cual por una parte es ventajoso debido a que se puede operar con concentraciones más altas de propileno que en el caso de un reactor de lecho fijo, pero por otra parte se necesitaría un catalizador de alta resistencia al desgaste (1, 14).

Para minimizar la polimerización, el sistema se debe estabilizar, utilizando por ejemplo la hidroquinona o ácido acético (15).

8.2. Deshidratación de glicerina

Desde hace mucho tiempo se ha investigado en la producción de acroleína a partir de glicerina, no obstante, en el pasado, la glicerina tenía un elevado coste por lo que este proceso no se llevaba

a cabo. Fue a finales del siglo XX e inicios del siglo XXI que el precio de la glicerina empezó a disminuir, lo que conllevó al desarrollo de esta alternativa de síntesis, que surge con el objetivo de sustituir el proceso convencional de producción de acroleína a partir de propileno (59).

La deshidratación de la glicerina se puede llevar a cabo tanto en fase líquida como en fase gas. Con respecto a la deshidratación en fase líquida, se han estudiado las reacciones en condiciones de agua subcríticas y supercríticas empleando diferentes catalizadores, como ZnCl_2 y ZnSO_4 . Sin embargo, existen numerosas limitaciones, entre las que se encuentran problemas de corrosión en el reactor, altos costes de inversión y mantenimiento, por lo que este proceso continúa en investigación para poder adaptarlo a escala industrial. Debido a esto, la alternativa de deshidratación de glicerina expuesta en el presente proyecto se limitará a la reacción en fase gas, cuyo diagrama de bloques se muestra en la Figura 37 (14, 59).

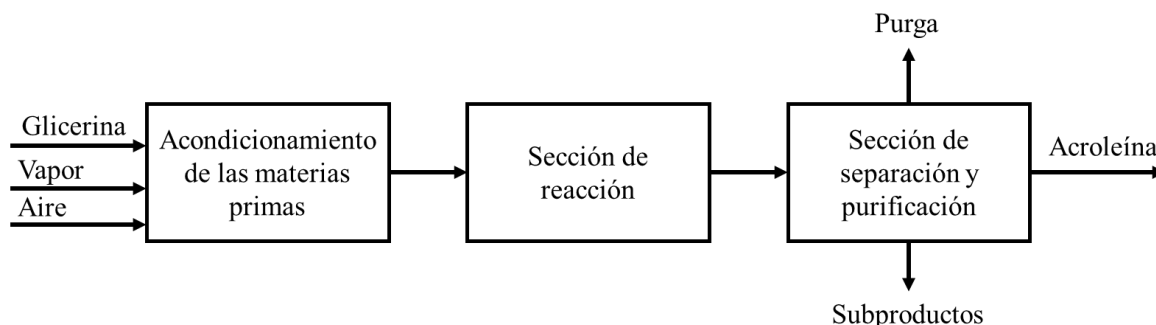
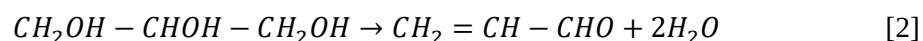


Figura 37. Diagrama de bloques del proceso de producción de acroleína a partir de la deshidratación de glicerina. Elaboración propia, a partir de (11).

Las materias primas deben acondicionarse antes de su entrada al reactor. En caso de utilizarse glicerina cruda, debe existir un pretratamiento para eliminar sales, ácidos grasos no esterificados, materia orgánica o cualquier sólido presente como impureza. La glicerina se calienta hasta alcanzar la temperatura de operación del reactor, y se dirige a un tanque de mezcla, al cual se le alimenta también vapor a alta temperatura. Con lo cual, la alimentación al reactor presenta una composición de 4,7% molar de glicerina respecto al vapor. El reactor opera a 1 atm de presión y a una temperatura de 275 °C, y la reacción principal que lleva a la formación de acroleína se muestra a continuación en la Reacción [2] (14).



$$\Delta H = 43 \text{ kJ/mol}$$

Además de la acroleína, a la salida del reactor también estarán presentes gases no condensables: nitrógeno y dióxido de carbono, compuestos de bajo punto de ebullición: acetaldehído y propionaldehído, y compuestos de alto punto de ebullición: ácido acético, ácido acrílico, glicerina, entre otros (14).

El tratamiento que necesita esta mezcla gaseosa resulta muy similar al del proceso a partir de propileno, descrito anteriormente. Primero, se debe lavar con agua para eliminar compuestos de alto punto de ebullición. Luego, en un absorbedor se separan los gases no condensables, y en una columna de desorción se obtiene la acroleína cruda. Por último, esta se purifica pasando por una columna de extracción y por una columna de destilación (14).

La reacción se lleva a cabo en presencia de un catalizador ácido, con el que se puede alcanzar una conversión completa de glicerina y un rendimiento de acroleína mayor al 70%. Se debe tener en cuenta que al operar en ausencia de oxígeno se produce una gran acumulación de coque, que conlleva a una rápida desactivación del catalizador, por lo que suele alimentar aire para alargar la vida útil del catalizador. Por lo cual, es conveniente operar de forma discontinua con ciclos de producción de cuatro días, teniendo tres días para la regeneración del catalizador. Si se opera de

forma continua, sería adecuado emplear un reactor de lecho fluidizado con regenerador de catalizador o un reactor de lecho fijo con un diseño especial para su regeneración (43).

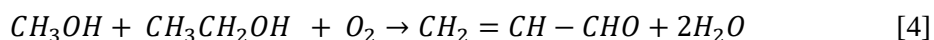
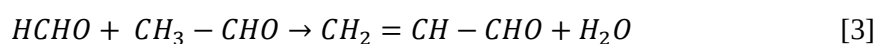
8.3. Acoplamiento oxidativo de alcoholes

A pesar de la existencia de una ruta viable para la producción de acroleína (a partir de propileno) se ha continuado con la búsqueda de procesos alternativos que permitan reducir el costo de producción y la huella de carbono. Se han propuesto alternativas como la oxidación deshidratación del 1,3-propanodiol, que daría lugar al alcohol alílico como intermedio y mediante una oxidación más se obtendría la acroleína. Sin embargo, el coste de la materia prima es demasiado elevado para ser rentable (43).

Como se mencionó anteriormente podría obtenerse acroleína mediante la condensación de formaldehído y acetaldehído, pero esto implica la construcción de una planta de oxidación de metanol y una planta de acetaldehído, además de la planta de condensación. Por lo tanto, los costes se elevan y pasa a ser una alternativa no viable. Sin embargo, estudios proponen la combinación de reacciones donde el metanol y etanol se conducen a un reactor de oxidación para llevar a cabo la producción en una etapa. Dicho proceso se conoce como el acoplamiento oxidativo de alcoholes (43).

Con el objetivo de minimizar el costo de capital, la alternativa del acoplamiento oxidativo de alcoholes busca minimizar el número de equipos. Debido a que, mediante la condensación de formaldehído y acetaldehído se necesitaría un reactor para la oxidación de metanol, un segundo reactor para el acetaldehído y otro para la condensación del aldol, además de los múltiples equipos de separación (43).

Sin embargo, con el acoplamiento oxidativo de alcoholes se requiere de un único reactor para la oxidación tanto del metanol como del etanol y por lo tanto se debe seleccionar un catalizador que sea efectivo para ambas reacciones. Las reacciones que deben llevarse a cabo en el reactor son mostradas en las Reacciones [3] y [4] que son la condensación de aldol y la oxidación de alcoholes respectivamente (43).



El catalizador recomendado es el de hierro-molibdato el cual ha demostrado que mejora la reacción y no desestabiliza la acroleína. Sin embargo, el rendimiento alcanzado, respecto a la acroleína, con los diversos catalizadores estudiados para este proceso suele ser del 50%. La reacción es exotérmica y se lleva a cabo a temperaturas superiores a los 200 °C y ha sido estudiada por años y permitiendo el desarrollo de esta alternativa por Dubois, Auroux, Capron y sus compañeros. El diagrama de bloques del proceso se muestra en Figura 38 (43).

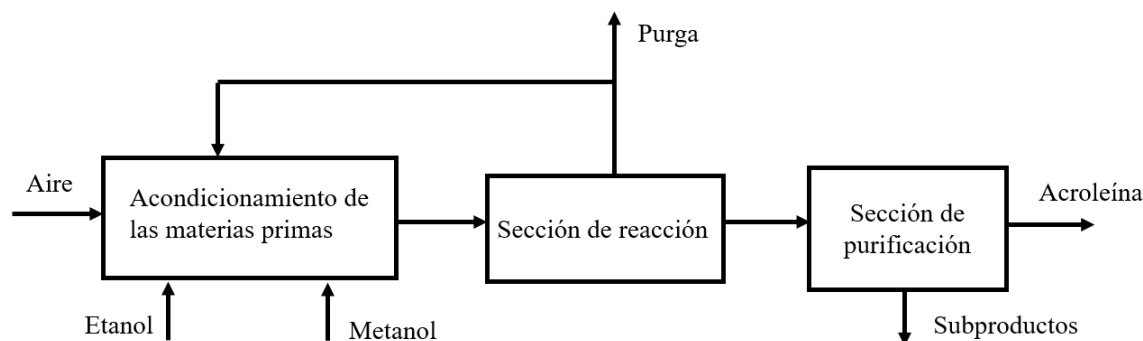


Figura 38. Diagrama de bloques del proceso de producción de acroleína a partir del acoplamiento oxidativo de alcoholes. Elaboración propia, a partir de (43).

A nivel industrial el proceso comenzaría con la compresión del aire a 2-3 bar, para posteriormente separarlo en dos corrientes. Las corrientes se hacen pasar por separado, una al tanque de

alimentación de metanol y la otra al tanque del etanol, para obtener la presión de vapor adecuada. Las corrientes se mezclan, se precalientan y se introducen a un reactor multitubular, el cual cuenta con sal fundida para el control de la temperatura (43).

Los gases al salir del reactor se introducen en un *quench* para enfriarlos antes de introducirlos a la columna de absorción. Por la parte superior de la columna salen los gases no condensables, parte se purga a un incinerador catalítico, y otra se recircula a la entrada y se mezcla con el aire para obtener aire diluido. Por otro lado, el líquido que sale de la columna sigue el mismo proceso de purificación que el proceso de oxidación de propileno. Aunque con concentraciones de acetaldehído y formaldehído más elevadas (43).

8.4. Alternativa seleccionada

Para seleccionar la vía por la cual se obtendrá la acroleína en la planta se debe considerar que, aunque se haya demostrado que la deshidratación de glicerol es una alternativa bio que consigue altos rendimientos comparables a la oxidación parcial del propileno, actualmente dicho proceso sostenible no se recomienda a nivel industrial. El motivo principal es debido a que el mercado del biodiesel no ha crecido tanto como lo que se estimaba años atrás. Hoy en día, el volumen de biocombustible en Europa no permite considerar esta alternativa a gran escala (43).

Asimismo, aun considerando un rendimiento molar del 70% se requieren 2,3 toneladas de glicerol, que supondría el consumo de 23 toneladas de biodiesel para producir tan solo una tonelada de acroleína. Esto implicaría que para una planta de 10 mil toneladas de acroleína habría que consumir 250 mil toneladas de biodiesel. Esta alternativa es un desafío a futuro, no viable para el presente proyecto (43).

Por otro lado, el acoplamiento oxidativo de alcoholes se está estudiando, pero no ha sido posible obtener datos reales de la escalada a plantas industriales. Además, aún se continúa buscando como mejorar el desarrollo del catalizador, dado que hay problemas en la reacción de aldolización (la cual es más lenta que la oxidación). También, se debe reducir la oxidación a CO_2 y CO , y seguir estudiando el impacto de la recirculación de aldehídos no convertidos (como el formaldehído y el acetaldehído) sobre la cinética en el reactor (43).

De modo que, la alternativa seleccionada es la oxidación parcial de propileno. Esta alternativa ha sido investigada durante los últimos 50 años y se ha concluido que el comportamiento del reactor de una planta industrial se puede predecir sin ningún inconveniente. El modelado cinético está completamente definido, permitiendo emplear parámetros muy confiables. Además, con los nuevos desarrollos en los catalizadores es posible minimizar la formación de subproductos llegando hasta a eliminar por completo la producción de subproductos como el formaldehído. La acroleína es un producto de gran importancia en la industria química y, aunque emplear vías como el acoplamiento oxidativo de alcoholes o la deshidratación de glicerina permite disminuir la huella de carbono del proceso y son muy atractivos en cuanto sostenibilidad ambiental, no son viables económicamente en la actualidad (60).

8.5. Selección del catalizador

Durante años se ha continuado con el desarrollo y mejora del sistema catalizador de este proceso, para optimizar el diseño del reactor aumentando la conversión del propileno, así como selectividad de acroleína. Los cinco catalizadores más empleados durante la historia en la industria para la producción de acroleína son: óxidos cuprosos, óxidos de uranio y antimonio, óxidos de estaño y antimonio, óxidos de molibdato de bismuto y óxidos basados en molibdato de bismuto multicomponente (61).

El primer catalizador usado en la industria para la acroleína fue un óxido cuproso, pero presentaba problemas para mantener el estado de oxidación en el rango en el que el propileno se convierte selectivamente a la acroleína. En busca de una mejora en la selectividad, se han ido desarrollando distintos catalizadores como el estaño de antimonio el cual consta de una mezcla de SnO_2 con $\alpha\text{-Sb}_2\text{O}_3$ y $\beta\text{-Sb}_2\text{O}_3$. Dichos componentes individualmente presentaban baja actividad y

selectividad para la producción de acroleína, pero la combinación creó un catalizador eficiente (61).

Sin embargo, Sohio en 1957 introdujo los catalizadores de molibdato de bismuto los cuales proporcionaban un mayor rendimiento de forma rentable. Una vez más, los componentes por separado eran ineficientes dado que el Bi_2O_3 estaba activo, pero producía mayoritariamente dióxido de carbono y agua, mientras que el MoO_3 era bastante selectivo, pero con baja actividad. Se ha demostrado que las combinaciones de óxidos de molibdato de bismuto crean un catalizador ventajoso, especialmente manteniendo un ratio en la composición Bi/Mo entre 2:3 y 2:1 (60).

La oxidación parcial del propileno es el método de fabricación de acroleína predominante en todo el mundo, y los catalizadores más empleados los de molibdato de bismuto desde su descubrimiento. Una desventaja es que, aunque se obtengan altas conversiones del propileno y buena selectividad respecto a la acroleína, tienen lugar una variedad de reacciones secundarias, las que incluyen subproductos como óxidos de carbono, acetaldehído, formaldehído, ácido acrílico, ácido acético, etileno y acetona (60).

Asimismo, actualmente se ha demostrado que los catalizadores de óxidos metálicos multicomponente son más eficientes. Dichos catalizadores emplean el molibdato de bismuto como compuesto principal y logran una selectividad de acroleína superior al 80% (62).

Los catalizadores metálicos multicomponente generalmente siguen una estructura como Mo-Bi-XII-XIII(-XI-Y-Z)-O o una más simple como Mo-Bi-XII-XIII. Esta última es la estructura básica que contiene cuatro componentes metálicos donde XII puede ser Co, Ni, Me, Mg o Pb, mientras que XIII puede ser sustituido por Fe, Cr, Ce o Al (14).

En la superficie del catalizador se encuentra los molibdatos de bismuto que actúan como los principales sitios activos; sin embargo, la mayor actividad ocurre solo con la presencia de un metal divalente (por ejemplo, el Co^{2+}) y otro trivalente (como el Fe^{3+}). Asimismo, opcionalmente se puede añadir a la estructura el termino (-XI-Y-Z)-O donde XI es un metal alcalino, Y puede ser Sb, Te, W, V o Nb mientras que Z puede ser fósforo o boro. Incluir estos elementos en el catalizador permite ciertas ventajas como promover la adsorción de olefinas y la desorción del producto. En la Figura 39 se muestran algunos de los catalizadores empleados industrialmente junto con la conversión que permiten alcanzar (14, 61).

Catalyst	Feed composition ^[a]	Contact time [sec]	T [°C]	Conversion [%]	Selectivity ^[b] [%]
$\text{Mo}_5\text{VW}_{1.5}\text{Te}_{0.5}\text{Sb}_2\text{Sn/Bi oxide}$ ^[26]	I/O/steam = 1:1.6:6	3	450	66.5	N.A. ^[c]
Te-V-W-As/Sn(Sb) oxide ^[27]	I/O/steam = 1:6:3	4.9	370	65.6	69.9
Sn-Sb-U oxide ^[28]	I/O/N = 5:7.5:87.5	3.5	430	89	81
$\text{SnSb}_2\text{VFe}_{0.5}\text{Bi}_{0.01}\text{ oxide}$ ^[29]	I/O/N/steam = 1:12:67:15	3	270	62.3	72.8
$\text{Cr}_2\text{Al}_{0.7}\text{Mo}_7\text{Te}_{0.35}\text{ oxide}$ ^[30]	I/air/steam = 4:50:46	4	384	95	83.3
$\text{Ni}_{10}\text{Co}_{0.3}\text{FeBiPMo}_{12}\text{O}_{37}$ ^[31]	I/air/steam = 1:10:4.1	1.8	360	90	93.1 ^[d]
$\text{Ni}_{45}\text{Co}_4\text{FeBiP}_{0.08}\text{Mo}_{12}\text{O}_{31}$ ^[32]	I/air/steam = 1:10:6	4	310	95.5	82.8
$\text{NiCo}_3\text{Fe}_2\text{BiAs}_{1.5}\text{K}_{0.2}\text{Mo}_{12}\text{O}_{48.35}$ ^[33]	I/air/steam = 1:10:5	1.5	305	94	93
$\text{NiCo}_3\text{Fe}_2\text{BiP}_2\text{K}_{0.2}\text{Mo}_{12}\text{O}_{49.6}$ ^[34]	I/air/steam = 1:10:5	1.5	305	96	88
$\text{Co}_2\text{BiFeW}_2\text{Mo}_{10}\text{Si}_{1.35}\text{K}_{0.06}\text{ oxide}$ ^[42]	I/O/steam:N = 7:12.6:10:70.4	2.25	320	96.20	86.60
Co-K-Mo-W-(P) oxide ^[43]	I/air/steam = 1:10:8	25	350	84.9–86.9	83.1–87.7
$\text{Mo}_{12}\text{W}_{0.3}\text{BiFeZn}_{0.1}\text{Co}_{0.5}\text{K}_{0.06}\text{Al}_{0.1}\text{Si}_5\text{O}_4$ ^[44–46]	I/O = 1:0.5–3	N.A. ^[c]	310	99.30–99.5	90.10–92.30
$\text{Mo}_{12.25}\text{Bi}_1\text{Fe}_3\text{Co}_8\text{Cs}_{0.1}$ ^[47]	I/O/steam = 1–10:3–20:70–96	N.A. ^[c]	360	96.00	88.75
Bi-Mo-Fe-Ni-Si oxide ^[48]	I/O/N = 1:1–20:1–20	3	360	87.30	96.50
Mo-Bi-Fe-Co-(Ni)-X oxide ^{[49][h]}	I/O/steam:N = 1:1.6:2.3:4.9	N.A. ^[c]	310	> 97	87.63

[a] Molar ratio is used (mol/mol); I=propylene. [b] Selectivity is defined as the molar ratio between the carbon in the acrolein produced in the reaction and the carbon in the converted propylene. [c] Not available. [d] Acrolein +acrylic acid. [e] X=K, Rb, and/or Cs. [f] X=Sn or Sn with Al, Ni, W, Cr, In, Nb. [g] M=alkali metal. [h] X=Cs and/or K.

Figura 39. Catalizadores para la oxidación del propileno a acroleína con sus respectivas conversiones y condiciones de operación (14).

Entre los mencionados anteriormente se ha seleccionado el catalizador multicomponente de molibdato de bismuto en vista de que los estudios desarrollados lo muestran como candidato predilecto, dada su estabilidad y la elevada conversión del propileno para dar acroleína.

Asimismo, como se muestra en la Figura 39 la selección del catalizador está relacionada con la composición a la entrada y la temperatura de operación. Se muestra como con este tipo de catalizadores se puede conseguir una alta conversión y selectividad, a la vez se observa que es posible trabajar con una menor composición de inertes, disminuyendo así el coste de operación.

En cuanto a las especificaciones del catalizador multicomponente de molibdato de bismuto, serán discutidas en el *Anexo II: Cálculos justificativos. Parte B: Reactor R-201*, al igual que la disponibilidad en la industria de este catalizador.

9. Emplazamiento

Es necesario encontrar un sitio adecuado para materializar la planta del proyecto a diseñar. Para la correcta selección del lugar de construcción son diversos factores los que se han de considerar. Entre ellos destacan fundamentalmente, la cercanía del lugar a las materias primas empleadas, así como la proximidad a las empresas que puedan estar interesadas en adquirir el producto. Sin embargo, no menos importante son las utilidades disponibles, las vías de transporte o el desarrollo industrial de la zona. A continuación, se mostrará el emplazamiento de la planta junto con los factores considerados para la correcta selección (63).

9.1. Selección del emplazamiento

Para la localización de una planta de producción de acroleína, lo primordial es concretar el país donde será situada. Empleando la información expuesta en el apartado 7.3. *2-propenal*, se concluye que España es un país viable para la planta, dado que no existe ninguna empresa comercializando por los momentos este producto. El suministro al país de la acroleína puede darse mediante la planta de producción en Francia, sin embargo, implementando la producción nacional se podría disminuir los costes de traslado y aumentar el desarrollo de empresas que empleen el producto.

Como se ha mencionado anteriormente, la acroleína es una sustancia con una amplia demanda dado a sus múltiples aplicaciones, y situarse en un país sin un competidor directo cuando se estima que su demanda anual continuará aumentando, proporciona muchos beneficios. Asimismo, con el objetivo de disminuir lo máximo posible los gastos de transporte, es necesario situarse cerca de las empresas que puedan suministrar las materias primas. Las empresas que pertenecen a la Asociación Española de Operadores de Productos Petrolíferos (AOP) son BP, Cepsa, Galp, Repsol, Saras Energía y ENI. Como se observa en la Figura 40 en España se ubican 8 refinerías de petróleo. Entre ellas destacan, como se mencionó anteriormente en el apartado 7.1.3. *Empresas del sector*, las plantas de Repsol en Tarragona y Puertollano que producen 380.000 y 110.000 toneladas anuales de propileno respectivamente, así como la de Coruña con una producción de 81.000 toneladas anuales (64).

Como se muestra en la Figura 40, todas cuentan con instalaciones aeroportuarias. Sin embargo, de estas destaca la ubicada en Tarragona, dado que cuenta con instalaciones portuarias. Este es un parámetro fundamental para la planta, debido a las prohibiciones de traslado aéreo de la acroleína. Además, aunque no forme parte de la AOP, en Tarragona también se encuentra el conjunto BASF SONATRACH Propanchem productores de propileno.

Del mismo modo mediante el análisis de mercado del helio, se concluye que lo más viable, dado a la proximidad con España, es adquirir dicha materia prima del continente de África. Más concretamente se ha seleccionado la planta de Sonatrach, en Arzew. Se puede contar con compañías como Air Liquide para el transporte este gas (65).



Figura 40. Logística en España de hidrocarburos (64).

Respecto a las empresas que emplean la acroleína en España destaca Adisseo. La empresa cuenta con una planta en Burgos para la producción de metionina. La metionina, como se ha mencionado anteriormente, es aminoácido esencial para los animales y tiene la mayor participación en el consumo de acroleína a nivel mundial, representando aproximadamente el 61% de consumo de acroleína mundial. Esta empresa ha invertido 21 millones de euros para aumentar su producción en el 2021. Sin embargo, ha destacado la necesidad de un aumento de la producción de acroleína para poder llevar a cabo su ampliación (39, 41).

Por consiguiente, la planta de Adisseo en Burgos no solo favorece a la materialización de este proyecto, sino que facilita la selección del emplazamiento. La localización de la planta debe contar con medios de transportes directos y efectivos hasta el polígono de Burgos como carreteras o ferrocarriles. Tarragona se encuentra a menos de seis horas de Burgos, y dado las proximidades con las materias primas y las instalaciones portuarias se ha concluido que la planta de producción de 2-propenal sea instalada en esta ciudad, que pertenece a la región de Cataluña. Para una mayor visualización se muestra a continuación en la Figura 41 la región escogida (66).



Figura 41. Visual de la ciudad seleccionada para la producción (66).

9.2. Características del polígono

En Tarragona cuenta con el complejo químico más grande del sur de Europa, con un polígono petroquímico que elabora el 25% de la producción química nacional y alrededor del 0,7% de la producción mundial. Con la presencia de tantas empresas se sobreentiende que la ciudad dispone de una gran red de comunicaciones y servicios (67).

En Tarragona los polígonos pueden ser clasificados según su ubicación en tres. En la zona sur, están situados los primeros polígonos que fueron construidos en la ciudad, ubicados cerca del área portuaria. Por otro lado, en la zona oeste, se encuentran los nuevos polígonos desarrollados para el sector comercial y terciario. Teniendo por último en la zona norte, los polígonos industriales y el Parque Tecnológico y Universitario.

Todas estas zonas pueden observarse en la Figura 42, donde a la izquierda se ve la vista aérea de los polígonos, y a la derecha se muestran las zonas con colores para una mejor visualización. Siendo de mayor interés para el presente proyecto la zona norte, donde el terreno azul corresponde a el polígono Industrial Riu Clar, la zona roja cerca de este es una ampliación que se está llevando a cabo, y al pasar el río Francolí, se observa la zona naranja que representa el Parque Tecnológico y Universitario (68).



Figura 42. Mapa que señala las diversas zonas de polígonos en Tarragona (66, 68).

Concretamente, en Tarragona se consiguen disponibles parcelas en el polígono Les Tàpies II y en Riu Clar. El primero se sitúa a 43 km del Complejo Industrial de Repsol mientras que Riu Clar está a tan solo 10 km. Además, se encuentran a 28 km y 12 km respectivamente de BASF SONATRACH Propanchem (66).

Entre los polígonos disponibles en la ciudad de Tarragona se la seleccionado el polígono de Riu Clar no solo por ofrecer una mayor cercanía a los suministradores de propileno si no que en este polígono se consigue un terreno desocupado de 12.000 m², con disponibilidad de ampliación con parcelas al lado disponibles. Sin embargo, en el polígono de Les Tàpies II la parcela con mayor superficie es de tan solo 2.500 m² sin parcelas libres alrededor (69).

Este polígono cuenta con múltiples servicios y equipamientos, facilitando el desarrollo económico e industrial. Están presentes empresas del sector transporte, así como otras actividades atractivas para la planta como son empresas de oficina, restauración, musical, ocio, almacenes, estación de servicio, aparcamiento (inclusive para sustancias peligrosas) y planta de residuos urbanos (68).

9.2.1. Selección de parcela

El polígono Riu Clar tiene una superficie es de 112,7 hectáreas netas sin contar la zona de ampliación. El Plan Parcial Urbanístico 38 (PPU-38) es un suelo programado en Tarragona que aumentará la superficie del polígono de Riu Clar. La ampliación será de 41,58 hectáreas de superficie bruta y, al igual que Riu Clar dada la ubicación, contará con una elevada cantidad de vías de comunicación (69).

El polígono cuenta con parcelas con una ocupación mínima de dos mil quinientos metros cuadrados, que pueden tener como máximo una ocupación del 60%. Entre los solares disponibles del polígono se ha seleccionado la Parcela Industrial 110 – 113, con una superficie aproximada de 12 mil metros cuadrados, junto con la parcela 114 – 115, de unos 8 mil metros cuadrados (69).

Las parcelas seleccionadas se muestran en la Figura 43, siendo la superficie total del terreno de 20.018,94 m² en un terreno con tipología de uso industrial aislado. Asimismo, se muestra en esta

también, a la derecha, la vista aérea del polígono seleccionado, donde se puede apreciar el puerto, mostrando la cernía de este.

La localización exacta de la parcela es 41°07'54.1"N 1°12'47.8"E, y en la Figura 44, es posible visualizar la cartografía catastral de la zona señalando nuevamente las parcelas seleccionadas.



Figura 43. Visualización aérea, a la izquierda de la parcela, y a la derecha del polígono Riu Clar (69).

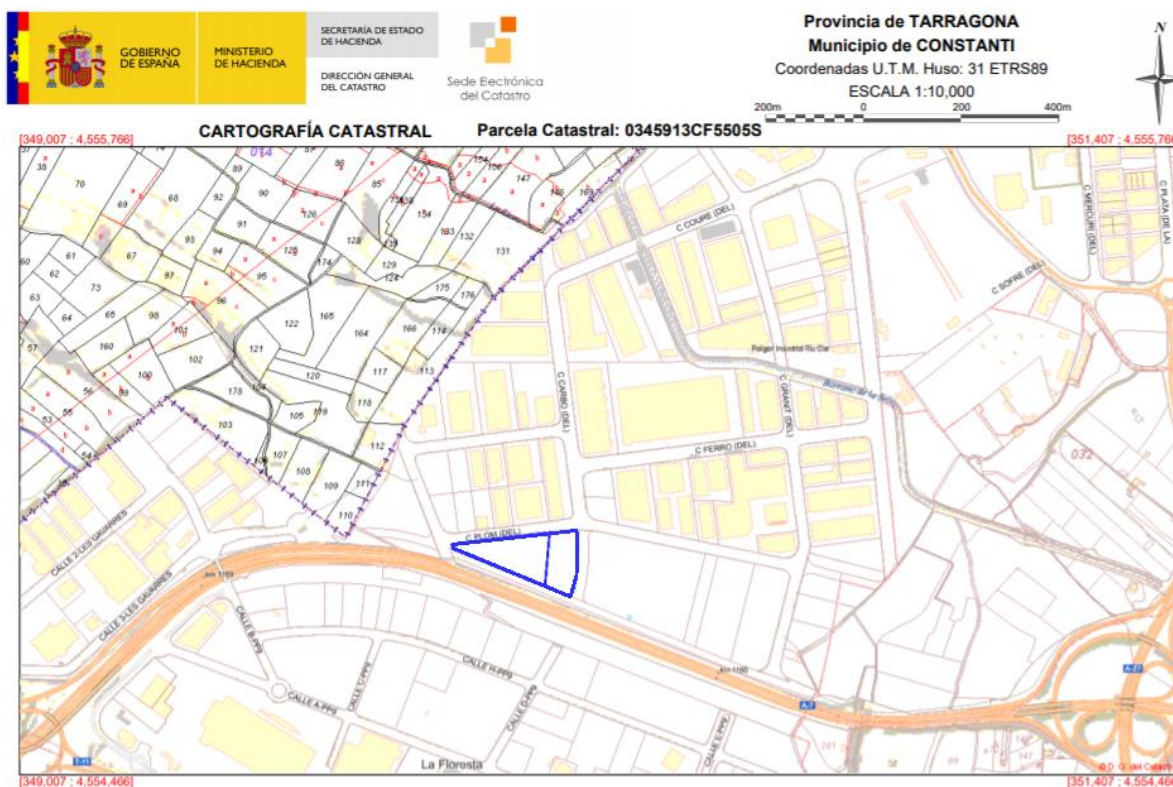


Figura 44. Referencia catastral de la parcela (70).

9.2.2. Clima

El clima en la ciudad de Tarragona varía según la estación del año siendo la más calurosa entre los meses de junio a septiembre y la época fría de noviembre a marzo. La temperatura máxima que se puede alcanzar se encuentra alrededor de 29 °C mientras que la mínima ronda los 5 °C. En la Figura 45 se muestra las temperaturas en un período de estudio entre 2017 y 2019 (71).

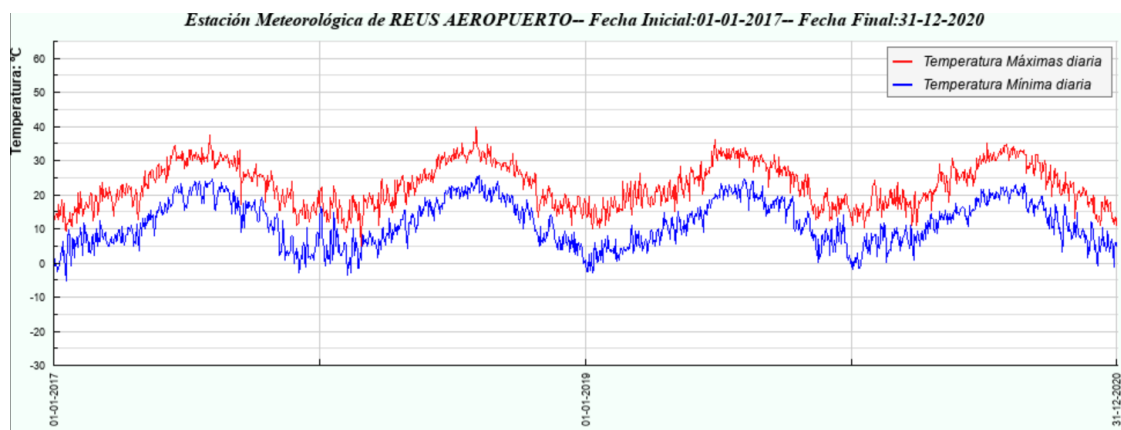


Figura 45. Variación de las temperaturas máximas y mínimas en la zona de Reus Tarragona desde 2017 a 2020 (71).

En cuanto a las precipitaciones la probabilidad de lluvia suele ser de 10% durante el año a excepción de los meses de septiembre y octubre que puede llegar a ascender hasta un 20%. En la Figura 46 se registran las horas de sol y la precipitación en L/m² en el periodo de estudio. Como se observa, aunque la máxima precipitación diaria haya sido de 150 L/m², se trata de un día excepcional dado que lo habitual es que esté por debajo de 40 L/m² (72).

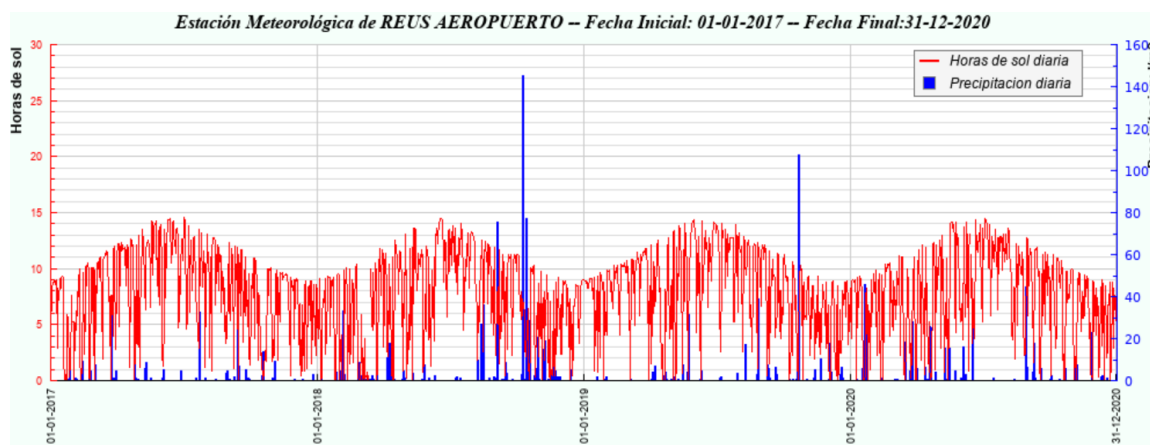


Figura 46. Horas de sol y precipitación en la zona de Reus Tarragona desde 2017 a 2020 (71).

Por otro lado, como se la mencionado anteriormente el polígono se encuentra próximo al puerto por lo que es aconsejable tomar en cuenta el viento que se produce en la zona. En la Figura 47 se muestra la velocidad máxima y media del viento diario en la zona. Destacando como racha de viento más elevada el día 31/03/2018 a las 14 p.m. con 124 km/h. Siendo la velocidad media más alta de 15 km/h.

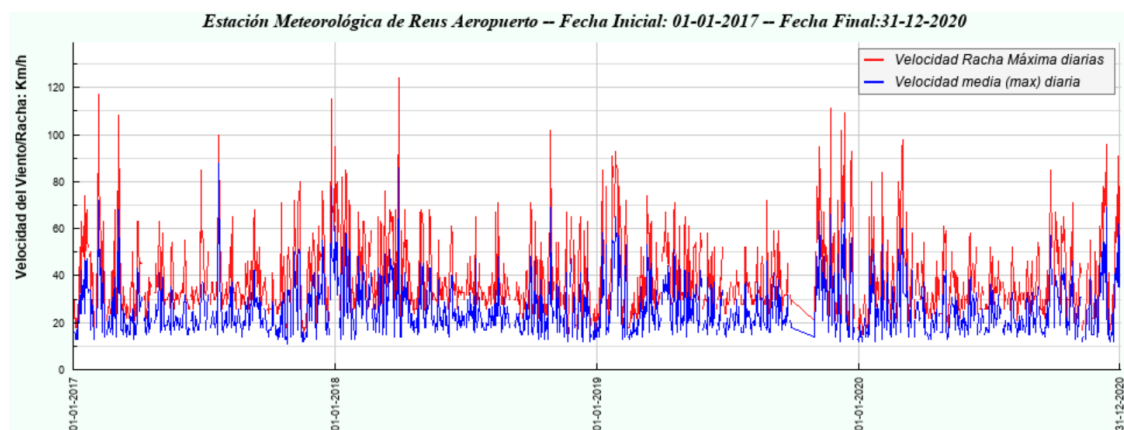


Figura 47. Velocidad del viento en la zona de Reus Tarragona desde 2017 a 2020 (71).

Se considera por lo tanto que el clima de la región favorece a las actividades industriales de la zona y no presenta ningún impedimento para llevar a cabo el proyecto en esta localidad. Asimismo, cabe destacar que se utilizará agua en el proceso por lo que es interesante considera que temperatura suele encontrarse normalmente en la zona. El agua alcanza los 26 °C como máximo y unos 15 °C como mínimo mientras que en promedio suele encontrarse a 19 °C (72).

9.2.3. Suministros

Cabe destacar que en cuanto suministros España cuenta con un sistema de malla logística para la distribución de carburantes. Es uno de los mejores países europeos en esto ya que su red de oleoductos abarca casi por totalidad el territorio nacional. Aun así, la ubicación ya ha sido seleccionada de forma que se disminuya la distancia de transporte (73).

Las materias primas necesarias para el proceso son el propileno, el aire y el helio. No hay ningún tipo de inconveniente para el suministro del aire, el helio como se ha mencionado será comprado a la empresa Sonatrach. Mientras que el propileno puede ser administrado tanto por el Complejo Petroquímico de Repsol o por BASH Sonatrach situados en la misma ciudad que la planta. BASH Sonatrach no solo está situada en Tarragona, pero además están en ampliación para aumentar su producción para el 2022. Siendo posible obtener las materias primas de una misma empresa (74).

No obstante, para llevar a cabo la producción de 2-propenal también son necesarias las utilidades como el agua y la electricidad. En cuanto al suministro del agua de proceso y el tratamiento de efluentes se tiene la empresa de Aguas Industriales de Tarragona Sociedad Anónima (AITASA). Dicha empresa se dedica a suministrar agua a las industrias en los polígonos de Tarragona, así como el tratamiento de efluentes industriales (75).

Del mismo modo, el polígono cuenta con empresas como Ercros para proporcionar entre otras cosas aire comprimido, FEAT para el aparcamiento de vehículos pesados o Lavaflux para estacionamiento de mercancías peligrosas y servicios complementarios. Asimismo, al tratarse de un polígono industrial ya desarrollado se encuentra dotado con red de energía eléctrica, recogida de sólidos urbanos, red telefónica y transporte público (68, 76).

9.2.4. Sismicidad

Normalmente el análisis de tensión sísmica no se realiza en el diseño de recipientes a no ser que se trate de instalaciones nucleares o que la planta este situada en lugar donde la instalación se considere de “Major Hazards”. El movimiento de la superficie terrestre durante un terremoto produce fuerzas de cizallamiento horizontales que pueden aumentar desde la base hacia arriba. En caso de situar la planta en un lugar con fuertes vientos (como áreas de ciclones o huracanes) o en una zona con la peligrosidad sísmica son necesarias estructuras más fuertes. Lo que disminuiría la seguridad del proceso y aumentaría los costes de este (63).

Para verificar la sismicidad de la zona se buscó la peligrosidad sísmica de España, el mapa se muestra en la Figura 48. Como se puede observar la zona sur, así como el noreste de la Península están expuestas a terremotos con mayor profundidad y magnitud (77). La provincia de Tarragona presenta una peligrosidad sísmica baja de modo que no hay inconveniente en situar la planta de producción de 2-propenal en esta zona.

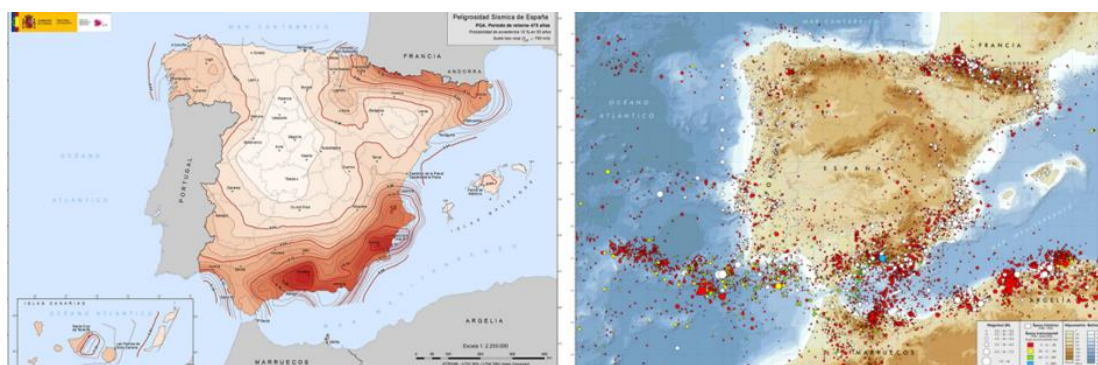


Figura 48. Mapas de peligrosidad sísmica en España (77).

9.3. Medios de transporte

Tarragona por medio de la red viaria se puede comunicar con las principales ciudades del país. No obstante, desde Tarragona no solo es posible desplazarse a las ciudades más importantes de España si no que mediante las autopistas y autovías AP-7, A-7 y las AP-2, A-2 se puede llegar hasta diversas ciudades de Europa. Más concretamente las primeras dos forman parte de la ruta europea E-15 la cual recorre desde Inverness en Reino Unido hasta Algeciras en España. Dicha ruta europea pasa por tanto por Francia ampliando aún más la red de comunicación para el transporte (78). Asimismo, las AP-2 y A-2 forman parte de la ruta E-90 lo que otorga a la ciudad de Tarragona el eficaz traslado hasta Lisboa por un lado y hasta Turquía en la otra dirección. Dicha ruta pasa además por Italia y Grecia. La Figura 49 muestra las autovías y autopistas del país.



Figura 49. Rutas de las autovías en España (78).

De igual modo, el polígono seleccionado cuenta con acceso a la N-240, que permite el acceso a otros polígonos y con la estación del AVE. Tarragona a su vez cuenta con red ferroviaria para el transporte de mercancías. Los terminales de transporte se encuentran en el polígono de Constantí y en la propia ciudad de Tarragona. Por otro lado, el puerto ubicado a escasos kilómetros del polígono seleccionado está considerado como uno de los principales puertos del mar Mediterráneo. El puerto cuenta con acceso a red ferroviaria y viaria siendo un punto clave para las importaciones y exportaciones del sector.

Por último, aunque no será empleado para el transporte de acroleína cabe destacar que el polígono se encuentra a tan solo 10,3 km del aeropuerto Reus. Además, desde el puerto la ciudad de Barcelona se encuentra aproximadamente a 7 km, permitiendo disponer así del aeropuerto del Prat; considerado como uno de los más importantes internacional (79).

9.4. Mano de obra

Gracias a la presencia de la Universidad Rovira i Virgili, la cual tiene una estrecha relación con las empresas de la zona, se estima que no habrá inconveniente en la contratación de mano de obra. La universidad ofrece titulaciones desde grado a doctorados en las amplias áreas de estudio. Distinguiéndose para este proyecto la presencia de ingeniería, arquitectura, ciencias de la salud, sociales y experimentales. Facilitando por tanto la contratación del personal cualificado para el proyecto (80).

9.5. Impacto ambiental y consideraciones políticas

Respecto al impacto ambiental que pueda generar el proyecto destacan las emisiones a la atmósfera, la generación de aguas residuales, así como el riesgo de un accidente. Es por ello que, el emplazamiento debe ser en un polígono industrial alejado de urbanizaciones. Asimismo, al ubicarlo en terreno industrial los impactos ambientales se ven reducidos y, se cuenta, por ejemplo, con redes de vigilancia, que miden los niveles de la contaminación atmosférica para verificar que se cumplen las normativas pertinentes (81). El polígono de Riu Clar además pertenece a la

Asociación Empresarial Química de Tarragona (AEQT), que dispone de contacto con los poderes legislativos y ejerce de representante del sector. Asistiendo por tanto en temas como seguridad, infraestructuras, logística y cambios legislativos a las empresas (82).

10. Estudio de viabilidad técnica

Como se expuso anteriormente en el apartado 8.4. *Alternativa seleccionada*, en el presente proyecto se desarrolla el diseño de una planta de producción de acroleína llevando a cabo la oxidación parcial de propileno. Para conocer si el proceso resulta viable, es indispensable analizar si existe disponibilidad de: materias primas y catalizador para la reacción del proceso, parcela para ubicar la planta y servicios auxiliares, y equipos y tecnologías para materializar el proyecto. También, se incluirán en este estudio aspectos relacionados con la seguridad y un análisis económico preliminar.

10.1. Disponibilidad de materias primas y catalizador

El propileno, aire y helio corresponden a los materiales de partida para la reacción de oxidación con la que se obtiene acroleína como producto principal. En el apartado 7.1.3. *Empresas del sector*, se mencionan diferentes empresas que producen propileno, tanto a nivel mundial como a nivel nacional. Es razonable pensar que resulte conveniente obtener esta materia prima de una empresa con presencia en España, puesto que supone un ahorro en cuanto a costes como envíos internacionales y aranceles aduaneros. En España, concretamente en Tarragona, lugar donde se ubica la planta, se encuentran complejos industriales de Repsol y de BASF que disponen de grandes capacidades de producción de propileno, con lo cual se puede afirmar que se dispondrá la cantidad necesaria de esta materia prima.

Para llevar a cabo la oxidación del propileno es necesario el suministro de oxígeno al reactor. Como ya se ha dicho anteriormente, este oxígeno se obtendrá del aire, por lo cual no hay problema en cuanto a su disponibilidad. Por último, el helio se utiliza como gas inerte, que al igual que el nitrógeno, no participa en la reacción. Sin embargo, su presencia es importante para asegurar que los reactivos se encuentren en proporciones adecuadas y mantener la seguridad del proceso. Teniendo en cuenta que Argelia es el principal exportador de gas hacia España y que la empresa argelina Sonatrach tiene relaciones comerciales con la empresa española Naturgy (35), el helio para el proceso se obtendrá de la empresa Sonatrach y se transportará a través del gasoducto Medgaz que une Argelia y España. Por lo tanto, se puede afirmar que no hay inconvenientes en cuanto al suministro de esta materia prima.

La obtención de acroleína a partir del propileno empezó con el uso de catalizadores de óxido cuproso, sin embargo, desde el descubrimiento de las propiedades catalíticas que ofrecen los óxidos mixtos en la oxidación parcial de olefinas esto cambió. Actualmente, el molibdato de bismuto se ha convertido en el catalizador más empleado de la industria para llevar a cabo esta reacción. El rendimiento de acroleína en estos catalizadores ha ido aumentando con el tiempo mediante el desarrollo de catalizadores más complejos, pasando de obtener rendimientos del 40% hasta un 90%. Pequeños cambios en la actividad del catalizador pueden conllevar un impacto económico en la empresa y es por ello que, los estudios para la mejora de estos catalizadores aún continúan hoy en día (62).

Destaca entre otros BASF, que es reconocido por perfeccionar el sistema catalítico de esta reacción. El catalizador puede mejorar el rendimiento mediante la adición de compuestos como Co, Ni, P, o K, y la optimización en su técnica de preparación. Asimismo, Nippon Shokubai, Satndard Oil y Mitsubishi Chemicals son desarrolladores líderes en el área con numerosas patentes sobre la oxidación selectiva en este tipo de catalizadores. Por consiguiente, dado que hay una amplia variedad de catalizadores disponibles que se emplean actualmente en la industria, no se considera que haya ninguna limitación para su obtención (62).

Asimismo, se han encontrado diversos trabajos que explican el procedimiento necesario para la fabricación de estos catalizadores, pero dado que pueden llegar a tener una elevada vida media de hasta 10 años se ha optado por su compra (1). En específico, con el fin de emplear un catalizador con las mismas características que el catalizador descrito en el estudio donde se adquieren las

cinéticas, se usará el catalizador comercial de molibdato de bismuto multicomponente soportado en alúmina. Este catalizador es elaborado por Dow Chemical Co. y Nippon Shokubai Co., Ltd., entre otros (83).

10.2. Disponibilidad de parcela y utilidades

Es fundamental para materializar el proyecto la disponibilidad de un terreno con suficientes dimensiones para la construcción de la planta. Considerando además las características necesarias que debe tener el terreno, como se mencionó en el apartado 9.2.1. *Selección de parcela*, se ha optado por situar la planta en el polígono industrial de Riu Clar. Este polígono cuenta con diversas parcelas disponibles de las cuales se han seleccionado para la implantación las parcelas 110-113 y 114-115 con una superficie total de 20 mil metros cuadrados. El espacio está disponible por un precio total de 2.302.178,10 €, ofreciendo la ventaja de un financiamiento de pago sin comisiones en 10 años (69).

Asimismo, el polígono está situado en uno de los complejos petroquímicos más grande del sur de Europa, donde son elaborados aproximadamente el 25% y el 0,7% de la producción química nacional y mundial, respectivamente. Por esta razón, se tiene una elevada concentración de empresas que proporcionan los servicios necesarios (67). La planta requiere para la producción, una variedad de servicios auxiliares como agua, electricidad y vapor de agua, etc. La empresa de Aguas Industriales de Tarragona Sociedad Anónima (AITASA) suministra agua a las empresas del polígono, así como ofrece el tratamiento de sus efluentes. Por lo que, se puede emplear sus servicios u obtener el agua mediante el río Francolí que se encuentra en la zona. Dada la elevada cantidad de agua necesaria y su temperatura para el proceso se debe considerarse también el uso de torres de enfriamiento (75).

El aire comprimido se obtendrá mediante un compresor reciprocante. La electricidad necesaria será abastecida por la red de energía eléctrica del polígono. Mientras que, el vapor de proceso será generado en calderas de la planta (76). Se concluye, por tanto, que se cuenta con todos los servicios necesarios para la materialización del proyecto.

10.3. Disponibilidad de equipos y tecnologías

Para llevar a cabo el proceso de producción de acroleína a partir de propileno, es necesario contar con la disponibilidad de ciertos equipos, entre los que se pueden mencionar un reactor, columnas de absorción, desorción y destilación. Asimismo, intercambiadores de calor, bombas y compresores se requieren para adecuar las condiciones de temperatura y presión siempre que sea necesario para la correcta operación de los equipos. También, será necesario disponer de tanques de almacenamiento tanto para los reactivos como para los productos del proceso, los cuales deben poseer determinadas características de acuerdo con el compuesto a almacenar tal como se expone en los apartados de almacenamiento mostrados anteriormente. Por otro lado, resulta importante dotar a la planta con la instrumentación necesaria para el control de procesos y sistemas de seguridad.

Se puede notar que todos los equipos mencionados son comúnmente utilizados en las plantas químicas y existe una gran variedad de fabricantes en el mercado. Con lo cual, se puede afirmar que no hay inconvenientes en cuanto a la disponibilidad de equipos ni en su adquisición.

Actualmente, hay diversos líderes que producen acroleína a partir de propileno entre los que destacan: Akzo Nobel N.V., Shanghai Huachen Energy Company, Ltd. and The Shell Oil, The Dow Chemicals Company, Arkema y Adisseo. Existe, por lo tanto, la tecnología requerida para llevar a cabo el proyecto, y el diseño puede realizarse basándose en los diversos licenciarios.

Es de gran importancia mencionar que se cuenta con membranas SEPURAN[®] en la estación de tratamiento del *off-gas*, que no será objeto de estudio en el presente proyecto. Se han seleccionado estas membranas debido a que se han diseñado exclusivamente para la recuperación del helio, y se utilizan industrialmente para tratar corrientes gaseosas compuestas por CO, CO₂, H₂O y N₂, además del He. Con el uso de estas membranas, se consigue una recuperación del helio del 99% (84).

10.4. Disponibilidad de mano de obra

En una planta química es fundamental contar con personal especializado en diversas áreas, de modo que se garantice su correcto funcionamiento y estabilidad a lo largo de los años. En la plantilla de trabajadores será necesario incluir personal cualificado de las múltiples ramas de la ingeniería, químicos, técnicos de laboratorio, administradores de empresa y especializados en finanzas. Estos empleados forman parte de la mano de obra directa de la planta, debido a que sus labores resultan indispensables en el proceso de producción.

Resulta conveniente analizar si en el entorno cercano a la ubicación de la planta del presente proyecto se encuentran estos profesionales. Como se especificó anteriormente, esta planta se encuentra en Tarragona. La ciudad pertenece a la comunidad autónoma de Cataluña, en donde se encuentran diferentes universidades como la Universitat Rovira i Virgili, la Universitat de Barcelona y la Universitat Autònoma de Barcelona, de las cuales todos los años egresan ingenieros, licenciados en Química, ingenieros técnicos industriales, licenciados en Administración y Dirección de Empresas, entre otros profesionales que buscan un futuro laboral. Debido a esto, se considera que se dispondrá de la mano de obra necesaria para el buen funcionamiento de la planta.

Por otro lado, también es necesario contar con personal de limpieza y de vigilancia, quienes forman parte de la mano de obra indirecta, debido a que sus labores no están vinculadas al proceso de producción.

Se ha decidido contar con 75 empleados como mano de obra directa de la planta de producción de acroleína, los cuales se organizan según su área de trabajo. Es importante tomar en consideración que hay ciertos puestos de trabajo que necesitan personal a toda hora del día, por lo tanto, se requieren más de un turno al día. También, hay que tener en cuenta que los trabajadores tendrán treinta días naturales de vacaciones al año, y un descanso semanal como mínimo de día y medio ininterrumpido si son trabajadores mayores de edad o de dos días ininterrumpidos si fueran menores de edad. La jornada de trabajo de los empleados será de 40 horas semanales (85). Debido a esto, se tendrá la siguiente organización:

- 3 turnos de 6 trabajadores en la línea de producción y mantenimiento de equipos. (de 6:00 a 14:00 horas, de 14:00 a 22:00 horas y de 22:00 a 6:00 horas)
- 3 turnos de 6 trabajadores en la sala de control (de 6:00 a 14:00 horas, de 14:00 a 22:00 horas y de 22:00 a 6:00 horas)
- 3 turnos de 5 trabajadores encargados de la recepción de materias primas, salidas de productos y gestión de existencias (de 6:00 a 14:00 horas, de 14:00 a 22:00 horas y de 22:00 a 6:00 horas)
- 3 turnos de 3 trabajadores en el laboratorio de calidad (de 7:00 a 15:00 horas y de 14:00 a 22:00 horas)
- 1 turno de 5 trabajadores en el departamento de ingeniería (de 8:00 a 14:00 horas y de 16:00 a 18:00 horas)
- 1 turno de 10 trabajadores encargados de la gestión administrativa, que forman parte de la junta directiva de la empresa (de 8:00 a 14:00 horas y de 16:00 a 18:00 horas)

Se ha decidido también que la mano de obra indirecta de la planta represente un 25% de la mano de obra directa, con lo cual, se contará con 19 empleados indirectos de la planta de producción de acroleína. La organización será la siguiente:

- 2 turnos de 3 trabajadores encargados de la limpieza de la planta (de 7:00 a 15:00 horas y de 14:00 a 22:00 horas)
- 3 turnos de 3 trabajadores encargados de la vigilancia de la planta (de 6:00 a 14:00 horas, de 14:00 a 22:00 horas y de 22:00 a 6:00 horas)
- 1 turno de 2 trabajadores encargados de la contabilidad de la planta (de 8:00 a 14:00 horas y de 16:00 a 18:00 horas)
- 2 turnos de 1 trabajador encargado de prestar soporte TIC (de 7:00 a 15:00 horas y de 14:00 a 22:00 horas)

10.5. Seguridad del proceso

En la planta del presente proyecto se produce acroleína, compuesto que es muy inflamable y presenta diversos riesgos a la hora de su almacenamiento y transporte, sin embargo, tomando las medidas adecuadas esto no representaría un impedimento para la realización del proceso productivo.

Según la clasificación Seveso III, la planta sería un establecimiento de nivel superior, por lo que se deben cumplir los requisitos necesarios estipulados en el Real Decreto 840/2015. En lo que respecta al índice de incendio y explosión DOW, el grado de peligro sería intenso en el reactor R-201, y en lo referente a la compatibilidad de las sustancias existe la posibilidad de que se lleven a cabo reacciones que den lugar a productos gaseosos.

En el proceso de producción no se trabaja con presiones muy elevadas, lo cual lo hace más seguro tanto para el entorno como para los mismos trabajadores. Sin embargo, se encuentran equipos que trabajan a gran temperatura, lo cual supone un posible riesgo. Por esto, se deben emplear las medidas necesarias para disminuir dicho riesgo como pueden ser: distanciamiento entre los equipos que presenten peligro, instruir adecuadamente a los trabajadores en los protocolos de seguridad a la hora de manipular los equipos, que el equipo cuente con las medidas correctas de alarma y control para mantener el proceso estable, entre otros.

En el apartado 14. *Seguridad* se realizará un estudio de seguridad a la planta de producción del presente proyecto, mostrando un análisis de los riesgos y peligros asociados a las sustancias empleadas en la producción, se determinarán las distancias de seguridad necesarias, entre otros aspectos fundamentales para asegurar el funcionamiento efectivo y seguro de la producción.

10.6. Análisis económico preliminar

Otro aspecto de gran importancia para el desarrollo de la planta de producción de acroleína del presente proyecto es conocer si esta será viable económicamente, es decir si resultará rentable. Como primera aproximación a la respuesta, se calculará una estimación del beneficio bruto teniendo en cuenta la reacción principal del proceso, con la que se obtiene el producto deseado. Para ello, se hará uso de los precios de las materias primas que se comprarán y del producto que se venderá, anteriormente expuestos en el apartado 7. *Estudio de mercado*.

En la Tabla 9, a continuación, se muestran los datos necesarios correspondientes a las corrientes de alimentación y producto, es decir las corrientes 1, 2 y 25 del diagrama de flujo presente en el *Documento II: Planos*. Cabe notar que no se toma en cuenta la corriente de oxígeno, debido a que este se toma del aire. Para el cálculo del beneficio bruto, se restará el coste de la compra de las materias primas, al precio de venta de la acroleína, expresándolo en euros por kg de acroleína. Se asumirá que se vende el 100% de la producción.

Tabla 9. Cálculo del beneficio bruto. Elaboración propia.

Parámetro	Helio	Propileno	Acroleína
kg/h totales	31,02	1.715,94	1.395,26
kg/kg acroleína	0,02	1,23	1,00
Precio (€/kg)	5,62	0,95	2,98
€/kg acroleína	0,12	1,17	2,98
Totales			
Beneficio bruto = 2,98 €/kg acroleína – 0,12 €/kg acroleína – 1,17 €/kg acroleína = 1,69 €/kg acroleína			

Cabe destacar que, para el caso del helio únicamente se están tomando 31,02 kg/h en el cálculo del beneficio bruto, aun cuando el caudal másico de la corriente 1 es de 620,40 kg/h. No obstante, solo se comprarán 31,02 kg/h de helio anualmente, y la cantidad restante se recirculará. Como el beneficio bruto resulta una cantidad positiva, entonces se concluye que en primera instancia la alternativa de producción de acroleína a partir de propileno es rentable.

11. Descripción del proceso

El proceso de producción de acroleína a partir de propileno, del presente proyecto, será descrito con detalle a continuación.

11.1. Capacidad de producción

Como se expuso en 1. *Objeto*, la planta tiene una capacidad de producción de 10.000 toneladas anuales de acroleína, operando de forma continua 320 días al año, las 24 horas del día. De esta manera, los 45 días restantes del año, o 46 si es bisiesto, se destinan a distintas operaciones que aseguren el correcto funcionamiento de la planta, incluyendo revisiones de equipos, mantenimiento y limpiezas.

11.2. Materias primas, subproductos y producto

Las materias primas a partir de las cuales se pone en marcha el proceso de producción de acroleína son propileno, helio como gas inerte, y aire. Estas sustancias fueron descritas anteriormente en el apartado 4. *Materias primas*, especificando las propiedades físicas y termodinámicas de cada una de ellas, así como también, aspectos importantes relacionados con su almacenamiento, transporte, requerimientos de calidad, seguridad y salud.

Al llevarse a cabo este proceso, se obtiene como producto principal la acroleína, nombrada por la IUPAC como 2-propenal. Adicionalmente, pueden ser aprovechados otros compuestos que se forman mediante las reacciones secundarias de este proceso, entre ellos: ácido acrílico, acético y acetaldehído. De manera similar a lo realizado con las materias primas, en los apartados 5. *Producto: 2-propenal* y 6. *Subproductos*, se describen las características de estas sustancias. Adicionalmente a las propiedades físicas y termodinámicas, para el caso del producto, se incluyen también sus propiedades químicas.

11.3. Servicios Auxiliares

Para el correcto desempeño de la planta es necesario utilizar diversas utilidades. Entre los servicios auxiliares necesarios para la continua operación en la planta, a continuación, serán nombrados aquellos presentes en el proceso usados para acondicionar las corrientes:

1. Agua de refrigeración: es utilizada para enfriar otras corrientes, a temperatura de 10 °C.
2. Mezcla de sales fundidas: su composición es de 7% de NaNO_3 , 49% NaNO_2 y un 44% de KNO_3 . Se emplea como fluido refrigerante en el reactor y como calefactor en algunos intercambiadores de calor. Estas sales son muy prácticas al trabajar a altas temperaturas.
3. Vapor de baja presión: esta corriente es empleada para proporcionar energía a las corrientes que la requieran. Siguiendo la heurística, se encuentra a 2 bar y opera de 135 - 120 °C.

11.4. Secciones del proceso

Justo como se expuso en el apartado 8.1. *Oxidación parcial de propileno*, donde se explica esta ruta de producción de acroleína, que posteriormente se selecciona como la alternativa a llevar a cabo en el presente proyecto, se introduce el proceso dividiéndolo en tres secciones. Estas corresponden con las mostradas en el diagrama de bloques de la alternativa, en la Figura 36.

No obstante, la descripción del proceso se explicará con detalle siguiendo el diagrama de flujo del presente proyecto recogido en el *Documento II: Planos*, profundizando en lo que ocurre en cada una de las secciones: acondicionamiento de materias primas, reacción, y separación y purificación del producto.

11.4.1. Sección 100: Acondicionamiento de las materias primas

El objetivo de esta sección es acondicionar las corrientes de materias primas, que son suministradas por proveedores externos a la entrada del proceso, de forma que se encuentren en las condiciones óptimas para su entrada al reactor R-201. Particularmente, se ha de modificar la presión y la temperatura de estas, así como asegurar la correcta unión de las corrientes.

La corriente 1, que contiene el helio proviene del tratamiento de los efluentes gaseosos del absorbedor T-302, se encuentra a 2,05 bar y 30 °C. Esta corriente será llevada hasta el punto de unión con las corrientes del aire y del propileno para dar lugar a la corriente 7.

El propileno suministrado por la compañía Repsol es almacenado en fase líquida en las condiciones adecuadas de 15,01 bar y 20°C. Como se ha mencionado anteriormente, se considerará el propileno como un compuesto puro. Sin embargo, se requiere en fase gas y a 2 bar para la reacción. Por consiguiente, la corriente 2 proveniente del almacenamiento, se hace pasar por la válvula VLV-101. En esta válvula se disminuye la presión, de forma que la corriente 3 de salida se encuentra a 2,05 bar. Mediante la disminución de presión, el propileno cambia de fase provocando a su vez un cambio brusco de temperatura, la cual disminuye hasta -30,86 °C.

Por otro lado, en la corriente 4 se tiene el flujo de aire a 25 °C y 1,01 bar, que es impulsado por el compresor K-101 hacia el filtro FT-101. Se emplea el filtro para eliminar las posibles partículas contaminantes presentes en la corriente, las cuales podrían afectar el funcionamiento de los equipos y obstruir el contacto con el catalizador en el reactor. La corriente de salida del filtro, corriente 6, se encuentra a 2,05 bar y 92,58 °C.

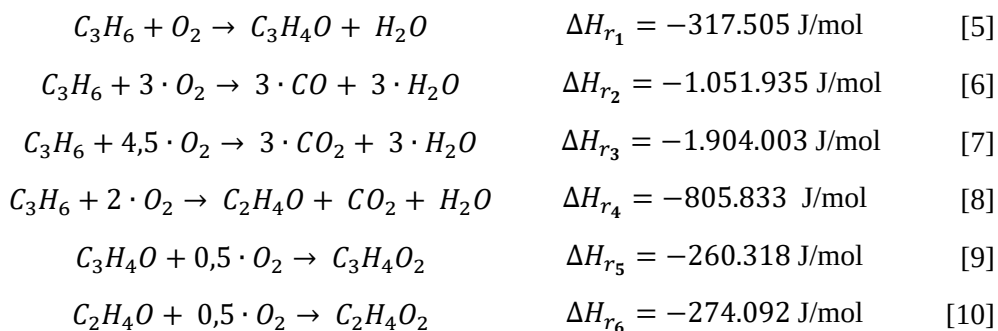
La corriente 7, que contiene el helio, propileno y el aire, se introduce en al intercambiador de calor E-101 para aumentar su temperatura hasta 189,22 °C. Posteriormente, la corriente de salida 8, se introduce el intercambiador E-102 para continuar el calentamiento de la corriente hasta 350 °C, temperatura requerida por el reactor. Finalmente, la salida de este intercambiador, corriente 9, es llevada a la sección de reacción de la planta.

11.4.2. Sección 200: Reacción

La corriente 9, que ya se encuentra acondicionada, es introducida al reactor R-201. Este reactor posee la configuración de carcasa y tubos al igual que un intercambiador de calor, lo que permite que opere isotérmicamente. Asimismo, al tratarse de una reacción catalítica heterogénea, en el interior de los tubos se encuentran las partículas esféricas de molibdato de bismuto multicomponente soportado en alúmina. La justificación de la selección de este catalizador y sus propiedades se encuentran en el apartado 2. *Catalizador seleccionado y sus propiedades del Anexo II: Cálculos justificativos. Parte B: Reactor R-201.*

Las reacciones presentes en el reactor son exotérmicas, de forma que la función del intercambio de calor es retirar el calor generado por cada una de las reacciones. Concretamente, el propileno es oxidado parcialmente para producir acroleína y el subproducto acetaldehído. A su vez, una cantidad de acroleína y acetaldehído reacciona con el oxígeno para formar los ácidos acrílico y acético, respectivamente. Sin embargo, parte del propileno también se oxida completamente formando óxidos de carbono (60).

Estas reacciones tienen lugar en el interior de los tubos, a unas condiciones de 350 °C y 2 bar. Para una mayor visualización se muestran a continuación las reacciones con su respectiva entalpía de reacción:



Cabe destacar, que la conversión del propileno es del 97% con una selectividad respecto a la acroleína del 83%. Mientras que, la conversión de la acroleína es de tan solo 10%.

Debido a las condiciones de operación del reactor, por el lado de la carcasa ha de circular una mezcla de sales fundidas denominadas Hitec. La composición de la mezcla es de 7% NaNO_3 , 49% NaNO_2 y un 44% de KNO_3 . Se emplean en el reactor debido a sus propiedades, que las hacen muy prácticas para trabajar a altas temperaturas (86). Las sales se encuentran en un circuito cerrado para mantener la temperatura de entrada a 260 °C, y al retirar el calor generado en el reactor la salida es de 290 °C. La corriente es enfriada nuevamente para la operación en continuo.

Por otro lado, el efluente del reactor contiene la acroleína junto con los subproductos formados, los reactivos que no reaccionaron y los inertes. La salida del reactor tiene una composición másica del 13,3% acroleína; 2% de ácido acrílico; 0,6% monóxido de carbono; 5,7% dióxido de carbono; 0,2% acetaldehído; 0,1% de ácido acético; 7,5% agua; 0,4% propileno; 3% oxígeno; 62,3% nitrógeno y un 4,9% de helio. Esta corriente 10 es llevada a la sección de separación y purificación para lograr separar las impurezas de la acroleína, hasta llegar a la pureza necesaria para su venta.

11.4.3. Sección 300: Separación y purificación

Esta sección es la última del proceso, y engloba cuatro equipos de separación. En esta sección se persigue un objetivo principal, el cual consiste en la obtención de la acroleína con las especificaciones de calidad exigidas: una pureza entre el 95% y 97%, y un contenido en impurezas de bajo punto de ebullición y agua menor al 2% y 4%, respectivamente. Todos estos porcentajes hacen referencia a la composición másica de la corriente de producto del proceso.

La corriente 10 que sale del reactor R-201, que contiene la acroleína, los subproductos y materias primas sin reaccionar, pasa por el intercambiador de calor E-301, donde su temperatura desciende desde 350 hasta 120 °C. La corriente 11 entra a la columna *quench* T-301, en el cual se separan los ácidos acético y acrílico, lavando la corriente gaseosa con agua de proceso, corriente 12. Los ácidos mencionados, junto con agua, acroleína y pequeñas cantidades de los gases de reacción que también fueron lavados, saldrán por colas del equipo, por la corriente 13, que se dirige a tratamiento de aguas residuales.

Por cabezas de la columna *quench* T-301 sale la corriente 14, que contiene mayoritariamente los gases de reacción y los subproductos que no se lavaron, a una temperatura de 48,09 °C y a 1,60 bar de presión. Esta corriente pasa por el intercambiador de calor E-302, del cual sale la corriente 15 a 20 °C y 1,57 bar de presión. Esta corriente se dirige a la columna de absorción T-302, cuyo principal propósito es absorber la acroleína en el agua que entra por la corriente 16. La corriente gaseosa 17 que sale por cabezas de este equipo contiene mayoritariamente las materias primas que no reaccionaron, los óxidos de carbono y los gases inertes de la reacción, mientras que en menor cantidad acroleína y acetaldehído. Esta corriente se dirige a una estación de tratamiento de *off-gas*, que no es objeto de estudio en el presente proyecto, en el cual se separará el helio de los demás compuestos gaseosos, para su posterior reutilización en el reactor. De manera que se reduzca la cantidad de helio a comprar continuamente, lo que supone un gran ahorro económico.

Por colas de la columna de absorción T-302, sale la corriente líquida 18 a 1,57 bar de presión y a una temperatura de 16,03 °C, pasa por la válvula VLV-301, por medio de la cual se disminuye la presión de la corriente hasta 1,09 bar, previamente a su entrada por cabezas de la columna de desorción T-303. Esta corriente contiene agua, acroleína, acetaldehído y dióxido de carbono, así como trazas de los ácidos acrílico y acético que no han sido totalmente eliminados del proceso. En esta columna lo que se persigue es desorber la acroleína en el vapor de agua, corriente 20.

De esta manera se elimina una cantidad considerable de agua junto a las trazas de los ácidos mencionados, que saldrán por colas del equipo, en la corriente 21, que se dirige a tratamiento de aguas residuales. Por consiguiente, la acroleína, el acetaldehído y el dióxido de carbono se transfieren al vapor, que sale por cabezas de la columna de desorción T-303, por la corriente 22, a 90,92 °C y 1,09 bar de presión. Esta corriente se dirige al condensador total E-303, del cual sale la corriente 23 condensada, que será impulsada posteriormente por la bomba P-301 A/B hasta la columna de destilación T-304.

La corriente 24 entra a la columna de destilación T-304 como líquido saturado a 53,30 °C y 1,12 bar de presión. El principal objetivo de la columna de destilación es enriquecer la corriente de producto en acroleína, de manera que se cumplan con los requerimientos de calidad exigidos para su venta. Por cabezas de la columna sale una corriente de vapor que se dirige al condensador total E-304, luego el condensado se acumula en el tambor de reflujo V-301. De este último, se bombean la corriente de reflujo, empleando la bomba P-302 A/B, y la corriente de destilado, mediante la bomba P-303 A/B.

La corriente de destilado corresponde a la corriente 25, que se encuentra a 51,99 °C y a presión atmosférica, contiene el producto deseado del proceso del presente proyecto con una composición en peso del 95,83%. El porcentaje restante se comprende de agua (3,42% en peso), acetaldehído (0,65% en peso) y dióxido de carbono (0,09% en peso). Por otro lado, la corriente de reflujo se reintroduce a la columna, con caudal molar de 0,62 veces la corriente de destilado.

Paralelamente, sale por colas de la columna de destilación T-304 una corriente líquida, compuesta por agua y trazas de acroleína. Esta corriente, impulsada por la bomba P-304 A/B, se hace pasar por la caldera parcial E-305, de la cual sale la corriente vaporizada que se reintroduce a la columna como *boil-up*, y la corriente 26 que sale como líquido saturado, a 94,75 °C y 1,14 bar, y es enviada para tratamiento de aguas residuales.

12. Descripción de equipos

En la Tabla 10 y se muestran los equipos presentes en la planta de producción del presente proyecto y la nomenclatura que se empleará para cada uno de ellos en el *Documento II: Planos*.

Tabla 10. Lista de los equipos presentes en la planta de producción de acroleína.

Equipo	Nomenclatura
Sección 100	
Válvula de entrada de propileno	VLV-101
Compresor del aire	K-101
Filtro del aire	FT-101
Intercambiador de calor	E-101
Intercambiador de calor	E-102
Sección 200	
Reactor	R-201
Sección 300	
Intercambiador de calor	E-301
Columna <i>quench</i>	T-301
Intercambiador de calor	E-302
Columna de absorción	T-302
Válvula	VLV-301
Columna de desorción	T-303
Condensador	E-303
Bomba de entrada a la columna de destilación	P-301 A/B
Columna de destilación	T-304
Condensador total	E-304
Tanque de reflujo	V-301
Bomba de reflujo	P-302 A/B
Bomba de producto	P-303 A/B
Bomba hacia caldera	P-304 A/B
Caldera parcial	E-305

- **Válvula VLV-101:** Esta válvula es encargada de disminuir la presión la corriente 2, la cual da entrada del propileno al proceso, disminuyendo la presión de 15 a 2,05 bar.
- **Compresor K-101:** Tiene como objetivo darle entrada a la corriente de aire del ambiente al proceso. Se trata de un compresor reciprocante que lleva el aire del ambiente hacia el filtro FT-101. Existe un cambio de presión de 1,01 a 2,15 bar y necesita una potencia de 259,85 kW.
- **Filtro de aire FT-101:** Este filtro tiene como función asegurar que el aire alimentado al proceso (corriente 6) se encuentre libre de impurezas que puedan afectar al resto de equipos disminuyendo su rendimiento. Presenta una pequeña caída de presión de 2,15 bar a 2,05 bar.
- **Intercambiador de calor para el acondicionamiento de las materias primas E-101:** Este intercambiador de calor se encarga de aumentar la temperatura de la corriente 7 de 28,44 hasta 189,22 °C. Posteriormente, la corriente de salida (corriente 8) entra al intercambiador de calor E-302. El intercambio se realiza utilizando sales fundidas para calentar la materia prima.
- **Intercambiador de calor para el acondicionamiento de las materias primas E-102:** Este intercambiador de calor E-102 se encarga de aumentar la temperatura de la corriente 8 de 189,22 a 350 °C, la cual es la temperatura necesaria para llevar a cabo la reacción en el reactor R-201. El intercambio se realiza utilizando sales fundidas para calentar la materia prima.
- **Reactor R-201:** Corresponde a un reactor catalítico que consta de una configuración carcasa y tubos. En los diversos tubos se encuentran las partículas del catalizador divididas uniformemente. El fluido reactante y los inertes, presentes en la corriente 9, se hacen pasar por los tubos y mientras tiene lugar las reacciones (que son además todas exotérmicas), se retira el calor generado con las sales fundidas que circulan por la carcasa del equipo. De esta forma el reactor opera isotérmicamente a 350 °C y 2 bar. Dado que las reacciones tienen lugar en fase gas se trata de un reactor catalítico heterogéneo con una caída de presión de 0,09 bar.

El diseño riguroso de este equipo se encuentra en el *Anexo II: Cálculos justificativos* siguiendo el código de diseño ASME BPV Sec. VIII Div.1 y las normas estándares de TEMA. Cabe destacar entre otras cosas, su orientación vertical con una altura de 5,99 m y un diámetro externo de 2,56 m. Asimismo, este recipiente cilíndrico es construido empleando el material de acero inoxidable de grado 304 tanto para la carcasa como para los tubos.

Además, posee un volumen del lecho de 8,62 m³ y cuenta con un aislante de fibra de vidrio alrededor de la carcasa con un espesor estandarizado de 89 mm para reducir las pérdidas de calor de las sales fundidas al exterior. Al igual que sirve para incrementar la seguridad de los operarios en la zona que puedan entrar en contacto con el equipo.

- **Intercambiador de calor E-301:** Es utilizado para enfriar la corriente procedente del reactor R-201, corriente 10, desde 350 a 120 °C para llegar a las condiciones necesarias para entrar en la columna *quench* T-301, corriente 11. Para este intercambiador se utiliza como agente refrigerante agua.
- **Columna *quench* T-301:** El objetivo de este equipo es separar los ácidos acético y acrílico de la corriente de proceso, lavando la corriente gaseosa con agua, y de esta manera eliminar estos subproductos de la corriente del producto. Este consta de 10 etapas de contacto, una altura de 7,5 metros y un diámetro de 2 metros. Presenta una eliminación de aproximadamente 97% de los ácidos formados en el reactor y trabaja a una presión de aproximadamente 1,9 bar y a 120 °C.
- **Intercambiador de calor E-302:** Se emplea para enfriar la corriente procedente de la columna *quench* T-301, corriente 14, desde 48,09 a 20 °C, obteniendo así la corriente 15 acondicionada para la entrada a la columna de absorción T-302. Se utiliza como agente refrigerante agua.
- **Columna de absorción T-302:** Esta columna tiene como función absorber la acroleína formada en el reactor R-201 en un caudal de agua para de esta forma recuperar la mayor

cantidad de acroleína posible, a la vez que se busca eliminar el resto de los gases que constituyen la corriente. La corriente 15 de proceso entra por colas de la columna mientras que la corriente 16 de agua entra por cabezas de la columna, se tiene un contacto en contracorriente dentro de la columna y posteriormente sale la corriente 18 por colas con la acroleína absorbida y la corriente 17 con los gases no absorbidos por cabezas.

El diseño de la columna se incluye en *el Anexo II: Cálculos justificativos. Parte C: Columna de absorción T-302*, siguiendo el código de diseño ASME BPV Sec. VIII Div.1. La columna es diseñada como una columna de relleno, utilizando relleno tipo monturas de Berl cerámicos de 25 mm, la altura de relleno es de 1,42 m y presenta un diámetro de 1,64 m. Opera a una temperatura máxima de 20 °C y opera a una presión de 1,57 bar y presenta una caída de presión de 0,018 bar.

- **Válvula VLV-301:** Su objetivo es disminuir la presión de la corriente 18 proveniente de la columna de absorción T-302 para su entrada en la columna de desorción T-303. Se disminuye la presión de 1,57 bar a 1,09 bar.
- **Columna de desorción T-303:** Esta columna tiene como principal objetivo eliminar el agua y las trazas de ácidos de la corriente 19, que puedan no haberse eliminado en la columna *quench* T-301, con la finalidad de concentrar la acroleína en el proceso. La columna cuenta con 13 platos, un diámetro de 1,32 metros, una altura de 10,20 metros, y elimina el 97,5% de agua presente en la corriente de proceso. El equipo trabaja a presión atmosférica.
- **Condensador E-303:** Este condensador se encarga de realizar un cambio de fase en la corriente gaseosa que abandona la columna de desorción T-303, corriente 22, obteniendo la corriente 23, que cumple con las condiciones físicas necesarias para su posterior entrada a la columna de destilación T-304. A la vez que existe un cambio de fase, también ocurre un cambio de temperatura el cual es de 90,92 °C a 53,30 °C.
- **Bomba P-301 A/B:** La bomba centrífuga P-301 A/B se emplea para impulsar la corriente 23 desde el condensador E-303 hacia la columna de destilación T-304, corriente 24. Existe un aumento de presión desde 1,07 bar hasta 1,14 bar.
- **Columna de destilación T-304:** Corresponde al último equipo de separación de la planta de producción de acroleína del presente proyecto. Se trata de una columna de destilación a la cual se le alimenta un líquido saturado compuesto por acroleína, agua y trazas de acetaldehído y dióxido de carbono. Los compuestos más volátiles, acroleína y las trazas de acetaldehído y dióxido de carbono, saldrán por la corriente de destilado, mientras que el agua, al ser el compuesto menos volátil, saldrá por la corriente de colas. Mediante el empleo de esta columna de destilación, se pretende enriquecer la corriente de producto en acroleína, de modo que se cumpla con las especificaciones de calidad requeridas para su venta. Para ello, se ha decidido que el tipo de dispositivo de contacto de esta columna sean platos, debido a que es el más usado industrialmente para la separación en cuestión.

El diseño riguroso de la columna de destilación se incluye en *el Anexo II: Cálculos justificativos. Parte D: Columna de destilación T-304*, siguiendo el código de diseño ASME BPV Sec. VIII Div.1. La columna opera a presión atmosférica, y una vez realizados los cálculos, se ha obtenido que la caída de presión en este equipo es de 0,13 bar. Para conseguir la separación deseada, serán necesarios 11 platos reales, tomando en cuenta que la eficacia de la columna es de 37,62%. Esta columna presenta un diámetro externo estandarizado de 0,508 m, un espesor de 9,525 mm y una altura de 8,08 m, construyéndose sobre un soporte de tipo falda recta. Se utiliza acero inoxidable 304 como material de construcción de la columna, sus platos y soporte.

La columna de destilación T-304 cuenta con un condensador total y una caldera parcial para su correcto funcionamiento, empleando como utilidades agua de refrigeración y vapor a baja presión, respectivamente. Además, su carcasa se recubre con un material aislante, fibra de vidrio, de 25,40 mm de espesor estandarizado, para reducir las pérdidas de calor y por temas

de seguridad, debido a que empleando este material aislante se reducen los riesgos por quemaduras en caso de que algún operario entre en contacto con el equipo.

- **Condensador total E-304:** Corresponde al condensador total utilizado en la columna de destilación T-304 que emplea agua como agente refrigerante para cambiar de fase la corriente de vapor que sale por cabezas de la columna, modificando su temperatura de 52,03 °C a 51,99 °C.
- **Tambor de reflujo V-301:** Tiene como finalidad almacenar la corriente que ha sido condensada en el condensador E-304. De este equipo sale una corriente que se divide en dos: la corriente que se dirige a la columna como reflujo y la corriente que sale como destilado.
- **Bomba centrífuga P-302 A/B:** es utilizada para bombear la corriente de reflujo hacia la columna de destilación T-304. Existe un aumento de presión desde 1 bar hasta 1,03 bar.
- **Bomba centrífuga P-303 A/B:** tiene como finalidad impulsar la corriente de destilado que contiene el producto finalizado, para su posterior envío a los clientes. Existe un aumento de presión desde 1 hasta 1,03 bar.
- **Bomba centrífuga P-304 A/B:** se encarga de impulsar la corriente que sale por colas de la columna de destilación T-304 hacia la caldera parcial E-305. Existe un aumento de presión desde 1,14 hasta 1,18 bar.
- **Caldera parcial E-305:** corresponde a la caldera parcial utilizada en la columna de destilación T-304 que emplea vapor de agua a baja presión como agente calefactor para vaporizar parcialmente la corriente de líquido que sale por colas de la columna, cambiando su temperatura de 57,25 °C a 94,75 °C. De ella saldrán dos corrientes: la corriente vaporizada que se devuelve a la columna como *boil-up* y la corriente 26, de líquido saturado, que se dirige a tratamiento de agua residual.

13. Control e instrumentación

13.1. Introducción

Siempre que una planta química se encuentre operativa, se debe tener implementado un sistema de control, de modo que, aún en presencia de perturbaciones externas se sigan cumpliendo los objetivos establecidos. Estos objetivos incluyen: mantener la seguridad en planta, cumplir con las especificaciones de producción, mantener la composición del producto deseado dentro de los requerimientos de calidad establecidos, garantizar que la operación de la planta se mantenga al menor coste de producción posible, cumpliendo con las limitaciones operacionales de los equipos y con lo establecido en legislaciones aplicables al proceso, incluyendo las medioambientales (87).

Siguiendo esta línea, el sistema de control implementado eliminará los efectos no deseados de las perturbaciones externas, garantizará la estabilidad del proceso, y se optimizará su rendimiento. Para ello, el sistema de control debe contar con instrumentación adecuada, como dispositivos de medida, controladores y válvulas (87).

13.2. Sistemas de control: variables y componentes

Para poder identificar la necesidad de los lazos de control, reconocer cuáles variables se requieren controlar, y cómo se debe proceder a su control, se vuelve importante introducir brevemente y de forma general las variables que constituyen un proceso químico. Estas se pueden categorizar en (88):

- Variables de entrada, son aquellas que indican la influencia del medio sobre el proceso. A su vez pueden clasificarse en variables manipuladas, si sus valores pueden verse alterados bien por un operario o por un sistema de control, o en perturbaciones, si sus valores están alterados únicamente por el medio, ajeno al proceso.
- Variables de salida, son las variables controladas, aquellas que indican la influencia del proceso sobre el medio. De acuerdo a si pueden medirse directamente o no, se clasifican en

variables de salida medidas o no medidas, respectivamente. El valor determinado en el que se desea mantener la variable controlada se denomina punto de consigna o *set-point*.

Los sistemas de control se componen de cuatro elementos, explicados brevemente a continuación, de forma que se ilustre su funcionamiento (88).

- Sensores/transmisores, son elementos primarios, mediante los cuales se miden las variables de proceso y se convierte la lectura de la medida en una señal estándar, enviándola al controlador.
- Controladores, son los encargados de comparar la señal recibida con los datos del punto de consigna. Para realizar su función, los controladores presentan un algoritmo, también conocido como ley de control, que permiten realizar una acción correctiva en caso de que sea necesaria.
- Elementos finales de control, generalmente son válvulas de control que reciben la señal estándar enviada por el controlador, y actúan sobre la variable manipulada.
- Proceso, corresponde al sistema controlado, el cual se ve influenciado por perturbaciones.

Lo explicado se puede visualizar en el diagrama de bloques genérico de la Figura 50.

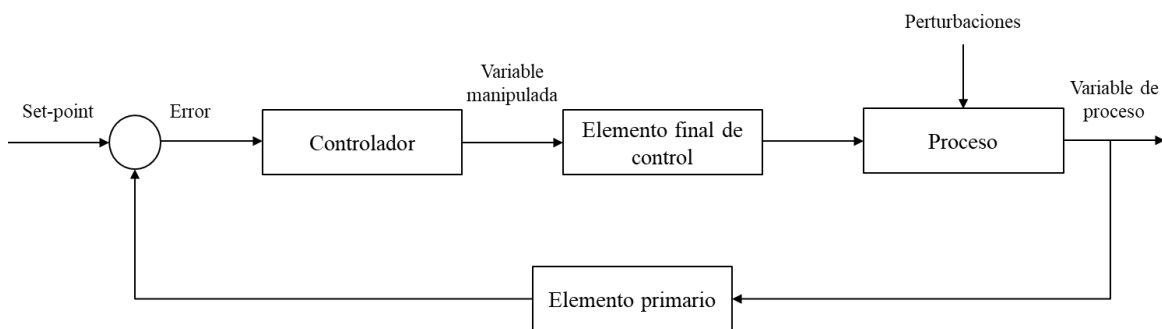


Figura 50. Diagrama de bloques de un sistema de control con una variable controlada y con una variable manipulada. Elaboración propia, adaptado de (88).

Cabe destacar que el error corresponde a la diferencia entre el valor del punto de consigna y el valor de la variable controlada, también referida como variable de proceso. Debido a que el error causa la acción del controlador, resulta importante el signo del error. Una realimentación positiva supondría una contribución del controlador que amplificaría el error, empeorando la estabilidad del sistema. Por el contrario, una realimentación negativa supondría una contribución del controlador que disminuiría el error, aportando estabilidad al sistema (88).

Además, los elementos del lazo de control, de forma individual, pueden contribuir a amplificar o reducir el error, de acuerdo a la acción de cada uno sobre el lazo de control, la cual puede ser (88):

- Directa, también conocida como I/I, incremento/incremento. Este tipo de acción está referida a los casos en los cuales existe un aumento en la entrada de alguno de los elementos del lazo de control, y se produce un aumento en su salida.
- Inversa, también conocida como I/D, incremento/disminución. Al contrario de la acción directa, la acción inversa se refiere a cuando un elemento del lazo de control experimenta un aumento en su entrada, y se produce una disminución en su salida.

No obstante, para poder mantener la estabilidad del sistema, la acción global del lazo debe ser I/D.

Como se comentó anteriormente, en un sistema de control hay dispositivos de entrada, sensores y transmisores, controladores, y los dispositivos de salida, actuadores. En la industria moderna, los sistemas de control corresponden a sistemas programables basados en microprocesadores. Los controladores lógicos programables, conocidos como *PLC*, *Programmable Logic Controllers*, se introdujeron en la industria como sustitutos electrónicos de relés electromecánicos (89).

Tal como su nombre lo indica, los *PLC* son dispositivos programables, y es por ello que resultan tan útiles, pues el usuario programa al *PLC* para que realice la función de control que se desea. Es decir, se le da instrucciones para actuar de acuerdo a las señales de entrada que recibe. Además, son dispositivos que se pueden reprogramar en caso de que se quiera cambiar el algoritmo de control a implementar. Y, al estar conectados a ordenadores, ofrecen la ventaja de poder monitorear el proceso por múltiples operarios (89).

Resulta interesante comentar que los *PLC* nacieron para aplicaciones de control discreto, encendido/apagado. Sin embargo, han evolucionado y hoy en día se puede utilizar un *PLC* hasta para implementar el algoritmo de control PID (89).

Entre los dispositivos conectados a las entradas de un *PLC* se encuentran interruptores, sensores, transmisores analógicos (4-20 mA), termopares, entre otros. Y, los dispositivos conectados a las salidas de un *PLC* pueden ser lámparas eléctricas, bobinas de relé, solenoides, elementos de control final analógico, como válvulas de control de estrangulamiento, accionamientos de motores, etc. (89).

13.3. Configuraciones de control

De acuerdo con el número de variables manipuladas y controladas en los procesos, existen dos tipos de configuraciones de control: SISO, por las siglas en inglés de *Single-Input-Single-Output*, corresponden a sistemas que tienen una sola variable de entrada y una sola variable de salida, y MIMO, por las siglas en inglés de *Multiple-Input-Multiple-Output*, corresponden a sistemas con múltiples variables de entrada y de salida (88).

Por otro lado, la configuración de control más utilizada en la industria de procesos es el control *feedback*, debido a que corresponde a una estrategia de control sencilla. Sin embargo, existen otras configuraciones de control referidas como técnicas más complejas, que, si son convenientes de implementar, pueden proporcionar un sistema de control mejorado. Entre estas configuraciones más complejas se encuentra el control supervisorio, el control *feedforward*, el control en cascada y el control relacional (88).

Una vez analizados todos los lazos de control que se incluirán en el proceso de producción de acroleína del presente proyecto, se procede a explicar a continuación aquellas configuraciones de control utilizadas.

13.3.1. Control *feedback*

De todas las configuraciones de control existentes, el control *feedback* es la más sencilla. Consiste en medir la variable de proceso, es decir, la variable que está siendo controlada, comparar su valor con el punto de consigna, y debido a la diferencia entre dichos valores, resultará un error. De acuerdo al error, se actúa sobre la variable manipulada, compensando así la desviación existente provocada por perturbaciones en el sistema. De esta manera, la variable controlada vuelve al valor del punto de consigna. En la Figura 51 se ilustra el funcionamiento del sistema de control *feedback* (88).

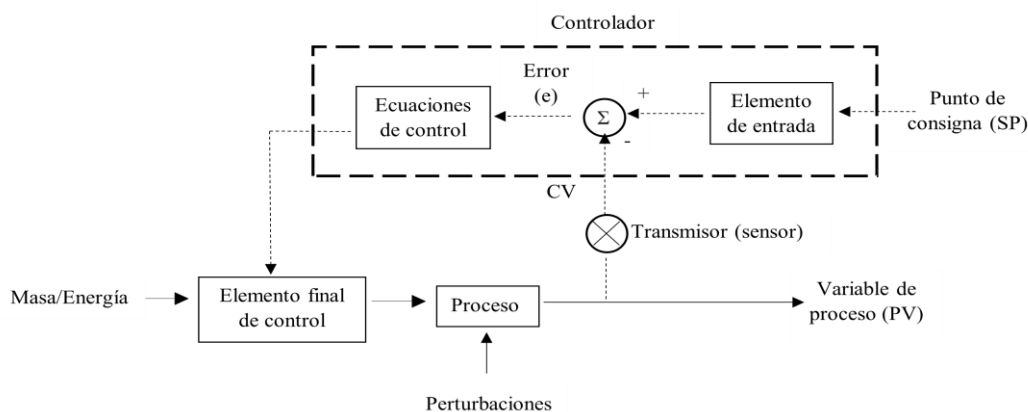


Figura 51. Sistema de control *feedback*. Elaboración propia, adaptado de (88).

Existen dos tipos de control *feedback*, positivo y negativo. Sin embargo, el único que resulta conveniente utilizar es el *feedback* negativo, pues es el que tiende a estabilizar al sistema, provocando disminuciones en el error (88).

13.3.2. Control *feedforward*

El control *feedforward* es una configuración de control que permite corregir las perturbaciones antes de que afecten al proceso. Es decir, proporciona acciones correctivas al haber una perturbación. Si bien, para ello los modelos matemáticos deben ser capaces de responder de manera precisa para obtener la respuesta deseada, lo cual en ciertos casos puede ser complicado (88).

En la Figura 52 se ilustra el funcionamiento de la configuración de control *feedforward*. Cabe destacar que, esta configuración de control resulta muy útil cuando las desviaciones del valor de la variable controlada respecto a su valor de consigna no son aceptables, y siempre deben ser las mínimas posibles (88).

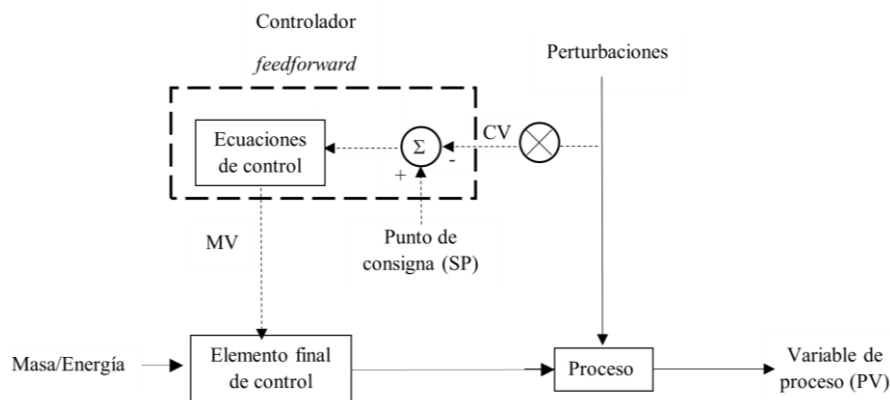


Figura 52. Sistema de control *feedforward*. Elaboración propia, adaptado de (88).

13.3.3. Control en cascada

Esta configuración de control incluye dos lazos de control *feedback*, estando uno anidado dentro del otro. Por lo tanto, habrá dos controladores, al primero se le conoce como primario o maestro y al segundo se le denomina secundario o esclavo. La señal de salida del controlador primario corresponderá al punto de consigna del secundario. Cada uno de los lazos tendrá su tiempo de respuesta, y generalmente la aplicación del control en cascada resulta útil cuando el tiempo de respuesta del lazo primario es al menos 4 veces el tiempo de respuesta del lazo secundario (88).

En la Figura 53 se ilustra el funcionamiento del sistema de control en cascada. Esta técnica de control avanzada evita que las perturbaciones puedan llegar a afectar a la variable de proceso (88).

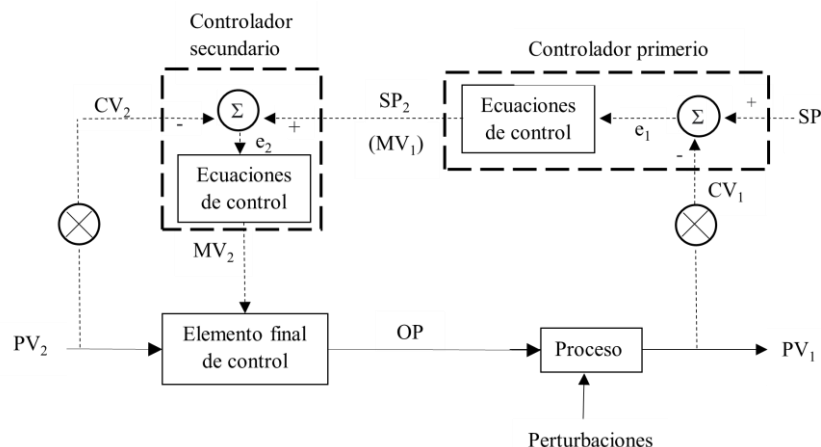


Figura 53. Sistema de control en cascada. Elaboración propia, adaptado de (88).

13.4. Algoritmos de control

El algoritmo de control corresponde a las ecuaciones que han sido programadas en el controlador para realizar su función. Al algoritmo de control también se le conoce como ley de control (88). A continuación, se presenta la Tabla 11, en la que se resumen los diferentes algoritmos de control existentes. De acuerdo al funcionamiento de cada uno, se puede optar por utilizar uno u otro.

Tabla 11. Características de los diferentes algoritmos de control existentes. Elaboración propia, a partir de (88).

Controlador	Descripción
Proporcional, P	Es el más sencillo. Se previenen las oscilaciones de la variable de proceso, pero no hay seguridad de que la devuelva al valor de consigna aun cuando se alcanza el estado estacionario. Dicho error sostenido se conoce como <i>offset</i> . No obstante, proporciona una respuesta muy rápida comparada con los otros.
Integral, I	Siempre que exista un error, <i>offset</i> , la acción de este controlador se basa en eliminarlo. A pesar de esto, este algoritmo no se suele implementar solo debido a que resulta muy lento en proporcionar respuestas.
Proporcional-Integral, PI	Es el más utilizado en las plantas industriales. Por su acción proporcional, presenta un tiempo de respuesta mucho más corto que el integral solo, pero mayor al proporcional solo. Y, por la acción integral, se ajusta para eliminar cualquier error, devolviendo la variable de proceso a su punto de consigna.
De acción derivativa	Pronostica la dirección del proceso, basándose en la velocidad de cambio del error. Esta acción nunca se emplea sola en el algoritmo de control, debido a que no reconoce el valor de consigna de la variable de proceso. Desestabiliza el sistema si hay existencia de ruido.
Proporcional-Derivativo, PD	Este tipo de controlador tendrá una mayor rapidez en su tiempo de respuesta que el proporcional solo. Habrá un <i>offset</i> menor, no obstante, no se consigue devolver la variable de proceso a su punto de consigna. Solo se emplea en casos particulares, por ejemplo, en lazos de control de pH.
Proporcional-Integral-Derivativo, PID	La acción derivativa en este tipo de controlador compensa el retardo en el tiempo de respuesta debido a la acción integral. Se consigue entonces una respuesta rápida, como el controlador proporcional, pero eliminando el <i>offset</i> . Funciona muy bien, pero no debe emplearse si existe ruido en el sistema.

Para la elección del algoritmo de control a emplear en el controlador, de acuerdo con la variable que se desea controlar, se puede emplear el diagrama de flujo de la Figura 54.

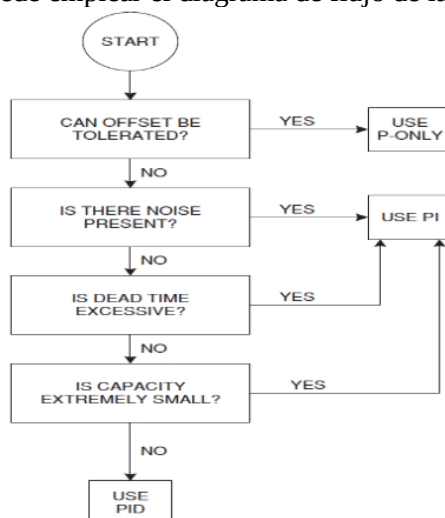


Figura 54. Diagrama de flujo para la elección del algoritmo de control (88).

Generalmente, para controlar el nivel se suelen emplear controladores P. Para el control de presión y de caudal, es frecuente el uso de controladores PI. Con respecto al control de la temperatura, es posible aplicar controladores P, PI o PID, de acuerdo al comportamiento del sistema (88).

En el caso de los lazos de control a implementar en el presente proyecto, luego de haber sido analizados, se ha decidido implementar controladores PI cuando las variables a controlar son la presión, el caudal y la temperatura. Las razones son las siguientes: el control de presión presenta ruido, el control de caudal presenta una capacitancia muy pequeña, y el control de la temperatura tiene una velocidad de respuesta lenta, lo que conduce a tiempos muertos considerables (88). Teniendo en cuenta esto, y el algoritmo de la Figura 54, se conduce a la selección del controlador PI. Mientras que, si la variable a controlar es el nivel, es aceptable la existencia de un *offset*, por lo tanto, el controlador elegido es el P, siendo este el más sencillo y considerablemente rápido.

13.5. Selección y justificación de las variables controladas

Se deben identificar aquellas variables que puedan llevar a que se superen los límites operacionales en los casos en que sus valores no sean los establecidos como puntos de consigna. Asimismo, identificar las variables que puedan influir en las especificaciones del producto deseado. Todas estas variables deben permanecer bajo control, de modo que la operación de la planta no se vea comprometida (88).

Para establecer lazos de control, se seleccionarán variables manipuladas. Por su parte, estas deben influir en las variables controladas, de manera rápida y significativa (88). En las tablas a continuación, se resumen la selección de variables controladas en el proceso, así como también su justificación, siguiendo el diagrama de flujo presente en el *Documento II: Planos*.

Tabla 12. Variables controladas a la entrada de las materias primas.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de caudal	Caudales de entrada, corrientes 1, 3 y 5	Al controlar los flujos de entrada al sistema se garantiza que el propileno se encuentre por debajo de su límite de inflamabilidad. Además, permite operar con un caudal constante en el reactor evitando fluctuaciones en la producción. Este además establece un control indirecto de la presión.	Los caudales corrientes 1, 3 y 5 (Flujos de helio, propileno y aire respectivamente)

Tabla 13. Variables controladas de los intercambiadores de calor E-101 y E-102.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de temperatura	Temperatura de las corrientes 8 y 9	El objetivo es garantizar que la temperatura de entrada al reactor sea de 350 °C, la cual es requerida para la producción establecida en el reactor.	Sus respectivos caudales de los fluidos calefactores

Tabla 14. Variables controladas en el reactor R-201.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de temperatura	Temperatura a la salida del reactor, corriente 10	Las reacciones que tienen lugar en el reactor son exotérmicas, siendo fundamental el control de la temperatura en el reactor para minimizar la producción de subproductos y evitar llegar una reacción fuera de control (<i>runaway</i>).	Caudal del fluido refrigerante empleado en el reactor

Tabla 15. Variable controlada en el intercambiador de calor E-301.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de temperatura	Temperatura en la corriente 11	El objetivo es garantizar que la temperatura de entrada a la columna <i>quench</i> T-301 sea de 120 °C. Esta temperatura es necesaria para alcanzar el nivel deseado de eliminación de ácidos.	Caudal de agua como fluido refrigerante en el intercambiador E-301

Tabla 16. Variable controlada en columna *quench* T-301.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de temperatura	Temperatura en la columna <i>quench</i> T-301	Por medio del control de la temperatura en la columna <i>quench</i> T-301, se controla la composición de la corriente 14 de salida.	Caudal de agua a la entrada de la columna, corriente 12

Tabla 17. Variable controlada en el intercambiador de calor E-302.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de temperatura	Temperatura en la corriente 15	El objetivo es garantizar que la temperatura de entrada a la torre de absorción sea de 20 °C. Esta temperatura es necesaria para alcanzar el nivel deseado de absorción de la acroleína en el agua.	Caudal de agua empleada como fluido refrigerante en el intercambiador E-302

Tabla 18. Variable controlada en la columna de absorción T-302.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de temperatura	Temperatura en la columna de absorción T-302	Por medio del control de la temperatura en la columna de absorción T-302, se controla la composición en la corriente de salida 18. Relacionando la temperatura con la composición por medio del equilibrio líquido-vapor.	Caudal de agua a la entrada de la columna, corriente 16
Control presión	Presión en la columna de absorción T-302	Se busca regular la presión del proceso aguas arriba.	Caudal de <i>off-gas</i> a la salida por cabezas de la columna, corriente 17

Tabla 19. Variables controladas en la columna de desorción T-302.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de temperatura	Temperatura en la columna de desorción T-303	Por medio del control de la temperatura, se controla indirectamente la composición de la corriente 22 de salida por cabezas, pues la temperatura se relaciona con la composición por medio del equilibrio líquido-vapor.	Caudal de vapor de agua a la entrada de la columna, corriente 20
Control de nivel	Nivel de líquido en la columna de desorción T-303	Se busca prevenir que la columna T-303 se inunde.	Caudal de agua residual a la salida por colas de la columna, corriente 21

Tabla 20. Variables controladas en el intercambiador de calor E-303.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de temperatura	Temperatura en la corriente 23	El objetivo es garantizar que se retire la energía necesaria para condensar la corriente 22 y adecuar su temperatura. Por lo cual, se controla la temperatura de la corriente 23, para mantenerla en el valor deseado.	Caudal de agua de refrigeración del intercambiador E-303

Tabla 21. Variables controladas en la columna de destilación T-304.

Objetivo	Variable controlada	Justificación de la variable controlada	Variable manipulada
Control de presión	Presión en la columna de destilación T-304	Se busca mantener la presión en cabezas de la columna en su valor de consigna, de modo que se eviten situaciones no favorecedoras que puedan afectar a la operación de esta columna.	Caudal de fluido refrigerante en el condensador total E-304
Control de nivel	Nivel de líquido en el tambor de reflujo V-301	Resulta necesario controlar el nivel de condensado en el tambor de reflujo V-301 para evitar que se inunde.	Caudal de la corriente de destilado, corriente 25
Control de temperatura	Temperatura en la columna de destilación T-304	Con la finalidad de conseguir que la composición del producto sea la deseada, se establece un control de temperatura, empleándola como una medida indirecta de la composición, por el equilibrio líquido-vapor.	Caudal de la corriente de reflujo a la columna
Control de caudal	Caudal de la corriente de <i>boil-up</i> a la columna	Es importante mantener el caudal de vapor que regresa a la columna, <i>boil-up</i> , en su valor determinado, para evitar alteraciones en la separación deseada.	Caudal de la corriente de fluido calefactor en la caldera parcial E-305
Control de nivel	Nivel de líquido en la columna de destilación T-304	Resulta importante controlar el nivel de líquido en la columna para evitar su inundación.	Caudal de la corriente de colas, corriente 26

13.6. Instrumentación

Gracias a la aplicación de instrumentos y sensores, el sistema de control de los procesos puede estar completamente automatizado, de manera que se vuelva independiente de los operadores. Existe una sutil diferencia entre un instrumento y un sensor, y es que, el primero corresponde a un dispositivo que mide y muestra la magnitud de una variable física, mientras que el segundo solo mide la amplitud de una variable física, sin aportar una indicación directa de su valor. Por lo tanto, cuando se quiere conocer la magnitud de una variable física se puede hacer uso de diferentes dispositivos de medida, como por ejemplo los mencionados a continuación (90).

- Presión: manómetro de Bourdon, fuelles, manómetros de tubo en U, entre otros.
- Nivel: medidores ultrasónicos, capacitivos, de sonda, de tipo burbujeo, entre otros.
- Caudal: medidores electromagnéticos, ultrasónicos, entre otros. La elección dependerá de varios factores como la precisión, la velocidad, el tamaño de la conducción, etc.
- Temperatura: termómetros de mercurio, dispositivos semiconductores, termopares, etc.

Por su parte, hay otras variables que también resultan conveniente de medir y controlar, como ejemplo está la composición. Es cierto que existen dispositivos, como cromatógrafos y analizadores infrarrojos, con los que se puede medir la composición. No obstante, al emplear un cromatógrafo de gases se necesitan 15-30 minutos para medir la composición. Por otro lado, los analizadores infrarrojos son para medidas en continuo, pero resultan costosos (88).

Es por ello que, resulta conveniente relacionar la composición con otra variable para su medida y control. Por lo general, el control de la composición se realiza mediante el control de temperatura, debido a que los dispositivos empleados para ello resultan económicos, confiables y rápidos (82). Se puede utilizar la temperatura como medida indirecta de la composición, debido a su estrecha relación por el equilibrio líquido-vapor.

13.7. Simbología empleada

Para realizar correctamente el diagrama de tuberías e instrumentación del presente proyecto, conocido como P&ID (*Piping & Instrumentation Diagram*), se debe utilizar una nomenclatura y simbología determinada, siguiendo el estándar ISA-5.1-1984 (R1992), para lo referente al control del proceso.

Todos los elementos de los lazos de control deberán estar identificados. Para ello, se hace uso de etiquetas como la mostrada en la Figura 55, que constan de tres letras y tres números. La primera letra hace referencia a la variable controlada, y las dos últimas letras están referidas a la función del elemento de control. De esta manera, dependiendo de la posición que ocupe cada letra tendrá un significado diferente. Esta nomenclatura y su significado se muestra en la Tabla 22, incluyendo únicamente las letras empleadas en el presente proyecto. Por otro lado, los tres números hacen referencia al identificador del lazo de control.



Figura 55. Etiquetas para identificar los lazos de control. Elaboración propia.

Tabla 22. Nomenclatura para designar los lazos de control, según el estándar ISA-5.1-1984 (R1992) (91).

Letra	Primera posición	Segunda o tercera posición
A	-	Alarma
C	-	Controlador
F	Flujo	-
H	-	Alto
I	-	Indicador
L	-	Bajo
P	Presión	-
S	-	Interruptor
T	Temperatura	Transmisor
V	-	Válvula
Y	-	Transductor, convertidor de señal

Además, la presencia o no de una línea horizontal en el centro de la etiqueta identificativa, determina la localización del elemento de control. Si la etiqueta no cuenta con la línea horizontal entonces el equipo se encuentra montado en planta, es decir, próximo al proceso. Por el contrario, si la etiqueta cuenta con una línea horizontal continua en el centro quiere decir que el equipo se encuentra en la sala de control, y por lo tanto accesible a los operadores. Pero, si la línea horizontal es discontinua, entonces el equipo se encuentra en un rack separado, no estando accesible a los operadores. En la Figura 56 se muestran ejemplos de las etiquetas que se utilizarán en los diagramas de instrumentación y control (P&ID #1 y #2) del Documento II: Planos, del presente proyecto.



Figura 56. Simbología empleada de acuerdo a la localización de los elementos de control. Elaboración propia.

Asimismo, se utiliza simbología diferente de acuerdo a la función que lleve a cabo cada elemento de control. Si la etiqueta consta de un círculo, hace referencia a un elemento discreto. El cuadrado con un círculo en su interior se refiere a instrumentos de medida y a equipos que desempeñan funciones de control. Ejemplos de ellas se pueden apreciar en la Figura 57. No obstante, hay otras simbologías, como lo son: el hexágono, que hace referencia a equipos que realizan funciones de cálculo, y el cuadrado con un rombo inscrito en su interior que representa a controladores lógicos programables.

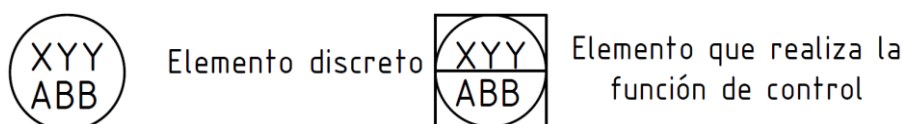


Figura 57. Simbología empleada de acuerdo a la función de los elementos de control. Elaboración propia.

Con respecto a las señales enviadas desde un elemento de control a otro, se utilizarán diferentes líneas de acuerdo al tipo de señal utilizada. Estas se muestran en la Figura 58.

————	Líneas de proceso
- - -	Señal eléctrica
####	Señal neumática

Figura 58. Simbología de acuerdo al tipo de señal empleada. Elaboración propia.

En lo que se refiere a los elementos finales de control, es posible emplear distintos tipos de válvulas de control, de acuerdo a su aplicación. En el presente proyecto se utilizarán válvulas de control con accionador de diafragma.

13.8. Descripción de lazos de control

A continuación, se procede a describir los lazos de control mostrados en los diagramas de instrumentación y control (P&ID #1 y #2) del Documento II: Planos, del presente proyecto.

13.8.1. Sección 100

- **Lazo de control FIC-101 y FIC-103**

Estos funcionan de la misma forma, y contienen los mismos elementos que el lazo FIC-102, pero se emplean para controlar el flujo de aire y helio de entrada al sistema, respectivamente. A continuación, se explicará con más detalle el lazo FIC-102, siendo estos iguales a él.

- **Lazo de control FIC-102**

Regula el caudal de entrada de la materia prima (propileno) al proceso. Garantizando, por tanto, que este sea siempre el caudal requerido para poder producir la cantidad de acroleína demandada. El lazo es *feedforward*, es decir, se controla la variable antes de que la perturbación afecte al sistema.

El inconveniente de los lazos de control *feedback*, es que con ellos ha de extenderse la perturbación en el sistema antes de ser corregida, generando pequeñas fluctuaciones en el proceso. Por otro lado, el *feedforward* es más proactivo siendo solo efectivo cuando se conocen todas las posibles perturbaciones, y los métodos matemáticos son capaces de ocasionar respuestas precisas. En este caso, dado que los lazos de flujo son muy rápidos, es aconsejable amortiguar las perturbaciones lo antes posible, siendo factible el uso de un control *feedforward*. En este control se emplea un transmisor de caudal FT-102, que se encarga de medir el flujo en la corriente y envía

la información al controlador indicador de flujo FIC-102. El controlador compara el valor recibido con el punto de consigna, y de ser necesario actúa sobre la válvula de control FCV-102, modificando su apertura. Asimismo, se emplea el transductor FY-102 para convertir el tipo de señal de eléctrica a neumática.

- **Lazos de control TIC-104 y TIC-105**

Estos lazos se encargan de garantizar que la temperatura de la corriente 9 sea la requerida para la reacción, 350 °C, mediante un control *feedback*. Controlando la temperatura de las corrientes 8 y 9.

Constan de un transmisor de temperatura (TT-104 y TT-105) que se encarga de medir la temperatura de la corriente que sale de su respectivo intercambiador de calor (E-101 y E-102) y envía el valor a su controlador indicador de temperatura (TIC-104 y TIC-105). Este compara el valor medido con el punto de consigna mandando una señal al transductor (TY-104 y TY-105), de forma que cambie el tipo de señal y se la transmita a la válvula (TCV-104 y TCV-105). Cabe destacar, que al modificar la apertura de las válvulas se estarían variando los caudales de los fluidos calefactores, permitiendo ajustar nuevamente la temperatura.

13.8.2. Sección 200

- **Lazo de control TIC-201**

En este lazo se emplea una configuración de cascada, siendo el principal objetivo controlar la temperatura del reactor R-201. La variable controlada es la temperatura de la corriente de producto que sale del reactor R-201 (corriente 10), cuyo valor es medido por el sensor transmisor de temperatura TT-201 A. Por medio de una señal eléctrica, el valor medido se lleva al controlador e indicador principal TIC-201 A. La salida de este es llevada al controlador esclavo, FIC-201 B.

Por otro lado, el controlador indicador secundario FIC-201 B recibe la señal de flujo de la corriente de entrada del fluido refrigerante empleado en el reactor, medida por el indicador de flujo FT-201 B. Este controlador compara el valor recibido con el punto de consigna (que es la señal recibida del controlador primario), y efectuando los cálculos necesarios, decide si es necesario actuar sobre la válvula de control de flujo FCV-201, mediante una señal neumática generada en el transductor FY-201. Cabe destacar que, según la apertura de la válvula, se aumenta o se disminuye el flujo del refrigerante, permitiendo cambiar la temperatura en el reactor para alcanzar el valor de consigna establecido.

Este sistema de control en cascada eliminará las perturbaciones del fluido refrigerante antes de que afecten a la variable principal a controlar, es decir, a la temperatura de salida del reactor, dado que el caudal del refrigerante es corregido antes de que entre al reactor, siendo esto lo que justifica el uso de este sistema de control, mejorando con este el rendimiento de control.

13.8.3. Sección 300

- **Lazo de control TIC-301**

El lazo TIC-301 se encarga de garantizar que la temperatura de la corriente 11 sea la requerida en la columna *quench* T-301. Se trata de un sistema de control *feedback*. El transmisor de temperatura TT-301 es el encargado de medir la temperatura de la corriente 11 que sale del intercambiador de calor E-301, y envía su valor al controlador indicador de temperatura TIC-301. Este lo compara con el valor del punto de consigna, y de acuerdo al error, envía una señal eléctrica convertida en neumática en el transductor TY-301, actuando sobre la válvula de control TCV-301. Esta válvula manipula el caudal de agua de refrigeración del intercambiador E-301.

- **Lazo de control TIC-302**

El lazo TIC-302 tiene como objetivo controlar la composición de la corriente 14, y de esta manera poder añadir el caudal correcto de agua para eliminar la cantidad de ácidos deseada. Este lazo es de temperatura debido a la estrecha relación entre la temperatura y la composición, y la facilidad

y bajo coste que representa un lazo de control de temperatura frente a un analizador de composición.

Corresponde a un lazo de control *feedback*. El transmisor de temperatura TT-302 es el encargado de medir la temperatura de la columna *quench* T-301, y envía su valor al controlador indicador de temperatura TIC-302, y este lo compara con el valor del punto de consigna. Dependiendo del error se envía una señal eléctrica, convertida en neumática en el transductor TY-302, para proceder a accionar la válvula de control TCV-302, manipulando la corriente 12, es decir, el caudal de agua de entrada a la columna *quench*.

- **Lazo de control TIC-303**

El lazo TIC-303 se encarga de garantizar que la temperatura de la corriente 15 sea la adecuada para su entrada a la columna de absorción T-302. Se trata de un sistema de control *feedback*. El transmisor de temperatura TT-303 es el encargado de medir la temperatura de la corriente 15 que sale del intercambiador de calor E-302, y envía su valor al controlador indicador de temperatura TIC-303, y este lo compara con el valor del punto de consigna. De acuerdo al error, envía una señal eléctrica convertida en neumática en el transductor TY-303, actuando sobre la válvula de control TCV-303, y manipulando el caudal de agua de refrigeración del intercambiador E-303.

- **Lazo de control TIC-304**

Tal como el lazo TIC-302, el lazo TIC-304 tiene como objetivo controlar la composición de la corriente 18, y así añadir el caudal necesario de agua para la absorción de la acroleína.

El transmisor de temperatura TT-304 es el encargado de medir la temperatura en la columna de absorción T-302, y envía su valor al controlador indicador de temperatura TIC-304. Este lo compara con el valor del punto de consigna y envía una señal eléctrica, la cual es convertida en neumática en el transductor TY-304, para manipular la válvula de control TCV-304. De esta manera, se manipula la corriente 16, la cual es la corriente de entrada de agua a la columna.

- **Lazo de control PIC-305**

El lazo PIC-305 tiene como objetivo controlar la presión del proceso aguas arriba, liberando los gases contenidos en la corriente de proceso, en caso de ser necesario. En este lazo, el transmisor PT-305 es el encargado de medir la presión en la columna T-302 y envía el valor al controlador indicador de presión PIC-305, y este lo compara con el valor del punto de consigna. De acuerdo al error obtenido, se envía una señal eléctrica que es convertida a neumática en el transductor PY-305, para accionar la válvula de control PCV-305 y de esta manera manipular la corriente 17, la cual es la corriente de salida gaseosa de la columna.

- **Lazo de control TIC-306**

El objetivo del lazo de control TIC-306 es mantener controlada la temperatura de la columna de desorción T-303, de modo que se controle a su vez la composición de la corriente de salida 22. De esta manera, resulta posible conocer el caudal de vapor de agua necesario para desorber la acroleína, manteniendo la composición deseada de la corriente gaseosa de salida por cabezas, corriente 22.

Se trata de un sistema de control *feedback*, donde el transmisor de temperatura TT-306 se encarga de medir la temperatura en la columna, y envía su valor al controlador indicador de temperatura TIC-306, el cual lo compara con el valor del punto de consigna, y de acuerdo al error, se envía una señal eléctrica, convertida en neumática en el transductor TY-306, para accionar la válvula de control TCV-306, manipulando el caudal de vapor de agua de entrada a la columna, corriente 20.

- **Lazo de control LIC-307**

El lazo de control LIC-307 se encarga de controlar el nivel de líquido en la columna de desorción T-303, para que, al existir perturbaciones externas, la columna no se inunde.

Se trata de un sistema de control *feedback*. El transmisor de nivel LT-307 mide el nivel de líquido en la columna de desorción T-303, su valor es enviado al controlador indicador de nivel LIC-307, el cual lo compara con el valor establecido como punto de consigna. Este envía una señal eléctrica, la cual es convertida a neumática en el transductor LY-307, de modo que, según el error, se indique la apertura de la válvula de control LCV-307, manipulando así el caudal de la corriente 21.

- **Lazo de control TIC-308**

El lazo de control TIC-308 tiene por objetivo garantizar que se retire la energía necesaria para condensar la corriente 22, cambiando además su temperatura a la requerida en la entrada de la columna de destilación T-304. De esta manera, se controla la temperatura de la corriente 23.

Se trata de un sistema de control *feedback*. El transmisor de temperatura TT-308 está encargado de medir la temperatura en la corriente 23, y enviar su valor al controlador indicador de temperatura TIC-308. Este lo compara con el valor del punto de consigna, y de acuerdo al error, envía una señal eléctrica convertida en neumática en el transductor TY-308, actuando sobre la válvula de control TCV-308 y manipulando el caudal de agua de refrigeración del intercambiador E-303.

- **Lazo de control PIC-309**

Mediante el lazo de control PIC-309 se busca mantener controlada la presión en cabezas de la columna de destilación T-304 en su valor de consigna, para evitar que se desencadenen situaciones desfavorables por cambios en la presión de la columna.

Se trata de un sistema de control *feedback*, en el cual el transmisor de presión PT-309 mide la presión en cabezas de la columna, y envía su valor al controlador indicador de presión PIC-309, el cual lo compara con el valor del punto de consigna e indica, mediante una señal eléctrica convertida en neumática en el transductor PY-309, la apertura de la válvula de control PCV-309. Esta manipula el caudal de agua de refrigeración del condensador total E-304, hasta alcanzar el valor requerido.

- **Lazo de control LIC-310**

Este lazo de control se emplea para controlar el nivel de condensado en el tambor de reflujo V-301, de manera que se evite su inundación al existir perturbaciones que afecten el nivel.

Corresponde a un sistema de control *feedback*, donde el transmisor de nivel LT-310 mide el nivel de líquido en el tambor de reflujo V-301, su valor es enviado al controlador indicador de nivel LIC-310, el cual lo compara con el valor establecido como punto de consigna, y de acuerdo al error existente envía una señal eléctrica convertida en neumática en el transductor LY-310, indicando la apertura de la válvula de control LCV-310, manipulando el caudal de la corriente 25, de destilado.

- **Lazo de control TIC-311**

El objetivo del lazo de control TIC-311 es mantener controlada la temperatura de la columna de destilación T-304. Es decir, midiendo la temperatura se obtiene una medida indirecta de la composición, debido a la estrecha relación de estas variables por el equilibrio líquido-vapor. Debido a que el producto deseado del proceso se obtiene por el destilado, la temperatura se debe controlar en cabezas de la columna, en la sección de enriquecimiento.

Comprende un sistema de control *feedback*, en el cual el transmisor de temperatura TT-311 se encarga de medir la temperatura en cabezas de la columna de destilación T-304, y envía su valor al controlador indicador de temperatura TIC-311, el cual lo compara con el punto de consigna y envía una señal eléctrica que será convertida en neumática en el transductor TY-311, para accionar la válvula de control TCV-311, manipulando el caudal de la corriente de reflujo.

- **Lazo de control FIC-312**

El lazo de control FIC-312 garantiza que se mantenga constante el caudal de vapor que retorna a la columna de destilación (*boil-up*), para que la separación alcanzada en la destilación sea la deseada.

Se trata de un sistema de control *feedback*. El transmisor de caudal FT-312 mide el caudal de vapor de la corriente de *boil-up*, su valor es enviado al controlador indicador de nivel FIC-312, el cual lo compara con el valor establecido como punto de consigna, y según el error existente se indica, mediante una señal eléctrica convertida en neumática en el transductor FY-312, la apertura de la válvula de control FCV-312, manipulando así el caudal de vapor de baja presión, utilizado como utilidad en la caldera parcial E-305.

- **Lazo de control LIC-313**

El lazo de control LIC-313 se encarga de controlar el nivel de líquido en la columna de destilación T-304, para que, aun en presencia de perturbaciones externas, la columna no se inunde.

Se trata de un sistema de control *feedback*, donde el transmisor de nivel LT-313 mide el nivel de líquido en la columna de destilación T-304. Su valor es enviado al controlador indicador de nivel LIC-313, el cual lo compara con el punto de consigna y envía una señal eléctrica que será convertida en neumática en el transductor LY-313, accionando la válvula de control LCV-313 y manipulando así el caudal de la corriente 26, que corresponde a la corriente de salida por colas de la columna.

Cabe resaltar que los lazos de control PIC-309, LIC-310, TIC-311, FIC-312 y LIC-313 corresponden a los lazos de control presentes en la columna de destilación T-304. Se han analizado y establecido, siguiendo lo expuesto por Towler & Sinnott, (63), en donde se explican los lazos típicos en columnas de destilación. También, se expone que lo más habitual es establecer un control de la temperatura como control indirecto de la composición, en cabezas o en colas de la columna, dependiendo si el producto de interés se obtiene por el destilado o por la corriente de colas. En el caso de la columna de destilación T-304, el producto deseado se obtiene por el destilado, por lo que el control de la temperatura se ha establecido en cabezas de la columna. Asimismo, hay opción de manipular el caudal de reflujo o de destilado, no obstante, se ha seleccionado el caudal de reflujo como variable manipulada por ser la opción favorable cuando se opera con bajos caudales de reflujo (92).

13.9. Capas de seguridad

La seguridad en una planta industrial se puede expresar en diferentes capas, como se observa en la Figura 59. Cada una de las capas se activarán si el respectivo nivel inferior ha fallado.

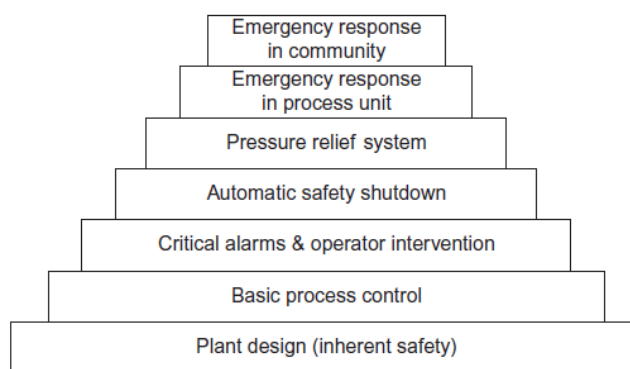


Figura 59. Capas de seguridad en una planta química (63).

Como se puede observar, el primer nivel es el diseño seguro de la planta, puesto que, si el proceso es inherentemente seguro, no existirá ningún peligro, o si lo hay, será insignificante. Los estándares de diseño establecen márgenes de seguridad para evitar fallas en la operación de los

procesos. No obstante, si las condiciones dadas en el proceso superan los valores de diseño, dan lugar a situaciones peligrosas, ante las cuales se deberá actuar (63).

El sistema básico de control de procesos corresponde a la segunda capa de seguridad. En este nivel se engloba a todos los lazos de control de temperatura, presión, composición, caudales y niveles, que tienen por objetivo contrarrestar las perturbaciones y llevar el proceso a su estado estacionario.

En caso de que una variable de proceso salga de su rango de operación segura, se activaría la tercera capa de seguridad. Esto provocaría que se activen alarmas automáticas en los paneles de control, para alertar a los operadores y que estos actúen de acuerdo a la situación dada. Las alarmas deben estar configuradas de forma tal que no se activen por variabilidad normal del proceso, y para dar tiempo suficiente a que se intervenga antes de la activación de la siguiente capa de seguridad (63).

Si los operadores no logran controlar el proceso, se efectúa una parada automática del proceso, lo que corresponde a la activación del cuarto nivel de seguridad. Generalmente, esto implica cortar la alimentación del proceso y los suministros de energía, despresurizar el sistema, entre otras acciones. Estos sistemas de parada deben ser diseñado de modo que no se empeore la situación (63).

Si la parada automática de seguridad no ocurre rápidamente, se pueden provocar situaciones de sobrepresión. Ante esto, se activaría el quinto nivel de seguridad, es decir el sistema de alivio de presión. Los líquidos se tratarán y los gases serán conducidos a antorchas antes de su descarga a la atmosfera. Este nivel de seguridad prevendrá fugas y explosiones (63).

No obstante, si ocurren pérdidas de contención, fugas de líquido o de vapor, los trabajadores de la planta deben proporcionar respuestas de emergencia. Esto correspondería a la activación del sexto nivel de seguridad. Las fugas de líquido por lo general se detectan fácilmente, pero las de vapor no, y podrían provocar incendios localizados. En cualquier caso, se debería localizar el origen de los incidentes que se presenten (63).

Si la situación evoluciona en gravedad, se necesitarán más recursos a los disponibles en la planta. Por lo que, la última capa de seguridad se activaría. Los agentes de la comunidad que proporcionan respuestas ante emergencias asistirán a las personas que resulten afectadas, y actuarán ante los peligros existentes (63).

13.9.1. Indicadores

En la Tabla 23 se resumen los indicadores presentes en los equipos de la planta, por secciones.

Tabla 23. Indicadores en la planta de producción del presente proyecto.

Sección 100	
PI-106	Indicador de presión en la corriente 3
PI-107	Indicador de presión en el filtro FT-101
Sección 300	
LI-314	Indicador de nivel en la columna <i>quench</i> T-301
LI-315	Indicador de nivel en la columna de absorción T-302
PI-316	Indicador de presión en la corriente 24

13.9.2. Alarmas

Como se comentó anteriormente, es necesario contar con un sistema de alarmas, las cuales están encargadas de alertar y llamar la atención de los operarios sobre fallas o algún mal funcionamiento antes de que puedan conducir a situaciones peligrosas en el proceso (90).

A continuación, en la Tabla 24 se comentarán las alarmas que se han decidido implementar.

Tabla 24. Alarmas en la planta de producción del presente proyecto.

Sección 100	
TAH-108	Alarma de alta temperatura en el intercambiador de calor E-101
TAH-109	Alarma de alta temperatura en el intercambiador de calor E-102
Sección 200	
TAH-201	Alarma de alta temperatura en el reactor R-201
TAL-201	Alarma de baja temperatura en el reactor R-201
PDAH-202	Alarma de presión diferencial en el reactor R-201
Sección 300	
PAH-305	Alarma de alta presión en la columna de absorción T-302
PAL-305	Alarma de baja presión en la columna de absorción T-302
LAH-315	Alarma de alto nivel en la columna de absorción T-302
LAL-315	Alarma de bajo nivel en la columna de absorción T-302
LAH-307	Alarma de alto nivel en la columna de desorción T-303
LAL-307	Alarma de bajo nivel en la columna de desorción T-303
PAH-309	Alarma de alta presión en la columna de destilación T-304
PAL-309	Alarma de baja presión en la columna de destilación T-304
LAH-310	Alarma de alto nivel en el tambor de reflujo V-301
LAL-310	Alarma de bajo nivel en el tambor de reflujo V-301
LAH-313	Alarma de alto nivel en la columna de destilación T-304
LAL-313	Alarma de bajo nivel en la columna de destilación T-304

13.9.3. Dispositivos de alivio

Resultan esenciales para el funcionamiento seguro de recipientes a presión. Estos dispositivos proporcionan un medio mecánico para asegurar que la presión dentro del recipiente no aumente de forma tal que lleve el proceso a niveles inseguros. Es por ello que, todos los recipientes a presión diseñados siguiendo el Código ASME, Sección VIII, Div. 1 deben contar con ellos (63).

Siguiendo esta línea, el objetivo de los dispositivos de alivio es evitar situaciones peligrosas, facilitando un medio seguro para aliviar la sobrepresión en aquellos casos cuando la presión dentro del recipiente supere la presión de operación máxima permitida. Los dispositivos de alivio más utilizados son (63):

- Válvulas de accionamiento directo: son válvulas que constan de un resorte, se abren a una presión previamente establecida, y una vez que se ha aliviado la presión, se cierran.
- Válvulas de accionamiento indirecto: corresponden a válvulas de accionamiento neumático o eléctrico que son activadas a partir de sensores de presión.
- Discos de ruptura: son discos delgados fabricados en distintos materiales, que han sido diseñados para fallar al alcanzarse una presión predeterminada.

Generalmente, las válvulas de alivio se utilizan para aliviar sobrepresiones menores, mientras que los discos de ruptura se utilizan cuando se necesita aliviar una sobrepresión considerable. Estos dispositivos de alivio deben estar ubicados en el recipiente a presión que protegen o cerca de él, y deben estar instalados de manera tal que sea fácil su mantenimiento e inspección (63).

En la Tabla 25 mostrada a continuación, se resumen las válvulas de alivio implementadas en la planta. Cabe destacar que, las válvulas PSV-203, PSV-320 y PSV-323 serán dimensionadas con sus respectivos equipos en el *Anexo II: Cálculos justificativos*.

Tabla 25. Válvulas de alivio en la planta de producción del presente proyecto.

Sección 100	
PSV-110	Válvula de alivio en el compresor K-101
PSV-111	Válvula de alivio en el intercambiador de calor E-101
PSV-112	Válvula de alivio en el intercambiador de calor E-102
Sección 200	
PSV-203	Válvula de alivio en el reactor R-201
Sección 300	
PSV-317	Válvula de alivio en el intercambiador de calor E-301
PSV-318	Válvula de alivio en la columna <i>quench</i> T-301
PSV-319	Válvula de alivio en el intercambiador de calor E-302
PSV-320	Válvula de alivio en la columna de absorción T-302
PSV-321	Válvula de alivio en la columna de desorción T-303
PSV-322	Válvula de alivio en el intercambiador de calor E-303
PSV-323	Válvula de alivio en la columna de destilación T-304
PSV-324	Válvula de alivio en el condensador total E-304
PSV-325	Válvula de alivio en la caldera parcial E-305

14. Seguridad

14.1. Introducción

En el siguiente apartado se tratarán elementos que garanticen que la operación de producción se pueda desarrollar de manera segura. En la industria química pueden darse diversos peligros debido a los productos utilizados en el proceso de manufactura, y las condiciones de temperatura y presión a los que estos son sometidos. Es por esto que, se deben implementar medidas estrictas con el objetivo de reducir o eliminar el peligro del proceso y de las instalaciones.

En primera instancia se elaborará un inventario de las sustancias presentes en el proceso, haciendo uso de las fichas de seguridad. Igualmente, se clasificará la planta según la directiva Seveso III, se realizará un estudio de reactividad descontrolada utilizando el software *Chemical Reactivity Worksheet (CRW) 4.0*, se establecerán las distancias mínimas de seguridad entre los equipos de la planta, y por último, se realizará un análisis de riesgos potenciales del proceso mediante el cálculo del índice de incendio y explosión DOW.

14.2. Inventario de sustancias

Para la realización del inventario de sustancias se utilizan la ficha de seguridad de los compuestos presentes en la planta. Estas fichas deben ser proporcionadas por el distribuidor de las sustancias, y deben ser accesibles a cualquier trabajador de la planta que las manipule, así como a los encargados de la seguridad en la planta. Constan de 16 secciones donde se detalla información como: peligros, propiedades físicas y químicas, manipulación y almacenamiento, primeros auxilios, etc.

En la Tabla 26 se muestran las sustancias que intervienen en el proceso, destacando las propiedades con mayor relevancia para la seguridad de la planta. Estas propiedades pueden definirse como (63):

- Punto de flash: es una medida de la facilidad que presenta un líquido para arder, es decir, es la menor temperatura a la cual un material o sustancia se encenderá. Este punto es una función de la presión de vapor y los límites de inflamabilidad propios de la sustancia.
- Temperatura de autoignición: esta es la temperatura a la que una sustancia se encenderá espontáneamente en el aire sin necesidad de alguna fuente de ignición externa. Sirve

como indicador de la temperatura máxima a la que un material puede ser calentado en el aire.

- Límites de inflamabilidad: estos son las concentraciones más bajas y altas en el aire a presión y temperatura normal, en las cuales extenderá una llama a través de la mezcla, es decir, indica el rango de concentración en el cual el material arderá en aire si se enciende. Estos límites tienen una gran variabilidad dependiendo del material.

Tabla 26. Propiedades físicas y químicas. Fuente: fichas de seguridad.

Sustancia	Punto flash (°C)	T de autoignición (°C)	Límite inferior (%)	Límite superior (%)
Acroleína	-26,00	235,00	2,80	31,00
Ácido acrílico	48,00	374,00	2,00	15,90
Ácido acético	40,00	427,00	4,00	19,90
Monóxido de carbono	-	620,00	10,90	74,00
Propileno	-107,78	455,00	2,00	11,00
Acetaldehído	-27,00	155,00	4,00	60,00
Helio	No aplica	-	-	-
Agua	No aplica	-	-	-
Dióxido de carbono	No aplica	-	-	-

14.3. Clasificación según el reglamento CLP

Las sustancias utilizadas y formadas en el proceso se les asigna indicadores de peligro, según el Reglamento (CE) n° 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008. Estos indicadores son frases, empleadas para asignar la clase o categoría del peligro, asimismo “describe la naturaleza de los peligros de una sustancia o mezcla peligrosas, incluyendo cuando proceda el grado de peligro” (93). Son también llamadas frases H, debido a la palabra inglesa *Hazard*. En la Tabla 27 se muestran las frases H para las sustancias del proceso, y en la Tabla 28 se muestran para cada sustancia: clases de peligros asociados, categoría del peligro, frase H y pictograma.

Tabla 27. Indicadores de peligro (94).

Frase	Indicador de peligro
H220	Gas extremadamente inflamable.
H224	Líquido y vapores extremadamente inflamables
H225	Líquido y vapores muy inflamables
H226	Líquido y vapores inflamables
H280	Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento
H300	Mortal en caso de ingestión
H302	Nocivo en caso de ingestión
H311	Tóxico en contacto con la piel
H312	Nocivo en contacto con la piel
H314	Provoca quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves
H318	Provoca lesiones oculares graves
H319	Provoca irritación ocular grave
H330	Mortal en caso de inhalación
H331	Tóxico en caso de inhalación
H332	Nocivo en caso de inhalación

Tabla 27 (continuación). Indicadores de peligro (94).

Frase	Indicador de peligro
H335	Puede irritar las vías respiratorias
H340	Puede provocar defectos genéticos.
H341	Se sospecha que provoca defectos genéticos
H350	Puede provocar cáncer
H360D	Puede dañar al feto.
H372	Provoca daños en los órganos tras exposiciones prolongadas o repetidas.
H400	Muy tóxico para los organismos acuáticos
H410	Muy tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos

Tabla 28. Identificación de los peligros de las sustancias. Fuente: fichas de seguridad.

Sustancia	Clase de peligro	Categoría de peligro	Frase H	Pictograma
Dióxido de carbono	Gases a presión	A	H280	
Monóxido de carbono	Gases inflamables	1	H220	
	Gases a presión	A	H280	
	Toxicidad aguda, por inhalación	3	H331	
	Toxicidad para la reproducción - Feto	1A	H360	
Ácido acético	Toxicidad específica en determinados órganos	1	H372	
	Líquidos inflamables	3	H226	
	Corrosión o irritación cutáneas	1A	H314	
	Lesiones o irritación ocular graves	1	H318	
Ácido acrílico	Toxicidad aguda oral	4	H302	
	Toxicidad aguda cutánea	4	H312	
	Toxicidad aguda por inhalación - Vapores	4	H332	
	Corrosión o irritación cutáneas	1	H314	
	Lesiones o irritación ocular graves	1	H318	
	Toxicidad específica del órgano blanco - (única exposición)	3	H335	
	Toxicidad acuática aguda	1	H400	
	Toxicidad aguda oral	2	H300	
Acroleína	Toxicidad aguda cutánea	3	H311	
	Toxicidad aguda por inhalación - Vapores	1	H330	
	Corrosión o irritación cutáneas	1B	H314	
	Lesiones o irritación ocular graves	1	H318	

Tabla 28 (continuación). Identificación de los peligros de las sustancias. Fuente: fichas de seguridad.

Sustancia	Clase de peligro	Categoría de peligro	Frase H	Pictograma
Acroleína	Toxicidad acuática aguda	1	H400	
	Toxicidad acuática crónica	1	H410	
Acetaldehído	Líquidos inflamables	1	H224	
	Toxicidad aguda oral	4	H302	
	Lesiones o irritación ocular graves	2	H319	
	Mutagenicidad en células germinales	2	H341	
	Carcinogenicidad	1B	H350	
	Toxicidad específica del órgano blanco - (única exposición)	3	H335	
Helio	Gases a presión	A	H280	
Propileno	Gases inflamables	1	H220	
	Gases a presión	A	H280	

Por lo observado en la Tabla 28, las sustancias que presentan un mayor peligro son: la acroleína y el ácido acrílico, siendo la acroleína la que se encuentra en mayor cantidad en el proceso, por lo cual es la sustancia de mayor cuidado en el proceso productivo.

14.4. Clasificación de la instalación según la directiva Seveso

Para la clasificación de la instalación según la directiva Seveso se hace uso del Real Decreto 840/2015. Dicho Real Decreto tiene por objetivo “la prevención de accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas, así como la limitación de sus consecuencias sobre la salud humana, los bienes y el medio ambiente.” Lo que es expresado en el artículo 1 (95).

Del Real Decreto 840/2015 se utiliza el Anexo I, donde se muestran los umbrales inferiores y superiores para las sustancias peligrosas clasificadas siguiendo las diferentes clases y categorías de peligro. El anexo consta de dos partes, en la parte 1 se muestran los umbrales utilizados para las sustancias peligrosas no nominadas, donde los umbrales varían dependiendo del de la categoría del peligro, y en la parte dos donde se encuentran las sustancias nominadas por el Real Decreto, donde se indican los umbrales fijos para las sustancias allí presentes. A partir de este anexo se clasifica la instalación tomando en consideración si las cantidades utilizadas se encuentran por debajo del umbral inferior, entre ambos umbrales o superando el umbral superior. El artículo 3 presenta diversas definiciones para el entendimiento de la clasificación, como (95):

- Sustancia peligrosa: “toda sustancia o mezcla incluida en la parte 1 o enumerada en la parte 2 del anexo I, incluyendo aquellas en forma de materia prima, producto, subproducto, residuo o producto intermedio.”
- Establecimiento: “la totalidad del emplazamiento bajo el control de un industrial en el que se encuentren sustancias peligrosas en una o varias instalaciones, incluidas las infraestructuras o actividades comunes o conexas; los establecimientos serán de nivel inferior o de nivel superior.”

- 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.”
- 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.”

Para el presente proyecto se tendrán en cuenta únicamente sustancias que se encuentren clasificadas en alguna de las partes del anexo I por lo que quedan excluidos: el agua, el helio, el nitrógeno, el dióxido de carbono, el monóxido de carbono, el acetaldehído, el ácido acrílico y el ácido acético. Según indica la nota 3 del anexo I “Las cantidades que hay que tener en cuenta para la aplicación de los artículos pertinentes son las máximas que estén presentes, o puedan estarlo, en un momento dado.” (95). Es por esto por lo que se considera un periodo de 72 horas de almacenaje como la cantidad máxima presente en el proceso de cada sustancia.

En la Tabla 29 se presenta la cantidad de las sustancias a las que se les aplica el Real Decreto 840/2015, la cantidad de cada sustancia, la categoría de peligro de conformidad con el Reglamento (CE) nº 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008, si la sustancia se encuentra o no nominada y los umbrales que se les aplica a cada sustancia.

Tabla 29. Clasificación de la instalación según la Directiva Seveso III.

Sustancia	Inventario (t)	Clasificación	Nominada (S/N)	H	P	E	O	Umbral inferior (t)	Umbral superior (t)
Propileno	123,55	P2	No		X			10	50
Acroleína	119,01	H1 E1	No	X				5 100	20 500

Como se observa en la Tabla 29, ambas cantidades almacenadas superan el umbral superior de sus respectivas clasificaciones, es por esto que se determina que la planta de producción de 2-propenal clasifica como un establecimiento de nivel superior.

14.5. Clasificación NFPA de las sustancias

Un método utilizado para caracterizar propiedades químicas riesgosas es el diamante de la Asociación Nacional de Protección contra el fuego (NFPA). Dicha asociación fue establecida en los Estados Unidos en 1896 cuyo objetivo fue reducir muertes y lesiones debido a incendios y otros tipos de peligros a nivel mundial (96).

Esta asociación tiene una serie de normas donde destaca la NFPA 704 donde se explica el diamante de materiales peligrosos utilizado. En este sistema se tendrán tres categorías principales: salud, flamabilidad e inestabilidad. Se indicará la severidad en un rango de 0 a 4, donde 4 será un peligro severo y 0 indicará un riesgo mínimo. La información se representa en forma de rombo y a cada categoría se le asigna un color, estas asignaciones se muestran en Figura 60 (97).

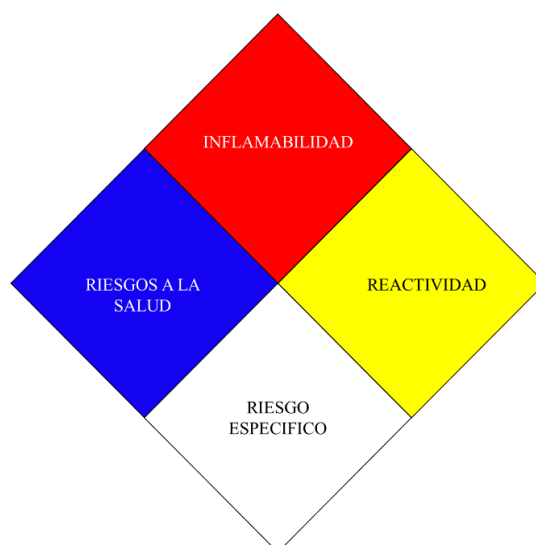


Figura 60. Diamante NFPA 704. Elaboración propia.

En la Tabla 30 se muestra el significado de los valores según la categoría.

Tabla 30. Explicación del rango de valores (97).

Rango	Riesgo para la salud	Inflamabilidad	Reactividad
0	Sin riesgo	No enciende en condiciones normales	Estable
1	Poco peligroso	Requieren precalentamiento para el encendido	Inestable en caso de calentamiento
2	Peligroso	Se enciende cuando se calienta moderadamente	Inestable en caso de cambio químico violento
3	Muy peligroso	Se enciende fácilmente en condiciones ambientales	Puede explotar en caso de choque o calentamiento
4	Mortal	Se vaporiza rápida o completamente y se quema fácilmente	Puede explotar súbitamente

En el caso del riesgo específico el rango de la categoría se presenta en la Tabla 31.

Tabla 31. Simbología del riesgo específico (97).

Rango	Peligros específicos
OX	Oxidantes
W	Reaccionan con agua
SA	Asfixiantes simples

Por último, en la Tabla 32 se presenta la clasificación NFPA para el inventario de las sustancias del presente proyecto.

Tabla 32. Clasificación NFPA (97).

Sustancia	Peligro para la salud	Inflamabilidad	Reactividad	Peligro específico
Dióxido de carbono	3	4	0	-
Monóxido de carbono	-	-	-	-
Ácido acético	3	2	0	-
Ácido acrílico	3	2	2	-
Acroleína	4	3	3	-
Acetaldehído	2	4	2	-

A continuación, se explicarán los peligros de las posibles interacciones entre las sustancias que pueden darse según la Figura 61.

Ácido acético con acetaldehído: esta mezcla puede reaccionar exotérmicamente a temperatura ambiente, pudiendo formar productos gaseosos que podrían aumentar la presión. A su vez, podrían darse reacciones poliméricas que también aumentarían la presión del sistema.

Interacciones con acroleína: en el caso del acetaldehído, esta mezcla puede generar una reacción exotérmica a temperatura ambiente con productos gaseosos posiblemente inflamables y tóxicos que podrían aumentar la presión del sistema. Con mezcla de acroleína y ácido acético puede ocurrir un efecto parecido a la mezcla de ácido acético con acetaldehído, pudiéndose dar una reacción exotérmica con productos gaseosos que aumentarían la presión del sistema.

Interacciones con ácido acrílico: en el caso de la interacción con acroleína y acetaldehído, se puede producir una reacción exotérmica a temperatura ambiente con una posible polimerización dando productos gaseosos que aumentarían la presión del sistema. En el caso de interacciones con el ácido acético, pueden producirse reacciones poliméricas.

Interacciones con monóxido de carbono: se puede dar una reacción exotérmica a temperatura ambiente la cual puede resultar violenta y explosiva, dando lugar a productos gaseosos que pueden ser inestables a temperaturas superiores a la temperatura ambiente. Estas pueden darse con acetaldehído, acroleína y ácido acrílico.

Interacciones con el oxígeno: pueden dar a lugar una reacción exotérmica a temperatura ambiente que puede resultar explosiva, generando productos gaseosos que pueden ser inflamables y tóxicos. Estos productos pueden resultar sensibles a la fricción pudiendo ser volátiles. Estas se pueden dar con acetaldehído, ácido acético, acroleína, ácido acrílico, propileno, agua y monóxido de carbono.

Interacciones con el propileno: pueden generar una reacción exotérmica a temperatura ambiente con productos gaseosos posiblemente inflamables y tóxicos que podrían aumentar la presión del sistema. Estas se pueden dar con acetaldehído y acroleína.

Interacciones con agua: pueden generarse reacciones poliméricas, las cuales aumentarían la presión del sistema. Estas se pueden dar con acetaldehído, acroleína y ácido acrílico.

Sustancias autorreactivas: en este caso se encuentran el acetaldehído, acroleína y el ácido acrílico, siendo estas las sustancias del proceso que podrían polimerizar.

14.7. Distancias de seguridad

Para las distancias de seguridad entre equipos se sigue las distancias recomendadas en los lineamientos del *Global Asset Protection Services* (GAPS). Estas distancias tienen la finalidad de asegurar la integridad de los equipos en caso de incendio o explosión de alguno de ellos, proporcionando suficiente espacio para que no se vea afectada la integridad del resto. En la Figura 62 se muestran las distancias recomendadas entre equipos presentes en la planta de producción (98).

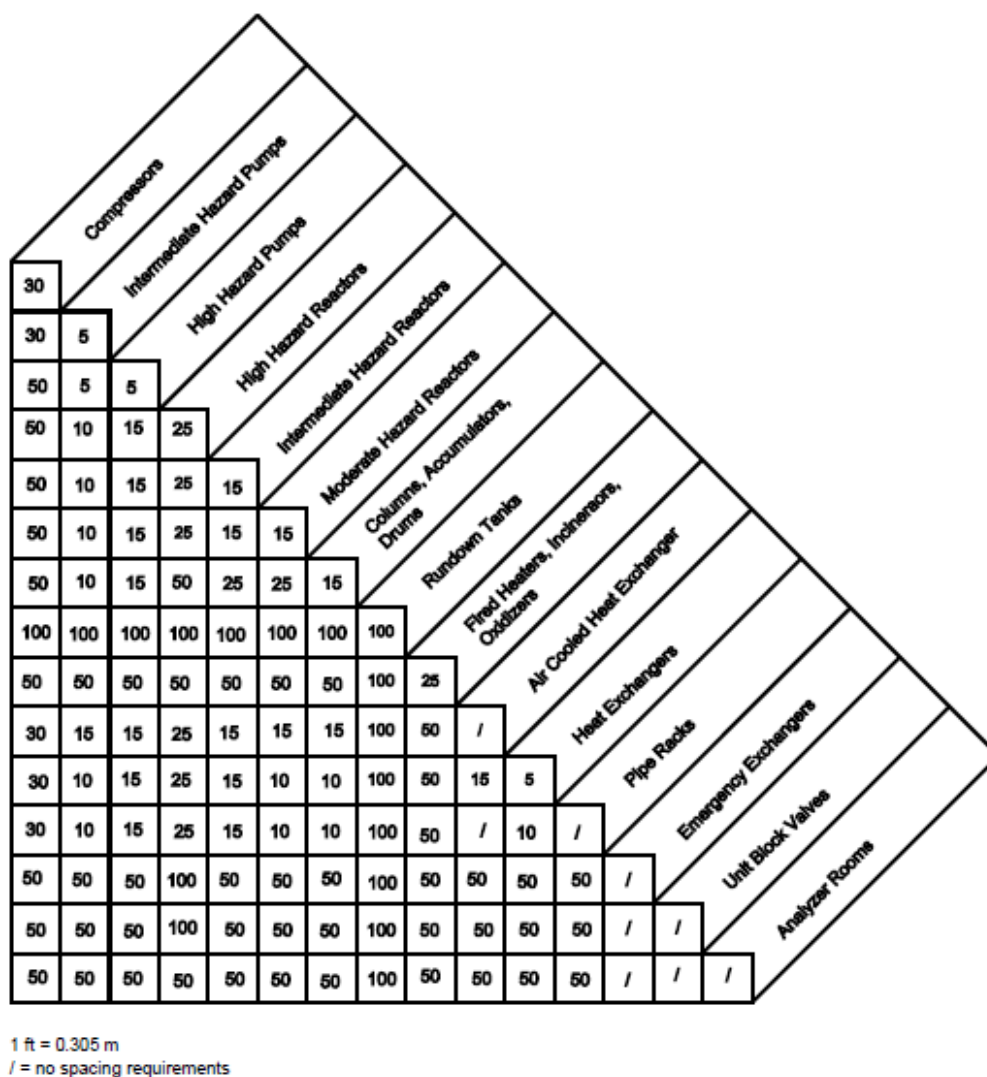


Figura 62. Distancias recomendadas entre equipos (98).

A partir de la Figura 62 se elaboró la Tabla 33 donde se incluyen las distancias de los equipos.

Tabla 33. Distancia de seguridad en metros entre los equipos de la planta de producción de 2-propenal. Fuente: Elaboración propia.

Distancias (m)	Compresores	Intercambiadores de calor	Reactor	Columnas	Tambor de reflujo	Bombas
Compresores	9,15					
Intercambiador de calor	9,15	1,53				
Reactor	15,25	7,63	7,63			
Columnas	15,25	3,05	15,25	4,58		
Tambor de reflujo	15,25	3,05	15,25	4,58	4,58	
Bombas	9,15	3,05	3,05	3,05	3,05	1,53

Con la guía GAPS también es posible determinar las distancias de las diferentes zonas de producción de la planta. Estas distancias son consideradas para llevar a cabo el plano de distribución en la planta (*layout*). Sumado a esto, en la guía GAPS se mencionan los diferentes aspectos a tomar en consideración para distribuir equipos y zonas en la planta para tener un reparto efectivo en la planta y extremar las medidas de seguridad y disminuir el riesgo en la planta.

14.8. Índice DOW de incendios y explosiones

El índice DOW de incendio y explosiones, también conocido como índice IIE, es una guía desarrollada por la *DOW Chemical Company* y publicada por la AICHE. Es un método desarrollado para evaluar el riesgo potencial de un proceso, se trata de un valor numérico el cual es calculado basándose en la naturaleza del proceso y las propiedades de los materiales y sustancias involucradas en el mismo. Mientras mayor sea el valor obtenido, mayor peligro presentará el proceso (63). En la Tabla 34 se presentan los rangos del índice y el grado de peligro que representan.

Tabla 34. Grado de peligro según el índice de incendios y explosiones DOW (63).

Rango de IIE	Grado de peligro
1-60	Ligero
61-96	Moderado
97-127	Intermedio
128-158	Intenso
>159	Severo

Se realizará este análisis para el reactor R-201, siendo este el equipo que puede suponer un mayor impacto en caso de fallos. Además de determinar el IIE, se procede a determinar el área de exposición y el factor de daño asociado. El procedimiento por realizar se muestra a continuación (63):

- 1) Seleccionar la unidad de proceso a analizar y elegir el material básico que será la base de los cálculos.
- 2) Determinar el factor del material (FM) para el material básico seleccionado.
- 3) Calcular el factor de riesgo general del proceso (F_1) aplicando las penalizaciones correspondientes.
- 4) Calcular el factor de riesgo especial del proceso (F_2) aplicando las penalizaciones correspondientes.
- 5) Calcular el factor de riesgo de la unidad (F_3) siendo este el producto de los factores anteriormente determinados.
- 6) Calcular el índice DOW de incendios y explosiones multiplicando el factor de riesgo de la unidad (F_3) por el factor del material (FM).
- 7) Determinar el radio de exposición.
- 8) Calcular el área de exposición.
- 9) Determinar el factor de daño.

14.8.1. Factor de material (FM)

Este factor es imprescindible en el cálculo del IIE, es la intensidad con la cual la energía de un compuesto químico es liberada (99). En el apéndice A de la Guía para la clasificación de riesgos del Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo se observa una lista de los factores de material de múltiples compuestos, en la Tabla 35 se presentan los FM de las sustancias del reactor.

Tabla 35. Factor de material (99).

Sustancia	Factor de Material	Hc (Mcal/kg)	N _s	N _i	N _r
Ácido acético	10	3,1	3	2	0
Ácido acrílico	14	4,3	3	2	1
Acroleína	24	6,6	4	3	2
Propileno	21	10,9	1	4	0

Siendo:

- Hc es la entalpía de combustión, en Mcal/kg.
- N_s es el índice de peligrosidad para la salud.

- N_i es el índice de peligrosidad para inflamabilidad.
- N_r es el índice de peligrosidad por reactividad.

Según el apéndice B de la guía, en el caso de mezclas se debe elegir el factor de material mayor, es por esto por lo que, en el caso del reactor se elige el de la acroleína.

14.8.2. Riesgos generales del proceso

Los riesgos indicados en este apartado aumentan la intensidad en caso de que ocurra un incidente, son peligros que se pueden presentar en generalmente en cualquier proceso (99). Consta de 6 puntos: Reacciones exotérmicas, reacciones endotérmicas, manejo y transferencia de materiales, unidades de procesos- locales cerrados, acceso, y drenajes.

Se asignará una penalización como indica la guía para cada uno de los puntos, dependiendo de si se cumple o no lo establecido en la misma, se debe tener en cuenta las condiciones normales de operación que acarrear un mayor peligro. Los valores elegidos se presentan en la Tabla 36.

14.8.3. Peligros especiales del proceso

Estos peligros contribuyen a los incidentes que puedan ocurrir aumentando la probabilidad de incendios y explosiones (99). Este apartado consta de los siguientes puntos: Material tóxico, presión Sub-Atmosférica, operación en o cerca de rango de inflamabilidad, explosión de polvo, presión de alivio, baja temperatura, cantidad de material inflamable/inestable, corrosión y erosión, fuga – juntas y embalaje, uso de calentadores con fuego directo, sistema de intercambio de calor de aceite caliente, y equipo rotativo. Como en el apartado anterior, las penalizaciones correspondientes se asignarán siguiendo la guía antes mencionada. Los valores de penalización elegidos se muestran en la Tabla 36.

14.8.4. Formulario del índice de incendios y explosiones

En la Tabla 36 se muestra el formulario realizado para el cálculo del IIE con las diferentes penalizaciones elegidas para el Reactor R-201.

Tabla 36. Formulario del índice DOW para el reactor R-201 (99).

ÁREA/ PAÍS España	SITIO Tarragona	UBICACIÓN Polígono industrial Riu Clar, Tarragona		FECHA 24/05/2021
PREPARADO POR: Fernandez, A.; Jauregui, A.; Marques A.		UNIDAD DE FABRICACIÓN 2-PROPENAL	UNIDAD DE PROCESO Reactor R-201	
MATERIALES EN UNIDAD DE PROCESO PROPILENO, OXÍGENO, NITRÓGENO, HELIO, ÁCIDO ACRÍLICO, ÁCIDO ACÉTICO, MONÓXIDO DE CARBONO, DIÓXIDO DE CARBONO, ACETALDEHÍDO, ACROLEÍNA				
ESTADO DE OPERACIÓN DISEÑO		MATERIAL BÁSICO(S) PARA FACTOR MATERIAL ACROLEÍNA		
FACTOR MATERIAL				24
1. Riesgos generales del proceso			Rango de penalidad	Factor de penalidad
Factor Base			1.00	1
A. Reacciones químicas exotérmicas			0,30 a 1.25	0,5
B. Procesos endotérmicos			0,20 a 0,40	0
C. Manejo y transferencia de materiales			0,25 a 1,05	0
D. Unidades de proceso cerradas o interiores			0,25 a 0,90	0,6

Tabla 36 (continuación). Formulario del índice DOW para el reactor R-201 (99).

E. Acceso	0,20 a 0,35	0
F. Control de drenaje y derrame	0,25 a 0,50	0
Factor de riesgo general del proceso (F1)		2,1
2. Riesgos especiales del proceso		
Factor Base	1,00	1
A. Material tóxico(s) ($N_S = 4$)	0,20 a 0,80	0,2
B. Presión Sub-Atmosférica (< 500 mm Hg)	0,50	0
C. Operación en o cerca de Rango de inflamabilidad (<u>x</u>) inerte		
1. Tanques de almacenamiento líquidos inflamables	0,50	0
2. Error de alteración o purga del proceso	0,30	0
3. Siempre en Rango de inflamabilidad	0,80	0
D. Explosión de polvo	0,25 a 2,00	0
E. Presión de alivio Presión de operación <u>202,65 kPa</u> Ajuste de alivio <u>409kPa</u>		1,2
F. Baja temperatura	0,20 a 0,30	0
G. Cantidad de material inflamable/inestable: Cantidad <u>1.652,88 kg</u> $H_C = \underline{6,6}$ Mcal/kg		
1. Líquidos o gases de proceso		0,17
2. Líquidos o gases de almacenamiento		0
3. Sólidos combustibles en almacenamiento, polvo en proceso		0
H. Corrosión y erosión	0,10 a 0,75	0,1
I. Fuga – Juntas y embalaje	0,10 a 1,50	0,1
J. Uso de equipo con llama		
K. Sistema de intercambio de calor de aceite caliente	0,15 a 1,15	0
L. Equipo rotativo	0,50	0
Factor de riesgo especial del proceso (F2)		2,77
Factor de riesgo de la unidad de proceso ($F_1 \times F_2$) = F_3		5,82
Índice de incendios y explosiones ($F_3 \times MF = F\&EI$).....		140

Se obtiene un IIE de 140, siguiendo lo expuesto en la Tabla 34 se determina que el grado de peligro del reactor R-201 es intenso.

14.8.5. Radio y área de exposición

El radio y área de exposición tienen gran importancia ya que indican el área alrededor del equipo estudiado que podría verse afectada por consecuencia de un incendio u explosión (99). El radio se determina utilizando la Figura 63.

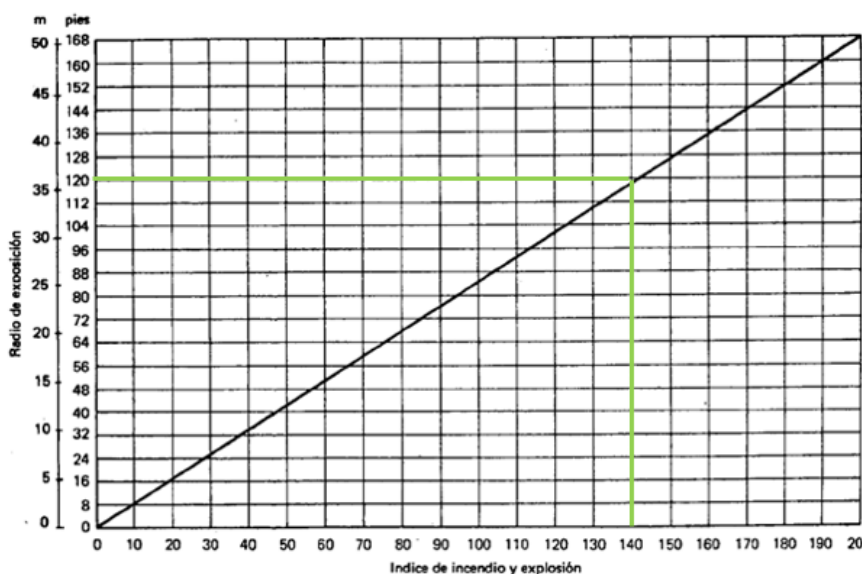


Figura 63. Área de exposición. Adaptada de (99).

Al tener un IIE de 140, el radio resulta de 120 pies (36,58 m), y el área se calcula con la Ecuación [11].

$$\text{área de exposición} = 0,25 \cdot \pi \cdot r^2 \quad [11]$$

Se obtiene un área de exposición de 1.050,71 m².

14.8.6. Factor de daño

El factor de daño puede definirse como el deterioro probable relativo debido a la exposición (99). Este se determina con la Figura 64 donde se utiliza el IIE y el factor de riesgo de la unidad del proceso.

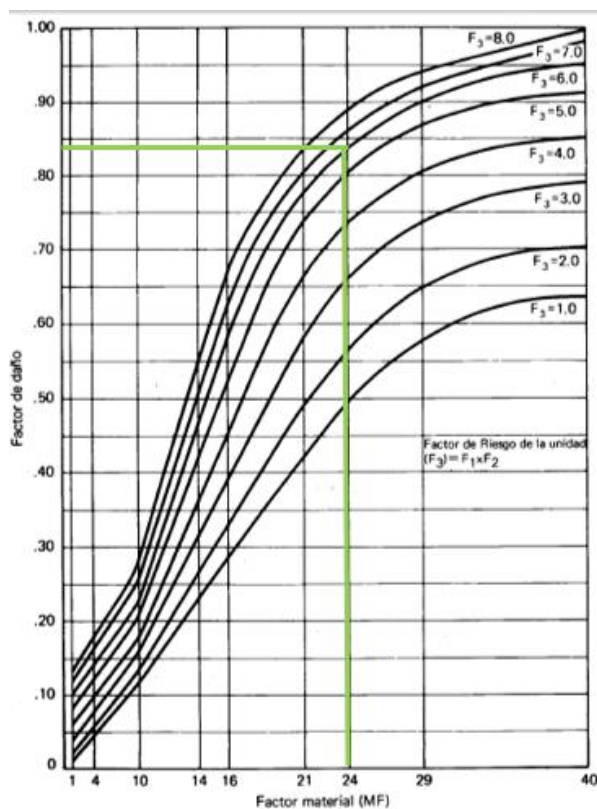


Figura 64. Factor de daño de la unidad. Adaptada de (99).

Se obtuvo un factor de daño de aproximadamente 0,84. Para concluir, las condiciones de proceso en el reactor R-201 presenta un 84% de probabilidad de daño a 1.050,71 m² de área, teniendo un grado de peligro intenso con un IIE de 140.

14.9. Documento de síntesis

En conclusión, en el apartado 14. *Seguridad* se observan los múltiples peligros asociados a las sustancias presentes en el proceso, siendo la acroleína la más destacable de estas y a la que se le deberá tener mayor atención ya que se encuentra presente a lo largo de todo el proceso productivo por ser el producto final. Debido a la cantidad de acroleína almacenada el establecimiento califica de orden superior como indica el Real Decreto 840/2015.

En lo referente al estudio de reacciones descontroladas se determinan múltiples interacciones que pueden afectar la producción en planta si se cumplen las condiciones necesarias, es por esto que, se deben tomar las medidas necesarias para evitar estas reacciones indeseadas. Se determinaron las distancias de seguridad necesarias para los equipos presentes en la planta siguiendo la guía GAPS, aunque en el caso del reactor R-201 se utilizará como distancia de seguridad el radio obtenido en el índice de incendios y explosiones para garantizar la reducción de daños debido a fallos que puedan derivar en explosiones en el reactor.

15. Legislación, normas y códigos de diseño

15.1. Legislación

15.1.1. General

- Real Decreto 842/2002, de 2 de agosto, por el que se aprueba el Reglamento electrotécnico para baja tensión. Con referencia: BOE-A-2002-18099.
- Real Decreto 337/2014, de 9 de mayo, por el que se aprueban el Reglamento sobre condiciones técnicas y garantías de seguridad en instalaciones eléctricas de alta tensión y sus Instrucciones Técnicas Complementarias ITC-RAT 01 a 23. Con referencia: BOE-A-2014-6084.
- Real Decreto Legislativo 2/2015, de 23 de octubre, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley del Estatuto de los Trabajadores. Con referencia: BOE-A-2015-11430.
- Real Decreto 314/2006, de 17 de marzo, por el que se aprueba el Código Técnico de la Edificación. Con referencia: BOE-A-2006-5515.

15.1.2. Seguridad

- 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. Con referencia: DOUE-L-2006-82750.
- Reglamento (UE) 2016/425 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 9 de marzo de 2016, relativo a los equipos de protección individual y por el que se deroga la Directiva 89/686/CEE del Consejo. Con referencia: DOUE-L-2016-80531.
- 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. Con referencia: DOUE-L-2008-82637.
- 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. Con referencia: DOUE-L-2012-81341.
- 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. Con referencia: DOUE-L-197/2.

- 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). Con referencia: DOUE-L-2006-81063.
- 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) (decimoséptima Directiva específica con arreglo al apartado 1 del artículo 16 de la Directiva 89/391/CEE). Con referencia: DOUE-L-2003-80227.
- Directiva 2014/27/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 26 de febrero de 2014, por la que se modifican las Directivas 92/58/CEE, 92/85/CEE, 94/33/CE, 98/24/CE del Consejo y la Directiva 2004/37/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, a fin de adaptarlas al Reglamento (CE) nº 1272/2008 sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas. Con referencia: DOUE-L-2014-80414.
- Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de prevención de Riesgos Laborales. Con referencia: BOE-A-1995-24292.
- Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, por el que se establecen disposiciones mínimas de seguridad y de salud en las obras de construcción. Con referencia: BOE-A-1997-22614.
- 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. BOE-A-2015-11268.
- 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. Con referencia: BOE-A-2003-18682.
- 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. Con referencia: BOE-A-2017-8755.
- Real Decreto 899/2015, de 9 de octubre, por el que se modifica el Real Decreto 39/1997, de 17 de enero, por el que se aprueba el Reglamento de los Servicios de Prevención. Con referencia: BOE-A-2015-10926.
- Real Decreto 2267/2004, de 3 de diciembre, por el que se aprueba el Reglamento de seguridad contra incendios en los establecimientos industriales. Con referencia: BOE-A-2004-21216.
- Real Decreto 513/2017, de 22 de mayo, por el que se aprueba el Reglamento de instalaciones de protección contra incendios. Con referencia: BOE-A-2017-6606.
- Real Decreto 486/1997, de 14 de abril, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en los lugares de trabajo. Con referencia: BOE-A-1997-8669.
- Real Decreto 773/1997, de 30 de mayo, sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas a la utilización por los trabajadores de equipos de protección individual. Con referencia: BOE-A-1997-12735.
- Real Decreto 374/2001, de 6 de abril, sobre la protección de la salud y seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con los agentes químicos durante el trabajo. Con referencia: BOE-A-2001-8436.
- Real Decreto 614/2001, de 8 de junio, sobre disposiciones mínimas para la protección de la salud y seguridad de los trabajadores frente al riesgo eléctrico. Con referencia: BOE-A-2001-11881.
- Real Decreto 1311/2005, de 4 de noviembre, sobre la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores frente a los riesgos derivados o que puedan derivarse de la exposición a vibraciones mecánicas. Con referencia: BOE-A-2005-18262.
- Real Decreto 286/2006, de 10 de marzo, sobre la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con la exposición al ruido. Con referencia: BOE-A-2006-4414.

15.1.3. Medio ambiente

- Directiva 2010/75/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de noviembre de 2010, sobre las emisiones industriales (prevención y control integrados de la contaminación). Con referencia: DOUE-L-2010-82362.
- Directiva 2002/49/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 25 de junio de 2002, sobre evaluación y gestión del ruido ambiental. Con referencia: DOUE-L-2002-81289.
- 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. Con referencia: DOUE-L-2014-80824.
- Decisión (UE) 2015/633 del Consejo, de 20 de abril de 2015, relativa a la presentación, en nombre de la Unión Europea, de una propuesta de inclusión de nuevos productos químicos en el anexo A del Convenio de Estocolmo sobre contaminantes orgánicos persistentes. Con referencia: DOUE-L-2015-80778.
- Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire. Con referencia: BOE-A-2011-1645
- 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. Con referencia: DOUE-L-2001-81821.
- Reglamento (CE) nº 166/2006 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 18 de enero de 2006, relativo al establecimiento de un registro europeo de emisiones y transferencias de contaminantes y por el que se modifican las Directivas 91/689/CEE y 96/61/CE del Consejo. Con referencia: DOUE-L-2006-80221.
- Real Decreto 524/2006, de 28 de abril, por el que se modifica el Real Decreto 212/2002, de 22 de febrero, por el que se regulan las emisiones sonoras en el entorno debidas a determinadas máquinas de uso al aire libre. Con referencia: BOE-A-2006-7900.
- Real Decreto 817/2015, de 11 de septiembre, por el que se establecen los criterios de seguimiento y evaluación del estado de las aguas superficiales y las normas de calidad ambiental. Con referencia: BOE-A-2015-9806.
- Real Decreto 815/2013, de 18 de octubre, por el que se aprueba el Reglamento de emisiones industriales y de desarrollo de la Ley 16/2002, de 1 de julio, de prevención y control integrados de la contaminación. Con referencia: BOE-A-2013-10949.
- Real Decreto 553/2020, de 2 de junio, por el que se regula el traslado de residuos en el interior del territorio del Estado. Con referencia: BOE-A-2020-6422.
- Real Decreto Legislativo 1/2001, de 20 de julio, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley de Aguas. Con referencia: BOE-A-2001-14276.
- Ley 16/2002, de 28 de junio, de Protección contra la Contaminación Acústica. Con referencia: BOE-A-2002-14987.
- Ley 22/2011, de 28 de julio, de residuos y suelos contaminados. Con referencia: BOE-A-2011-13046.
- Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera. Con referencia: BOE-A-2007-19744.
- Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental. Con referencia: BOE-A-2013-12913.
- Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido. Con referencia: BOE-A-2003-20976.
- Orden AAA/2230/2013, de 25 de noviembre, por la que se regula el procedimiento de comunicación entre las administraciones autonómicas, estatal y comunitaria de la información oficial de los espacios protegidos Red Natura 2000. Con referencia: BOE-A-2013-12567.

15.2. Normas y códigos de diseño

- Código ASME BPV
- Normativa TEMA
- Código API RP 520
- ASTM A312 / ASME SA312
- Estándar ISA-5.1-1984 (R1992)
- AIChE
- Norma DIN 28011
- Código API 526
- Norma NFPA 704
- Normas UNE
- Normas ISO
- Guías GAP 2.5.2

16. Bibliografía

1. **ULLMANN, F. & GERHARTZ, W.** *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Weinheim: Wiley-VCH, 2012. Vol. I. ISBN: 3-527-20101-7.
2. **ANICE.** El sector cárnico español. [En línea] 2020. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: <https://www.anice.es/industrias>.
3. **ULLMANN, F. & GERHARTZ, W.** *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Weinheim: Wiley-VCH, 2012. Vol. XXX. ISBN: 9783527306732.
4. **KIRK, R. & OTHMER, D.** *Encyclopedia of Chemical Technology*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1991-1998. Vol. XX. ISBN: 0-471-52689-4.
5. **Messer Ibérica de Gases, SAU.** Ficha de datos de seguridad: PROPILENO. [En línea] 2017. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: https://www.messer.es/fichas-tecnicas/-/categories/5159134?p_r_p_categoryId=5159134.
6. **Encyclopaedia Britannica.** Helium: Chemical Element. [En línea] 2020. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: <https://www.britannica.com/science/helium-chemical-element#ref283904>.
7. **Lenntech B.V.** Chemical properties of helium - Health effects of helium. [En línea] [consultado febrero de 2021]. Disponible en: <https://www.lenntech.com/periodic/elements/he.htm>.
8. **University of Florida.** Liquid Helium. [En línea] [consultado febrero de 2021]. Disponible en: <https://www.ehs.ufl.edu/programs/lab/cryogenics/helium/>.
9. **Messer Ibérica de Gases, SAU.** Ficha de datos de seguridad: HELIO/LASLINE HE. [En línea] 2017. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: https://www.messer.es/fichas-seguridad/-/categories/4075334?p_r_p_categoryId=4075334.
10. **The Engineering ToolBox.** Helium - Thermophysical Properties. [En línea] 2008. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: https://www.engineeringtoolbox.com/helium-d_1418.html.
11. **CAVETTE, C.** Helium. [En línea] 2018. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: <https://www.encyclopedia.com/science-and-technology/chemistry/compounds-and-elements/helium>.
12. **Ambientum.** Composición de la atmósfera. [En línea] [consultado febrero de 2021]. Disponible en: https://www.ambientum.com/enciclopedia_medioambiental/atmosfera/composicion-de-la-atmosfera.asp.
13. **The Engineering ToolBox.** Air - Thermophysical Properties. [En línea] 2003. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: https://www.engineeringtoolbox.com/air-properties-d_156.html.
14. **LIU, L., YE, P. & BOZELL, J.** A comparative review of petroleum-based and bio-based acrolein production. *ChemSusChem*, 2012, 5, 1162-1180. DOI: 10.1002/cssc.201100447.
15. **KIRK, R. & OTHMER, D.** *Encyclopedia of Chemical Technology*. New York: John Wiley & Sons, 1991-1998. Vol. I. ISBN: 0-471-52669-X.

16. **SCHON, S., DANIEL, S. & SANDER, R.** Patente ES 2 278 887 T3. [En línea] Arkema, Inc., 2007. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://patentimages.storage.googleapis.com/95/06/87/92661f7e47af85/ES2278887T3.pdf>.
17. **BASF Corporation & ICSHAM Member Companies.** *Acrylic acid a summary of safety and handling*. 3º ed. North America. [En línea]. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: <http://www2.basf.us/acrylicmonomers/pdfs/AABroch.pdf>
18. **BROWN, W.** Acetaldehyde: Chemical Element. [En línea] 2019. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: <https://www.britannica.com/science/acetaldehyde>.
19. **National Center for Biotechnology Information.** PubChem Acetaldehyde. [En línea] [consultado febrero de 2021]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acetaldehyde>.
20. **APA.** Acetaldehído. N° CAS. 75-07-0. [En línea] 2001. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: <http://documentacion.apa.es/pdfs/fichas/F200.pdf>.
21. **Chemicals Evaluation and Research Institute (CERI).** Hazard Assessment Report: Acetaldehyde. [En línea] 2007. [consultado febrero de 2021]. Disponible en: https://www.cerij.or.jp/ceri_en/hazard_assessment_report/pdf/en_75_07_0.pdf.
22. **National Center for Biotechnology Information.** PubChem Acetic Acid. [En línea] [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acetic-acid>.
23. **International Trade Centre.** TRADE MAP: Estadísticas del comercio para el desarrollo internacional de las empresas. Datos comerciales mensuales, trimestrales y anuales. Valores de importación y exportación, volúmenes, tasas de crecimiento, cuotas de mercado, etc. [En línea] [consultado marzo de 2021]. Disponible en: https://www.trademap.org/Country_SelProduct_TS.aspx?nvpm=3%7c%7c%7c%7c%7cTOTAL%7c%7c%7c2%7c1%7c1%7c1%7c2%7c1%7c2%7c1%7c1%7c1.
24. **LAZIC, O.** European propylene prices move higher, supported by stronger feedstocks. [En línea] S&P Global, 2020. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.spglobal.com/platts/en/market-insights/latest-news/oil/071020-european-propylene-prices-move-higher-supported-by-stronger-feedstocks>.
25. **WEDDLE, N.** Europe ethylene, propylene in cautious mode after H1 expectations disrupted by global woes. [En línea] ICIS, 2019. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2019/06/18/10379838/europe-ethylene-propylene-in-cautious-mode-after-h1-expectations-disrupted-by-global-woes>.
26. **ECHEMI.com.** PROPYLENE Market Price & Analysis. [En línea] [consultado marzo de 2021]. Disponible en: https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Seven1855-propylene.html.
27. **The Business Research Company.** Propylene Global Market Report 2020. [En línea] 2020. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.thebusinessresearchcompany.com/report/propylene-global-market-report>.
28. **REPSOL.** Complejo Industrial: Tarragona. [En línea] [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://tarragona.repsol.es/es/sobre-complejo/nuestras-instalaciones/index.cshhtml#:~:text=Destaca%20la%20planta%20de%20olefinas,de%20200.000%20toneladas%20de%20productos>.
29. **BERNAL, J.** Transformando y expandiendo, Química. [En línea] REPSOL, 2019. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: https://www.repsol.com/imagenes/global/es/chemicals-transforming-expanding-CNMV-ES_tcm13-176115.pdf.
30. **REPSOL.** La Refinería de Repsol implantará nuevas medidas de innovación y sostenibilidad en 2020. [En línea] 2019. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://acoruna.repsol.es/es/actualidad/notas-prensa/2019/refineria-repsol-implantara-nuevas-medidas-innovacion-y-sostenibilidad-en-2020.cshhtml>.
31. **ESCRIBANO, M.** Basf inaugura una nueva planta de deshidrogenación de propano en Tarragona. [En línea] 2004. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.interempresas.net/Plastico/Articulos/8172-Basf-inaugura-una-nueva-planta-de-deshidrogenacion-de-propano-en-Tarragona.html>.

32. **Wood Mackenzie.** Propylene Global Supply Demand Analytics Service. [En línea] 2018. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.woodmac.com/ja/news/editorial/propylene-global-supply-demand-analytics-service/>.
33. **BLENGINI, G., LATUNUSSA, C., et al.** *Study on the EU's list of Critical Raw Materials (2020), Factsheets on Non-critical Raw Materials*. Luxemburgo: Publications Office of the European Union, 2020. ISBN: 978-92-76-21052-8.
34. **HANNAM & PARTNERS.** *Helium: A Super Cool Commodity* [En línea] 2020. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://assets.lsegissuerservices.com/original-1fdbac35-5202-4a6b-a146-d02ab8d29538.pdf>.
35. **CARCAR, S.** *El Acuerdo Naturgy-Sonatrach Devuelve a Argelia el Liderazgo en la Venta de Gas*. [En línea] La Información, 2020 [Consultado en marzo 2021]. Disponible en: <https://www.lainformacion.com/empresas/acuerdo-naturgy-sonatrach-argelia-liderazgo-gas/2820541/>.
36. **The Business Research Company.** *Helium Global Market Report 2020*. [En línea] 2020. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.thebusinessresearchcompany.com/report/helium-global-market-report>.
37. **ADISSEO.** *Smartamine® Y Metasmart®*. [En línea] 2021. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.adisseo.com/es/productos/smartline/>
38. **Maia Research Analysis.** *Global Acrylaldehyde Market 2019*. 2021.
39. **L. M. Adisseo** *Invierte 21 Millones en Subir su Producción* [En línea]. Diario de Burgos, 2020. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.diariodeburgos.es/Noticia/Z16942352-F91D-93D3-BAA49066BD9D6B44/202012/Adisseo-invierte-21-millones-en-subir-su-producci%C3%B3n>
40. **Market Intellica.** *Global Acrolein Market Report*. [En línea] 2019. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.marketintellica.com/report/MI56173-global-acrolein-market-report-2019>.
41. **Coherent Market Insight.** *Acrolein Market Analysis*. [En línea] 2019. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.coherentmarketinsights.com/ongoing-insight/acrolein-market-2725>.
42. **U.S. Department of Health and Human Services.** *Toxicological Profile For Acrolein*. [En línea] 2017. [consultado abril de 2021]. Disponible en: <https://www.atsdr.cdc.gov/toxprofiles/tp124.pdf>.
43. **FOLLIARD, V., TOMMASO, J. & DUBOIS, J.** Review on Alternative Route to Acrolein through Oxidative Coupling of Alcohols. *Catalysts*, 2021, 11, 229. [En línea]. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.mdpi.com/2073-4344/11/2/229>.
44. **Markets & Markets.** *Acrylic Acid Market by Derivative (Esters/Acrylates - METHYL, ETHYL, BUTYL, 2-EH; Polymers - Elastomers, Superabsorbent Polymers, Water Treatment Polymers; Other Derivatives), by Applications & Region - Global Forecast to 2020*. [En línea] 2019. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/acrylic-acid-market-683.html>.
45. **ICIS.** *Acrylic Acid Uses and Market Data*. [En línea] 2010. [consultado abril de 2021]. Disponible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/11/01/9074870/acrylic-acid-uses-and-market-data/>
46. **Allied Market Research.** *Acrylic Acid Market by Derivative Type - Global Opportunity Analysis and Industry Forecast, 2016 – 2022*. [En línea] 2014. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.alliedmarketresearch.com/acrylic-acid-market#:~:text=Acrylic%20Acid%20Market%20size%20was,characteristic%20tart%20or%20acr>.
47. **Future Market Research.** *Acrylic Acid Market Will Survive Stringent Environment Regulations with Its New Innovation In The Derivative I.E. Bio Based Acrylic Polymers*. [En línea] 2014. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.marketresearchfuture.com/articles/acrylic-acid-market>.

48. **ECHEMI.** *Acrylic Acid Market Price & Analysis*. [En línea] 2021. [consultado abril de 2021]. Disponible en: https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Rock15029-acrylic-acid.html#:~:text=Acrylic%20Acid%20Market%20Price%20%26%20Analysis&text=Reference%2.
49. **Reports and Data.** *Acetaldehyde Market By Performance Type (Ethylene Oxidation, Acetaldehyde Market By Performance Type (Ethylene Oxidation, Acetic Acid, Ethyl Acetate, and Others), And By Application, 2016-2026*. [En línea] 2019. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.reportsanddata.com/report-detail/acetaldehyde-market>.
50. **Markets and Markets.** *Acetaldehyde Market by Process (Wacker Process, Oxidation of Ethanol, Dehydrogenation of Ethanol), Derivative (Pyridine & Pyridine Bases, Pentaerythritol), Application (Food & Beverage, Chemicals, Paints & Coatings), and Region - Global Forecast to 2022*. [En línea] 2018. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/acetaldehyde-market-113225129.html>.
51. **The Insight Partners.** *Acetaldehyde Market to 2027 - Global Analysis and Forecasts by Process, Derivative, Application and Geography*. [En línea] 2019. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.theinsightpartners.com/reports/acetaldehyde-market/>.
52. **ECHEMI.** *Acetaldehyde Market Price & Analysis*. [En línea] 2021. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Rock16660-acetaldehyde.html#:~:text=Acetaldehyde%20Market%20Price%20%26%20Analysis&text=Refe.
53. **GHOSH, P.** *Polymer Science and Technology: Plastics, Rubbers, Blends and Composites*. Nueva York: McGraw-Hill Education, 2011. ISBN: 9780070707047.
54. **SPEIGHT, J.** *Chemical Process and Design Handbook*. Nueva York: McGraw-Hill Education, 2002. ISBN: 9780071374330.
55. **Reports and Data.** *Acetic Acid Market Share, Growth & Analysis, By Form, By Manufacturing Process, By Application, By End-Users, Segment Forecasts To 2027*. [En línea] 2020. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.reportsanddata.com/report-detail/acetic-acid-market>.
56. **Global Market Insights.** *Acetic Acid Market Size by Application, Bio-based Acetic Acid, Industry Analysis Report, Regional Outlook, Growth Potential, Price Trends, CompetitiveMarket Share & Forecast, 2017–2024*. [En línea] 2016. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.gminsights.com/industry-analysis/acetic-acid-market>.
57. **RAIZADA, T.** *US Acetic Acid Demand Soft in the Americas*. [En línea] ICIS, 2016. [consultado abril de 2021]. Disponible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2016/09/02/10031371/us-acetic-acid-demand-soft-in-the-americas/#:~:text=US%20acetic%20acid%20domestic%20spot,Coast%2C%20according%20to%20>.
58. **LEE, H.** *Acetic Acid Prices and Pricing Information*. [En línea] ICIS, 2011. [consultado abril de 2021]. Disponible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/11/01/9074786/acetic-acid-prices-and-pricing-information/>.
59. **TALEBIAN, A., SAIDINA N. & HEZAVEH, H.** Glycerol for renewable acrolein production by catalytic dehydration. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2014, 40, 28-59. ISSN 1364-0321.
60. **GANZER, G. & FREUND, H.** Industrial & Engineering Chemistry Research. *Kinetic Modeling of the Partial Oxidation of Propylene to Acrolein: A Systematic Procedure for Parameter Estimation Based on Non-isothermal Data*. [En línea] 2019. [Consultado en marzo 2021]. Disponible en: https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.iecr.8b05583?casa_token=divCrNKXrBUAAAAA:93lIdiaUcZ0cUb-11B6xVNx9-UIBPncfVu7-DdOqYRXHa2tGKiRP7hwQXCpkxhJ5UzlyFbNN6-otdasB.
61. **SETYOWATI, S.** *Catalytic Partial Oxidation of Propylene for Acrolein Production*. [En línea] Perth: Department of Chemical Engineering of Curtin University, 2011. [Consultado en marzo 2021]. Tesis Doctoral. Disponible en: <http://hdl.handle.net/20.500.11937/584>.
62. **VEDRINE, J.** *Metal Oxides in Heterogeneous Catalysis*. París: Elsevier, 2018. ISBN: 978-0-12-811631-9.
63. **TOWLER G. & SINNOTT R.** *Chemical Engineering Design*. Elsevier, Inc., 2008. ISBN 978-0-7506-8423-1.
64. **AIRES, L. & PUÑET, A.** *AOP Memoria*. [En línea] España, 2019. [Consultado en marzo 2021]. Disponible en: https://www.aop.es/wp-content/uploads/2020/07/aop_memoria2019_def.pdf

65. **Air Liquide.** Maritime Activity Conquering New Maritime Markets. [En línea] 2021. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.airliquide.com/group/maritime-logistics>.
66. **Google Maps.** Google, Instituto Geográfico Nacional. [En línea] 2021. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.google.es/maps/preview>.
67. **D.C. Complejo de Tarragona el Mayor Polo Petroquímico De España.** [En línea]. Barcelona: ABC Cataluña, 2020 [consultado marzo de 2021]. Disponible en: https://www.abc.es/espana/catalunya/abci-complejo-tarragona-mayor-polo-petroquimico-espana-202001142000_noticia.html?ref=https:%2F%2Fwww.google.com%2F.
68. **Ajuntament de Tarragona.** Polígons D'activitat Econòmica. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.tarragona.cat/tarragonaimpulsa/fitxers/altres/POLIGONSDEFINITIUIMPRIMIR.pdf>.
69. **INCASOL.** Busques Terrenys Industrials a Tarragona. [En línea] 2021. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://incasolsolars.cat/terrenys-tarragona/>.
70. **Gobierno de España.** Sede Electrónica del Catastro. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www1.sedecatastro.gob.es/Cartografia/mapa.aspx?refcat=0345913CF5505S&from=OVCBusqueda&pest=rc&final=&RCCompleta=0345913CF5505S&ZV=NO&ZR=NO&anyozv=&tematico=s=&del=43&mun=900>.
71. **AEMET.** Agencia Estatal de Meteorología. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://datosclima.es/index.htm>.
72. **WEATHERSPARK.** El Clima Promedio En Tarragona. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://es.weatherspark.com/y/45958/Clima-promedio-en-Tarragona-Espa%C3%B1a-durante-todo-el-a%C3%B1o/es.weatherspark.com/y/45958/Clima-promedio-en-Tarragona-Espa%C3%B1a-durante-todo-el-a%C3%B1o>.
73. **CANALES, C., CORTÉS, V. & MARTÍNEZ, J.** Guía de mejores técnicas disponibles en España del sector refino de petróleo. *Ministerio de Medio Ambiente, España*, 2004, 86.
74. **Diari de Tarragona.** BASF SONATRACH Propanchem ampliará su planta de TGN en 2021. [En línea] 30 de noviembre de 2020. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www1.sedecatastro.gob.es/Cartografia/mapa.aspx?refcat=0345913CF5505S&from=OVCBusqueda&pest=rc&final=&RCCompleta=0345913CF5505S&ZV=NO&ZR=NO&anyozv=&del=43&mun=900>.
75. **AITASA.** Aguas Industriales De Tarragona. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <http://www.aitasa.es/cas/empresa/dades.html>.
76. **ERCROS S.A.** Fábrica De Tarragona. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: http://www.ercros.es/index.php?option=com_content&view=article&id=123&Itemid=355&lang=es.
77. **IGN.** Instituto Geográfico Nacional. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <http://www.ign.es/web/ign/portal/mapas-sismicidad>.
78. **ENTERAT.** Mapa de carreteras, autovías y autopistas España 2021. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.enterat.com/servicios/mapa-carreteras-autopistas-espana.php>.
79. **Port Tarragona.** Un puerto en una ciudad privilegiada del Mediterráneo. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.porttarragona.cat/es/port/situacion-y-accesos>.
80. **Universitat Rovira i Virgili.** La Universidad Pública Del Sur De Cataluña. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.master-maestrias.com/universidades/Espana/URV/>.
81. **Departamento de Territorio y Sostenibilidad.** Datos E Informes De La Calidad Del Aire En Tarragona. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: http://mediambient.gencat.cat/es/05_ambits_dactuacio/atmosfera/qualitat_de_laire/qa-camp-tgn/dades/.
82. **BASH.** Cluster Químico. [En línea]. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.basf.com/es/es/who-we-are/BASF-en-Espan-a/Ubicaciones/Tarragona/El-complejo-quimico-mas-grande-del-sur-de-Europa.html>.
83. **United States Patent Application.** Fixed-Bed Shell-and-Tube Reactor and Its Usage. Brimhall: Nippon Shokubai Co., Ltd., 2002.

84. **Evonik Corporation.** SEPURAN® Noble: Membrane Technology for Efficient Helium Recovery & Purification. [En línea] octubre de 2020. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://corporate.evonik.com/Downloads/membrane-separation/sepuran-noble-sellsheet.pdf>.
85. **Boletín Oficial del Estado.** Real Decreto Legislativo 2/2015, de 23 de octubre, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley del Estatuto de los Trabajadores. [En línea] 24 de octubre de 2015. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://www.boe.es/buscar/pdf/2015/BOE-A-2015-11430-consolidado.pdf>.
86. **SERRANO, R., FRADERA, J. & CUESTA-LOPEZ, S.** Molten salts database for energy applications. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 2013. 87-102. DOI: 10.1016/j.cep.2013.07.008.
87. **STEPHANOPOULOS, G.** *Chemical process control: an introduction to theory and practice*. New Jersey: Prentice-Hall, 1984. ISBN: 0-13-128629-3.
88. **SVRCEK, W., MAHONEY, D. & YOUNG, B.** *A real-time approach to process control*. 3º ed. West Sussex : John Wiley & Sons, 2014. ISBN: 9781119993889.
89. **KUPHALDT, T.** *Lessons In Industrial Instrumentation*. [En línea] 2019. [consultado abril de 2021]. Disponible en: https://www.ibiblio.org/kuphaldt/socratic/sinst/book/liii_2v32.pdf.
90. **DUNN, W.** *Introduction to instrumentation, sensors and process control*. Boston: Artech House, 2005. ISBN: 1580530117.
91. **ISA-The Instrumentation, Systems, and Automation Society.** *STANDARD ISA-5.1-1984 (R1992). Instrumentation Symbols and Identification*. North Carolina, 1992. ISBN: 0-87664-844-8.
92. **KISTER, H.** *Distillation Operation. Basic Distillation Control Philosophy*. McGraw-Hill Education, 1990. ISBN: 9780070349100.
93. **Comisión Europea.** *Reglamento (CE) Nº 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo de 16 de diciembre de 2008*. Diario Oficial de la Unión Europea.
94. **Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo.** *Regulación UE sobre productos químicos (II). Reglamento CLP: aspectos básicos*. 2010.
95. **Boletín Oficial del Estado.** *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*.
96. **CROWL, D. & LOUVAR, J.** *Chemical Process Safety: fundamentals with applications*. 3º ed. Prentice Hall, 2011.
97. **National Fire Protection Association.** *NFPA 704: Standard System for the Identification of the Hazard of materials for Emergency Response*. 2022.
98. **Global Asset Protection Services LLC.** *GAP 2.5.2 Oil and Chemical plant layout and spacing*. 2015.
99. **Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo.** *Índice de Incendio y Explosión: Guía para la Clasificación de Riesgos*. 5º ed. Barcelona, 2006.



Andrea Estefanía
Fernández Soto



Andrea Paola
Marques Cosme



Alejandro José
Jauregui Rodríguez

ANEXO I: BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

ÍNDICE

1.	Balances de materia.....	1
1.1.	Introducción.....	1
1.2.	Balance de materia global.....	1
1.3.	Balance de materia por unidades.....	3
1.3.1.	Reactor R-201.....	3
1.3.2.	Columna <i>quench</i> T-301.....	4
1.3.3.	Columna de absorción T-302	5
1.3.4.	Columna de desorción T-303	6
1.3.5.	Columna de destilación T-304.....	7
2.	Balances de energía	9
2.1.	Introducción.....	9
2.2.	Válvulas.....	10
2.2.1.	Válvula VLV-101	10
2.2.2.	Válvula VLV-301	12
2.3.	Compresor K-101	12
2.4.	Intercambiadores de calor.....	13
2.4.1.	Intercambiador de calor E-101.....	13
2.4.2.	Intercambiador de calor E-102.....	14
2.4.3.	Intercambiador de calor E-301.....	14
2.4.4.	Intercambiador de calor E-302.....	14
2.4.5.	Intercambiador de calor E-303.....	15
2.5.	Reactor R-201	15
2.6.	Columna <i>quench</i> T-301.....	15
2.7.	Columna de absorción T-302	16
2.8.	Columna de desorción T-303.....	17
2.9.	Columna de destilación T-304.....	18
2.10.	Resumen.....	19
3.	Bibliografía.....	19

1. Balances de materia

1.1. Introducción

Los balances de materia son esenciales a la hora de diseñar un proceso, ya que estos determinan las cantidades de materias primas necesarias para producir la cantidad deseada de producto. Además, con estos balances es posible definir las corrientes y las composiciones del proceso, siendo esto fundamental para su dimensionado. Es por ello que, en este anexo se realizarán los balances de materia de los diversos equipos presentes en la planta, y un balance global para garantizar el cierre y comprobar la coherencia de los resultados.

Los balances serán planteados siendo la expresión general de conservación que se muestra en Ecuación [1] (1).

$$E - S + G = A \quad [1]$$

Donde:

- E es la entrada al sistema, en kg/h.
- S es la salida del sistema, en kg/h.
- G es el término de generación en el caso de existir reacción química, en kg/h.
- A es la acumulación en el sistema, en kg/h.

Dado que el proceso planteado se encuentra en estado estacionario, el término de acumulación en el sistema es nulo. Asimismo, el término de generación solo se tiene en cuenta cuando hay reacción química. En consecuencia, exceptuando el reactor R-201, el balance de materia se reduce a la Ecuación [2] (1).

$$E - S = 0 \quad [2]$$

A continuación, se presentan tanto el balance de materia global como el balance de materia de los equipos principales del proceso. No se tomarán en cuenta los equipos que no produzcan cambios entre la corriente de entrada y salida, como en el caso de bombas, compresores, válvulas e intercambiadores de calor, donde las variaciones son solo en la presión o la temperatura.

1.2. Balance de materia global

Se ha calculado el balance de materia global tomando en cuenta que se desean producir 10.000 t/año, es decir 1.302,08 kg/h de acroleína trabajando 320 días al año, las 24 horas del día. El cálculo de la cantidad de materias primas requeridas para producir esta cantidad se mostrará más adelante, al igual que los balances de cada equipo que permiten conocer la composición en las corrientes de salida globales del sistema.

Los resultados obtenidos para las corrientes de entrada se muestran en la Tabla 1, mientras que los obtenidos para las corrientes de salida se recogen en la Tabla 2. Asimismo, se muestra el cierre del balance global en la Tabla 3.

Cabe destacar, que la numeración de las corrientes de entrada y salida del proceso, son basadas en el *Plano 3. Diagrama de Flujo*, que se encuentra en el *Documento II: Planos* del presente proyecto.

Tabla 1. Corrientes de entrada del proceso.

Compuesto	Corrientes (kg/h)					
	1	2	4	12	16	20
Propileno	-	1.715,94	-	-	-	-
Inerte (Helio)	620,40	-	-	-	-	-
Acroleína	-	-	-	-	-	-
Ácido acrílico	-	-	-	-	-	-
Ácido acético	-	-	-	-	-	-
Agua	-	-	-	5.000,00	38.732,47	8.025,00
Dióxido de carbono	-	-	-	-	-	-
Monóxido de carbono	-	-	-	-	-	-
Oxígeno	-	-	2.346,71	-	-	-
Nitrógeno	-	-	7.753,79	-	-	-
Acetaldehído	-	-	-	-	-	-
Total	620,40	1.715,94	10.100,50	5.000,00	38.732,47	8.025,00

Tabla 2. Corrientes de salida del proceso.

Compuesto	Corrientes (kg/h)				
	13	17	21	25	26
Propileno	-	51,47	-	-	-
Inerte (Helio)	-	620,40	-	-	-
Acroleína	112,83	172,21	22,11	1.337,07	8,66
Ácido acrílico	232,37	-	8,93	-	-
Ácido acético	12,56	-	0,40	-	-
Agua	5.003,80	103,18	46.608,94	47,74	924,44
Dióxido de carbono	0,15	707,03	-	1,32	-
Monóxido de carbono	-	76,45	-	-	-
Oxígeno	-	368,34	-	-	-
Nitrógeno	0,04	7.753,75	-	-	-
Acetaldehído	6,42	-	4,56	9,13	-
Total	5.368,18	9.852,83	46.644,94	1.395,26	933,10

Tabla 3. Cierre del balance de materia global.

Corrientes	Flujo másico (kg/h)
Entrada (1, 2, 4, 12, 16, 20)	64.194,31
Salida (13, 17, 21, 25, 26)	64.194,31
Cierre	0,00
Error de cierre (%)	0,00

1.3. Balance de materia por unidades

En este apartado se expondrán los balances de materia realizados a cada uno de los equipos principales del presente proyecto. Concretamente, se mostrarán a continuación los balances siguiendo el orden de aparición en la planta, siendo este orden: reactor R-201, columnas *quench* T-301, de absorción T-302, de desorción T-303 y de destilación T-304.

1.3.1. Reactor R-201

Para la realización del balance a este equipo, lo primero que se debe determinar es la cantidad de propileno requerida para producir las 10 mil toneladas de acroleína establecidas anualmente. Asimismo, ha de tenerse en cuenta la complicada red de reacciones del sistema, dado que no todo el propileno será transformado a acroleína, y parte de la acroleína formada reaccionará para formar ácido acrílico. Por consiguiente, es fundamental conocer no solo la conversión del propileno, pero también la selectividad de cada reacción en paralelo, y la conversión de acroleína y acetaldehído para las reacciones consecutivas.

Cabe destacar, que la conversión del propileno viene fijada por la masa de catalizador presente en el equipo. Además, siendo este el único equipo para la producción de acroleína ha de considerarse la eficacia de los demás equipos de la planta. Pues en cada equipo habrá pérdidas de acroleína, disminuyendo así el flujo de corriente de acroleína de salida del sistema.

Es por ello, que se realizó una primera estimación de las eficiencias de los demás equipos en *Aspen Hysys* para determinar los kilos de acroleína que se pierden. Aumentando, por lo tanto, la cantidad a producir en el reactor, de forma que se asegure una salida de producto como mínimo de 10 mil toneladas anuales de acroleína.

Por otro lado, las conversiones, selectividades, relaciones molares de los compuestos a la entrada, así como una explicación más detallada de la obtención de estos parámetros, se muestra en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201*. Siendo de relevancia para este apartado la conversión del propileno que es de 97% y la selectividad hacia la acroleína que es 83%.

Por lo tanto, sumándole a las 10 mil toneladas la cantidad de acroleína que se pierde en la planta, se puede emplear la Ecuación [3], para determinar los moles de acroleína que se deben producir en la planta por hora.

$$F_{ac} = M_{ac} \cdot \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ ton}} \cdot \frac{1 \text{ kmol}}{56,06 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ año}}{320 \text{ días}} \cdot \frac{1 \text{ día}}{24 \text{ horas}} \quad [3]$$

Siendo:

- M_{ac} la masa de acroleína que debe producir, en t/año.
- F_{ac} el flujo molar de la acroleína producido, en kmol/h.

Por otro lado, se aplica la Ecuación [4] para determinar la cantidad molar de propileno requerida a la entrada del equipo.

$$F_{pp} = F_{ac} \cdot \frac{1 \text{ mol propileno}}{0,97 \text{ mol acroleína}} \cdot \frac{1}{S_1} \quad [4]$$

Siendo:

- S_1 la selectividad de la reacción de la acroleína.
- F_{pp} el flujo molar de propileno a la entrada, en kmol/h.

Conocida la cantidad de propileno necesaria, se emplean las relaciones molares entre este y los demás compuestos de la entrada. Siendo estos el aire (1: 8,6) y el helio (1: 3,8), y posteriormente con los pesos moleculares es posible calcular la masa de cada compuesto a la entrada del reactor.

Por último, para el cálculo de los flujos molares de los subproductos formados por las reacciones en paralelo se vuelve a emplear la Ecuación [4]. No obstante, esta vez se conoce F_{pp} y se despeja F_i , siendo i el subproducto, con su respectiva selectividad S_i .

Asimismo, para las reacciones consecutivas se toma en cuenta la conversión de acroleína y acetaldehído para la formación de los ácidos acrílico y acético, respectivamente. Siendo por lo tanto los moles de acroleína y acetaldehído, la resta de los formados por el propileno menos los reaccionados para la producción de los ácidos. Todos los parámetros se muestran, como se mencionó anteriormente, en el Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201.

En la Tabla 4 se recogen los resultados obtenidos del balance, mostrando las corrientes másicas de entrada y salida de este equipo, y en la Tabla 5 el cierre del balance de materia.

Tabla 4. Balance de materia al reactor R-201.

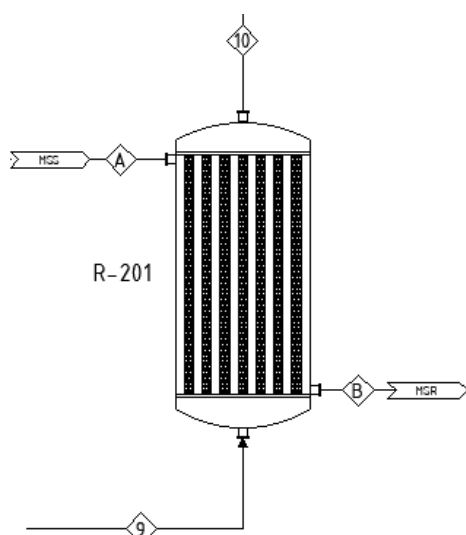


Figura 1. Reactor R-201.

Compuesto	Corrientes (kg/h)	
	9	10
Propileno	1.715,94	51,48
Inerte (Helio)	620,40	620,40
Acroleína	-	1.652,88
Ácido acrílico	-	241,30
Ácido acético	-	12,96
Agua	-	930,63
Dióxido de carbono	-	708,50
Monóxido de carbono	-	76,45
Oxígeno	2.346,71	368,34
Nitrógeno	7.753,79	7.753,79
Acetaldehído	-	20,11
Total	12.436,84	12.436,84

Tabla 5. Cierre del balance de materia al reactor R-201.

Corrientes	Flujo másico (kg/h)
Entrada (9)	12.436,84
Salida (10)	12.436,84
Cierre	0,00
Error de cierre (%)	0,00

1.3.2. Columna quench T-301

Este equipo tiene como finalidad eliminar los ácidos formados en el reactor R-201, de la corriente de producto, es decir, de eliminar el ácido acético y acrílico. No se puede separar en su totalidad los ácidos de la corriente, sin embargo, se ha fijado para el ácido acético una eliminación del 96% y para el ácido acrílico del 97%, una vez simulado en *Aspen Hysys*. Los datos de las corrientes de

entrada y salida del equipo se muestran en la Tabla 6 y en la Tabla 7 se presenta el cierre del balance al equipo.

Tabla 6. Balance de materia a la columna quench T-301.

Compuesto	Corrientes (kg/h)			
	11	12	13	14
Propileno	51,48	-	0,01	51,47
Inerte (Helio)	620,40	-	-	620,40
Acroleína	1.652,88	-	112,83	1.540,05
Ácido acrílico	241,30	-	232,37	8,93
Ácido acético	12,96	-	12,56	0,40
Agua	930,63	5.000,00	5.003,80	926,83
Dióxido de carbono	708,50	-	0,15	708,35
Monóxido de carbono	76,45	-	-	76,45
Oxígeno	368,34	-	-	368,34
Nitrógeno	7.753,79	-	0,04	7.753,75
Acetaldehído	20,11	-	6,42	13,69
Total	12.436,84	5.000,00	5.368,18	12.068,66

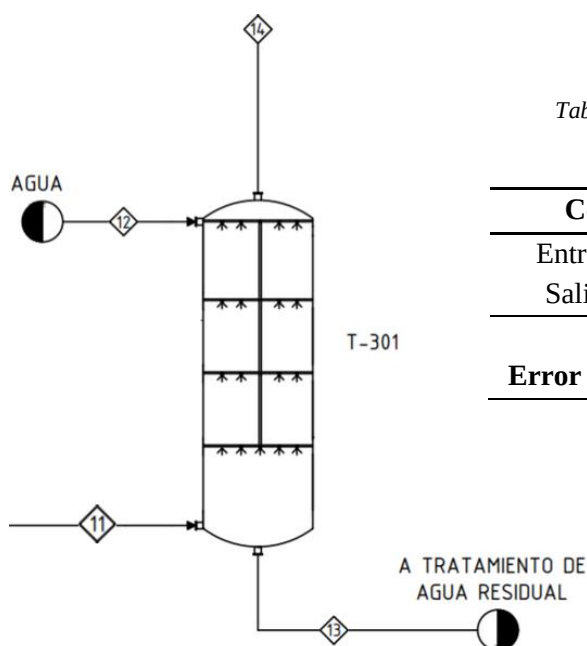


Figura 3. Columna quench T-301.

Tabla 7. Cierre del balance de materia a la columna quench T-301.

Corrientes	Flujo másico (kg/h)
Entrada (11, 12)	17.436,84
Salida (13, 14)	17.436,84
Cierre	0,00
Error de cierre (%)	0,00

1.3.3. Columna de absorción T-302

La columna de absorción T-302 busca absorber la acroleína formada en el reactor R-201 en un caudal de agua para su continuación en el proceso productivo. La corriente gaseosa de entrada a la columna está formada por la materia prima que no reaccionó en el reactor, el gas inerte utilizado, los productos formados en el reactor y las trazas de ácidos que no fueron eliminadas en la columna quench T-301. En el caso de la corriente de entrada líquida, estará compuesta de agua a 10 °C.

Se espera una recuperación del 88,82% de acroleína, es decir se absorbe un 88,82% de acroleína en el agua. Realizando un balance de materia por componente tomando en cuenta las corrientes de entrada y sus composiciones para obtener las corrientes de salida. A continuación, en la Tabla 8 y en la Tabla 9, se muestran los resultados del balance de materia a la columna de absorción T-302 y el cierre del balance, respectivamente.

Tabla 8. Balance de materia a la columna de absorción T-302.

Compuesto	Corrientes (kg/h)			
	15	16	17	18
Propileno	51,47	-	51,47	-
Inerte (Helio)	620,40	-	620,40	-
Acroleína	1.540,05	-	172,21	1.367,84
Ácido acrílico	8,93	-	-	8,93
Ácido acético	0,40	-	-	0,40
Agua	926,83	38.732,47	103,18	39.556,12
Dióxido de carbono	708,35	-	707,03	1,32
Monóxido de carbono	76,45	-	76,45	-
Oxígeno	368,34	-	368,34	-
Nitrógeno	7.753,75	-	7.753,75	-
Acetaldehído	13,69	-	-	13,69
Total	12.068,66	38.732,47	9.852,83	40.948,30

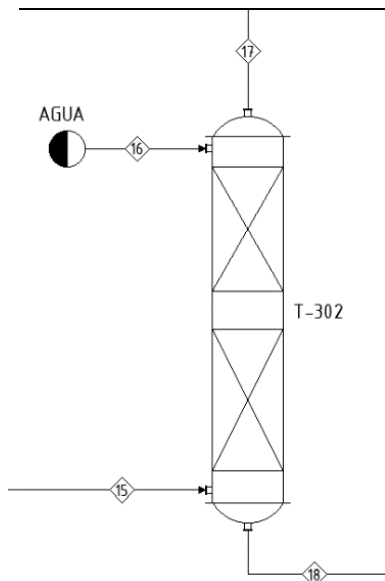


Tabla 9. Cierre del balance de materia a la columna de absorción T-302.

Corrientes	Flujo másico (kg/h)
Entrada (15, 16)	50.801,13
Salida (17, 18)	50.801,13
Cierre	0,00
Error de cierre (%)	0,00

Figura 4. Columna de absorción T-302.

1.3.4. Columna de desorción T-303

La columna de desorción tiene como objetivo eliminar la totalidad de las trazas de ácidos restantes en la corriente de proceso, desorbiendo la acroleína en el vapor de agua que entra a la columna por la corriente 20. Con ellos, también se elimina una cantidad importante de agua y de acetaldehído. Luego de simular el funcionamiento del equipo en el simulador de procesos *Aspen Hysys*, se han fijado las eliminaciones de agua y acetaldehído en un 97,96% y 33,31%, respectivamente.

Tabla 10. Balance de materia a la columna de desorción T-303.

Compuesto	Corrientes (kg/h)			
	19	20	21	22
Propileno	-	-	-	-
Inerte (Helio)	-	-	-	-
Acroleína	1.367,84	-	22,11	1.345,73
Ácido acrílico	8,93	-	8,93	-
Ácido acético	0,40	-	0,40	-
Agua	39.556,12	8.025,00	46.608,94	972,18
Dióxido de carbono	1,32	-	-	1,32
Monóxido de carbono	-	-	-	-
Oxígeno	-	-	-	-
Nitrógeno	-	-	-	-
Acetaldehído	13,69	-	4,56	9,13
Total	40.948,30	8.025,00	46.644,94	2.328,36

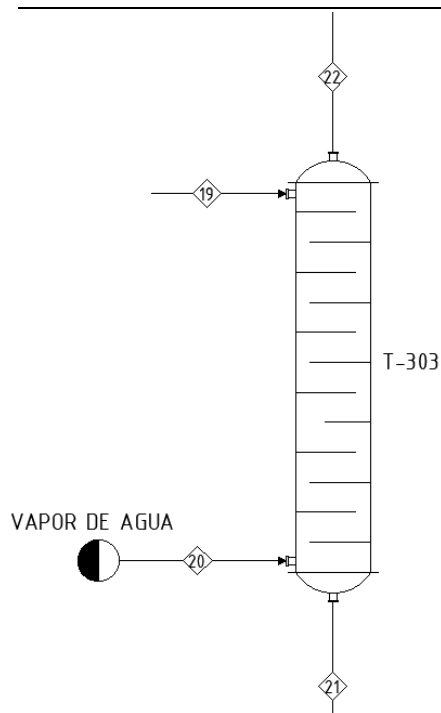


Tabla 11. Cierre del balance de materia a la columna de desorción T-303.

Corrientes	Flujo másico (kg/h)
Entrada (19, 20)	48.973,30
Salida (21, 22)	48.973,30
Cierre	0,00
Error de cierre (%)	0,00

Figura 5. Columna de desorción T-303.

1.3.5. Columna de destilación T-304

La columna de destilación T-304 corresponde al último equipo de la planta de producción del presente proyecto. La corriente de alimentación que ingresa a la columna tiene cuatro componentes. Los cuales, ordenados según su volatilidad, de mayor a menor, son los siguientes: dióxido de carbono, acetaldehído, acroleína y agua. Se establece que el compuesto clave ligero es la acroleína, el compuesto clave pesado es el agua (debido a que es el componente con volatilidad más baja), y el dióxido de carbono y el acetaldehído corresponden a los compuestos ligeros no claves.

El objetivo de esta columna de destilación es enriquecer la corriente de producto en acroleína, de manera que se alcance la composición requerida para su venta. Para ello, se ha realizado el balance

de materia de modo que se consiga una composición en peso en la corriente de producto del 95,83% de acroleína, 3,42% de agua, 0,65% de acetaldehído y 0,09% de dióxido de carbono. Siguiendo esta línea, por cabezas de la columna saldrá la totalidad de los compuestos ligeros no claves, estando como impurezas del producto, en cantidades inferiores a las máximas permitidas.

A continuación, en la Tabla 12 y en la Tabla 13, se muestran los resultados del balance de materia a la columna de destilación T-304 y el cierre del balance, respectivamente.

Tabla 12. Balance de materia a la columna de destilación T-304.

Compuesto	Corrientes (kg/h)		
	24	25	26
Propileno	-	-	-
Inerte (Helio)	-	-	-
Acroleína	1.345,73	1.337,07	8,66
Ácido acrílico	-	-	-
Ácido acético	-	-	-
Agua	972,18	47,74	924,44
Dióxido de carbono	1,32	1,32	-
Monóxido de carbono	-	-	-
Oxígeno	-	-	-
Nitrógeno	-	-	-
Acetaldehído	9,13	9,13	-
Total	2.328,36	1.395,26	933,10

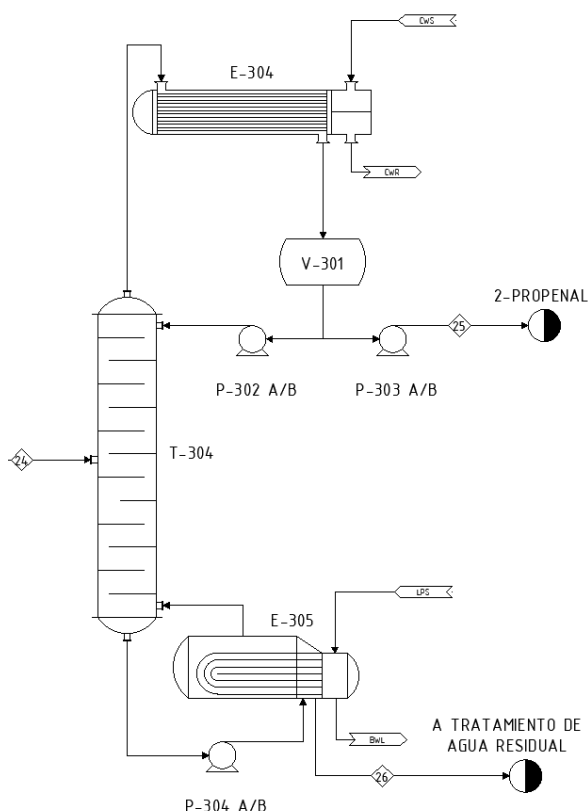


Tabla 13. Cierre del balance de materia a la columna de destilación T-304.

Corrientes	Flujo másico (kg/h)
Entrada (24)	2.328,36
Salida (25, 26)	2.328,36
Cierre	0,00
Error de cierre (%)	0,00

Figura 6. Columna de destilación T-304.

Por otro lado, es importante comentar que este equipo es objeto de diseño en el presente proyecto. Sin embargo, la columna se diseña para el sistema binario acroleína-agua, asumiendo el acetaldehído y el dióxido de carbono, de la corriente de alimentación a la columna, como impurezas. Esta consideración se ha hecho por dos principales razones: debido a la pequeña cantidad de estos componentes en la corriente de alimentación en comparación a la acroleína y el agua, y porque el sistema presenta desviaciones de la idealidad en fase líquida, no obstante, solo se consiguieron los datos para el cálculo de los coeficientes de actividad para el sistema binario acroleína-agua. Es por ello que, en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte D: Columna de destilación T-304*, se explica el balance de materia para el sistema binario, fijando porcentajes de recuperación según lo obtenido en el simulador de procesos *Aspen Hysys*.

2. Balances de energía

2.1. Introducción

La energía, al contrario de la materia, si puede ser generada o consumida en un proceso químico en otros equipos además del reactor. La energía se puede presentar en un proceso de diversas formas como son: energía mecánica, térmica y eléctrica. Cuando se diseñan procesos se deben realizar balances de energía para determinar los requisitos energéticos del proceso: el calentamiento, enfriamiento y energía eléctrica requerida. En el funcionamiento de la planta, su balance energético muestra el patrón de uso de energía (1).

La ecuación de conservación de energía es homóloga a la Ecuación [1] mostrada en el balance de materia, pero tomando todos los términos referidos a la energía. Considerando que el proceso se encuentra en estado estacionario, la ecuación de conservación de energía se expresa incluyendo los diferentes tipos de energía mencionados, esta se observa en la Ecuación [5] (1).

$$U_1 + P_1 \cdot v_1 + \frac{u_1^2}{2} + z_1 \cdot g + Q = U_2 + P_2 \cdot v_2 + \frac{u_2^2}{2} + z_2 \cdot g + W \quad [5]$$

Donde:

- 1 y 2 son los puntos de entrada y salida, respectivamente.
- U_i es la energía interna, en kW.
- P_i es la presión, en N/m².
- v_i es el volumen por unidad de masa, en m³/kg.
- u_i es la velocidad, en m/s.
- z_i es la altura, en m.
- g es la aceleración gravitacional, en m/s².
- Q es calor intercambiado el cual es positivo cuando entra al sistema y negativo cuando sale de este, en kW.
- W es el término de trabajo el cual es positivo cuando el sistema cede energía a los alrededores y negativo en caso contrario, en kW.

En el caso de los procesos químicos, los términos de energía cinética, energía potencial y trabajo suelen ser pequeños en comparación con el término de energía calorífica, por lo que pueden ser omitidos. Dicho esto, se pueden relacionar directamente la diferencia de entalpías entre la entrada y salida del sistema, esta relación se expresa en la Ecuación [6] (1).

$$Q = h_2 \cdot n_2 - h_1 \cdot n_1 \quad [6]$$

Para el cálculo de la entalpía específica de la corriente líquida se utiliza la Ecuación [7].

$$h_i = C_{p,i} \cdot (T_i - T_{ref}) \quad [7]$$

Donde:

- n es el caudal molar de salida y entrada al sistema respectivamente, en kmol/h.
- h_i es la entalpía específica de una corriente líquida, en kJ/mol.
- $C_{p,i}$ es el calor específico de la corriente, en kJ/(kmol·°C).
- T_i es la temperatura de la corriente, en °C.
- T_{ref} es la temperatura de referencia, que se tomará como 0 °C.

En el caso de la entalpía específica de corrientes en fase vapor, H_i , se calcula con la Ecuación [8].

$$H_i = h_i + \lambda_i \quad [8]$$

Donde λ_i es el calor latente de evaporación del compuesto puro i , en kJ/kmol.

A continuación, se muestran los balances de energía para las unidades del proceso productivo del presente proyecto, partiendo de las ecuaciones y explicación dadas en la introducción.

2.2. Válvulas

2.2.1. Válvula VLV-101

El objetivo de esta válvula es acondicionar el propileno almacenado para su entrada al proceso. Particularmente, es una válvula de expansión encargada de disminuir la presión de 15,00 a 2,05 bar. Asimismo, el propileno se almacena líquido y la disminución de su presión da lugar a un cambio de fase.

Este cambio de fase implica un cambio de temperatura del fluido, y aunque las demás válvulas tienen un carácter isoterma, a continuación, se mostrará el balance de energía de esta válvula VLV-101 verificando el cambio de temperatura.

Para ello, se comprobará que la entalpía neta del proceso debe ser cero. Primero, dado que la entalpía es una variable de estado, se separa el proceso en dos fases. En la primera fase se tendrá en cuenta una expansión isobárica pasando del estado inicial A (P_1 y T_1) al estado B (P_1 y T_2). Posteriormente se tendrá en cuenta la segunda fase isotérmica donde se va desde el estado B (P_1 y T_2) hasta el estado final C (P_2 y T_2) (2).

Por lo tanto, el objetivo es verificar que la suma de las entalpías de ambas fases son cero como se muestra en la Ecuación [9].

$$\Delta H_{AB} + \Delta H_{BC} = 0 \quad [9]$$

Esta también puede ser reescrita como se muestra en la Ecuación [10].

$$\Delta H_{AB} = -\Delta H_{BC} \quad [10]$$

Para la entalpía de la fase uno, no hay cambios de fase y se puede calcular como se muestra en la Ecuación [11].

$$\Delta H_{AB} = \int_{T_1}^{T_2} c_{pL} \cdot dT = \overline{c_{pL}} \cdot \Delta T \quad [11]$$

Siendo $\overline{c_{pL}}$ el calor específico promedio del líquido a las temperaturas de la fase.

Por otro lado, para la fase dos, donde hay un cambio de fase se calcula la entalpía empleando la fórmula general, mostrada en la Ecuación [12].

$$H = U + P \cdot V \quad [12]$$

Donde H es la entalpía, U es la energía interna, P es la presión y V el volumen. Por lo que, aplicándolo al sistema se puede obtener la Ecuación [13].

$$\Delta H_{BC} = U_{P2} - U_{P1} + (PV)_{P2} - (PV)_{P1} \quad [13]$$

Al tratarse de un líquido, este es incompresible en el proceso isotérmico el cambio en la energía interna es muy pequeño comparado como el término $\Delta(PV)$, por lo que puede ser despreciado. Sin embargo, al haber un cambio de fase la Ecuación [13] es modificada para obtener la Ecuación [14].

$$\Delta H_{BC} = (P_1 - P_2) \cdot \bar{V}_L - \psi \cdot \lambda \quad [14]$$

Donde:

- $\bar{V}_L$ es la media del volumen específico del fluido, en cm^3/kmol .
- ψ es la fracción molar del vapor formado.
- λ es el calor latente de vaporización, en kJ/kmol .

Los valores de los parámetros requeridos de las corrientes de entrada y salida fueron obtenidos del simulador *Aspen Hysys* y se muestran en la Tabla 14.

Tabla 14. Parámetros para la válvula VLV-101.

Parámetro	Valor
T_1 (K)	20,00
T_2 (K)	-30,86
P_1 (bar)	15,00
P_2 (bar)	2,05
$\overline{c_{pL}}$ [$\text{kJ}/(\text{kmol} \cdot \text{K})$]	99,66
$\bar{V}_L$ (cm^3/kmol)	71.555,40
ψ	0,28
λ (kJ/kmol)	14.998,38

Por lo tanto, empleando la Ecuación [11]:

$$\Delta H_{AB} = 99,66 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol K}} \cdot 50,86 \text{ K} = 5.068,71 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}$$

Mientras que para la fase dos usando la Ecuación [14]:

$$\Delta H_{BC} = 12,95 \text{ bar} \cdot \frac{1 \text{ kJ}}{10^2 \text{ bar} \cdot \text{cm}^3} \cdot 71.555,4 \frac{\text{cm}^3}{\text{kmol}} - 0,28 \cdot 14.998,38 = 5.066,88 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}}$$

Como se puede observar $\Delta H_{AB} = \Delta H_{BC}$ con tan solo un error de 0,04% lo cual puede deberse al término de energía interna despreciado previamente.

2.2.2. Válvula VLV-301

La válvula VLV-301 está presente a la salida de la columna de absorción T-302. Su objetivo es disminuir levemente la presión de la corriente antes de que ingrese a la columna de desorción T-303. La disminución será de 1,57 hasta 1,09 bar, presión requerida para obtener mejores resultados en el proceso.

Estos equipos de estrangulamiento no realizan ningún trabajo mecánico. Por otro lado, las energías potencial y cinética pueden ser despreciables en ellas debido a su reducido tamaño. Al igual que la transferencia de calor, que normalmente no es perceptible (3).

Por consiguiente, los balances de energía son reducidos a procesos isoentálpicos como se muestra en la Ecuación [15].

$$h_{entrada} = h_{salida} \quad [15]$$

La corriente se encuentra en fase vapor y no hay ningún cambio de fase por lo que, para comprobar que la válvula cumple con esta ecuación, se obtendrán los calores específicos utilizando el simulador *Aspen Hysys* y las temperaturas de entrada y salida de la válvula para calcular las entalpías. Los resultados se muestran en la Tabla 15.

Tabla 15. Balance de energía a la válvula VLV-301.

Parámetro	Valor
$Cp_{entrada}$ [kJ/(kmol·K)]	75,95
Cp_{salida} [kJ/(kmol·K)]	75,95
$T_{entrada}$ (°C)	16,03
T_{salida} (°C)	16,03
$h_{entrada}$ (kJ/kmol)	1.217,48
h_{salida} (kJ/kmol)	1.217,48

Como se puede comprobar que, al disminuir la presión de 1,57 a 1,09 bar, no se ve afectada la temperatura y se cumple el balance de energía.

2.3. Compresor K-101

El compresor K-101 se emplea para adecuar la presión de la corriente de aire a la entrada del proceso, previamente a su utilización en el reactor R-201. Corresponde a un compresor reciprocante, mediante el cual se alcanza la presión diferencial requerida, impulsando la corriente de aire desde presión atmosférica hasta 2,15 bar. En el *Anexo II: Cálculos justificativos. Parte E: Dimensionamiento básico de equipos*, se explica la selección de este tipo de compresor, así como también los cálculos relacionados al aporte trabajo necesario para su operación.

Al aumentar la presión de la corriente de aire, también aumentará su temperatura. Aplicando un balance de energía, es posible conocer la temperatura de la corriente comprimida, para lo cual se hará uso de la Ecuación [16], considerando que la compresión es isentrópica (4).

$$T_2 = T_1 \cdot \left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{\frac{k-1}{k}} \quad [16]$$

Donde:

- T_1 y T_2 corresponden a la temperatura del gas a la entrada y salida del compresor, respectivamente, en K.
- P_1 y P_2 corresponden a la presión del gas a la entrada y salida del compresor, respectivamente, en bar.
- k es la relación entre capacidades caloríficas, $k = \frac{C_p}{C_v}$.

En la Tabla 16 se muestran los datos empleados para el cálculo de la temperatura de salida del compresor, y el resultado obtenido.

Tabla 16. Balance de energía en el compresor K-101.

Parámetro	Valor
k	1,41
T_1 (K)	298,15
P_1 (bar)	1,01
P_2 (bar)	2,15
T_2 (K)	365,73

2.4. Intercambiadores de calor

En la planta se ubican diversos intercambiadores, su función es retirar o aportar calor a las corrientes que lo precisen. Todos ellos han sido dimensionados detalladamente en el *Anexo II: Cálculos justificativos. Parte E: Dimensionamiento básico de equipos*. Asimismo, aplicando el balance de energía a cada uno se puede conocer el aumento o la disminución de la energía calorífica en la corriente. Los resultados obtenidos para estos equipos al emplear la Ecuación [17] se mostrarán a continuación.

$$Q = m_{fluido} \cdot C_{pfluido} \cdot \Delta T \quad [17]$$

Siendo:

- Q es el calor intercambiado, en kW. Este parámetro tendrá un signo positivo cuando el calor sea aportado, usando el signo negativo para referirse al calor retirado.
- m_{fluido} es el caudal másico de la corriente que atraviesa el equipo, en kg/s.
- $C_{pfluido}$ es el calor específico medio, en kJ/(kg·°C).
- ΔT es la diferencia de temperaturas en la corriente, en °C.

Por otra parte, para los condensadores con cambio de fase se calculará el calor transmitido mediante la Ecuación [18].

$$Q = n \cdot (H_v - h_c) \quad [18]$$

Siendo:

- n el flujo molar de la corriente de proceso la cual cambia de fase, en kmol/s.
- H_v es la entalpía de la fase vapor, en kJ/kmol.
- H_c es la entalpía del condensado, en kJ/kmol.

2.4.1. Intercambiador de calor E-101

Este intercambiador es empleado en la sección de acondicionamiento de materias primas con el objetivo de calentar la corriente 7. Los resultados se muestran en la Tabla 17.

Tabla 17. Balance de energía en el intercambiador de calor E-101.

Parámetro	Valor
m_{fluido} (kg/s)	3,46
Cp_{fluido} [kJ/(kg·°C)]	1,35
T_1 (°C)	28,44
T_2 (°C)	189,22
Q (kW)	748,06

2.4.2. Intercambiador de calor E-102

Este segundo intercambiador se emplea para calentar la corriente 8, que sale del intercambiador E-101, hasta la temperatura requerida por el reactor R-201. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 18.

Tabla 18. Balance de energía en el intercambiador de calor E-102.

Parámetro	Valor
m_{fluido} (kg/s)	3,46
Cp_{fluido} [kJ/(kg·°C)]	1,45
T_1 (°C)	189,22
T_2 (°C)	350,00
Q (kW)	804,87

2.4.3. Intercambiador de calor E-301

El objetivo de este intercambiador es enfriar la corriente de salida del reactor R-201 para su entrada a la columna *quench* T-301. Los resultados del balance se muestran en la Tabla 19.

Tabla 19. Balance de energía en el intercambiador de calor E-301.

Parámetro	Valor
m_{fluido} (kg/s)	3,45
Cp_{fluido} [kJ/(kg·°C)]	1,43
T_1 (°C)	120,00
T_2 (°C)	350,00
Q (kW)	1.133,41

2.4.4. Intercambiador de calor E-302

El intercambiador E-302 está situado en la salida gaseosa de la columna *quench* T-301, para adecuar su temperatura a la requerida para optimizar la operación en el siguiente equipo, la columna de absorción T-302. Los resultados del balance se muestran en la Tabla 20.

Tabla 20. Balance de energía en el intercambiador de calor E-302.

Parámetro	Valor
m_{fluido} (kg/s)	3,35
Cp_{fluido} [kJ/(kg·°C)]	1,34
T_1 (°C)	48,09
T_2 (°C)	20,00
Q (kW)	125,92

2.4.5. Intercambiador de calor E-303

El E-303 se trata de un condensador cuya función es condensar la corriente de vapor que sale de la columna de desorción T-303 hasta líquido saturado, disminuyendo además su temperatura, para la entrada de la columna de destilación. Por consiguiente, debido al cambio de fase se emplea la Ecuación [18].

Asimismo, para el cálculo de las entalpías se emplearon las Ecuaciones [7] y [8]. Se muestra en la Tabla 21 los resultados del balance de energía de este equipo.

Tabla 21. Balance de energía en el intercambiador de calor E-303.

Parámetro	Valor
m_{fluido} (kg/s)	0,65
Peso molecular (kg/kmol)	29,77
h_c (kJ/kmol)	6.155,18
H_v (kJ/kmol)	45.217,31
T_1 (°C)	90,92
T_2 (°C)	53,30
Q (kW)	848,58

2.5. Reactor R-201

Como se ha mencionado anteriormente, esta unidad es uno de los equipos objeto de estudio del presente proyecto. Por consiguiente, el balance de energía se explica detalladamente en el apartado 10. *Balance de energía del Anexo II: Cálculos justificativos. Parte B: Reactor R-201.* En este apartado fueron calculadas las entalpías de reacción de las diversas reacciones presentes, siendo posteriormente posible calcular el calor generado.

Se comprobó, por lo tanto, que se trata de reacciones exotérmicas, pues liberan calor, y se determinó el caudal de sales fundidas requerido para la operación isotérmica del reactor. El calor total generado, así como las temperaturas de los fluidos y el caudal de sales requerido se muestran en la Tabla 22.

Tabla 22. Resultados obtenidos del balance de energía del reactor R-201.

Parámetro	Valor
Q (kW)	6.290,04
$T_{entrada}$ fluido de proceso (°C)	350,00
T_{salida} fluido de proceso (°C)	350,00
$T_{entrada}$ utilidad (°C)	260,00
T_{salida} utilidad (°C)	290,00
$m_{utilidad}$ (kg/s)	134,40

2.6. Columna quench T-301

El quench T-301 es la torre encargada de separar los ácidos formados en el reactor R-201 de la corriente de acroleína, esto se logra poniendo en contracorriente el flujo de gas proveniente del reactor R-201, corriente 11, con un flujo de agua líquida, corriente 12.

El balance de energía empleado es el mostrado en la Ecuación [19], el cual corresponde a un balance de energía en estado estacionario que no contempla términos de generación ni acumulación.

$$Q_{entrada} = Q_{salida}$$

$$n_{11} \cdot H_{11} + n_{12} \cdot h_{12} = n_{13} \cdot h_{13} + n_{14} \cdot H_{14} \quad [19]$$

En la Tabla 23 se muestran los datos de estas corrientes, con los que se realiza el balance de energía. Cabe resaltar que los datos de C_p y de λ fueron obtenidos del simulador *Aspen Hysys*. Siguientemente, en la Tabla 24 se muestra un resumen de los valores de entalpías de cada una de las corrientes, las cuales se han calculado tal como se expone en las Ecuaciones [7] y [8] y también, los resultados obtenidos del balance de energía del equipo.

Tabla 23. Datos de las corrientes de entrada y salida de la columna quench T-301.

Corriente	Caudal molar (kmol/h)	Temperatura (°C)	C_p [kJ/(kmol·°C)]	λ (kJ/kmol)
11	548,52	120,00	31,14	22.064,63
12	277,54	5,00	74,16	-
13	283,35	120,00	78,84	-
14	542,70	48,09	29,85	21.750,75

Tabla 24. Balance de energía de la columna quench T-301.

Parámetro	Valor
H_{11} (kJ/kmol)	25.801,43
h_{12} (kJ/kmol)	370,80
h_{13} (kJ/kmol)	5.901,96
H_{14} (kJ/kmol)	23.186,24
$Q_{entrada}$ (kW)	3.959,86
Q_{salida} (kW)	3.959,86
Cierre	0,00
Error de cierre, %	0,00

2.7. Columna de absorción T-302

Como fue mencionado anteriormente, esta columna tiene por objetivo absorber la acroleína formada en el reactor R-201 en una corriente de agua. Para realizar el balance de energía al equipo se utiliza la Ecuación [20] que corresponde con un balance de energía en estado estacionario que no presenta ni generación ni acumulación en el sistema.

$$Q_{entrada} = Q_{salida}$$

$$n_{15} \cdot h_{15} + n_{16} \cdot H_{16} = n_{17} \cdot h_{17} + n_{18} \cdot H_{18} \quad [20]$$

En la Tabla 25 se muestran los datos de estas corrientes, con los que se realiza el balance de energía. Cabe destacar que los datos de C_p y de λ fueron obtenidos del simulador *Aspen Hysys*. Por otra parte, en la Tabla 26 se muestran los valores de las entalpías de las corrientes, las cuales

se han calculado tal como se expone en las Ecuaciones [7] y [8], y los resultados obtenidos del balance de energía a la columna de absorción T-302.

Tabla 25. Datos de las corrientes de entrada y salida de la columna de absorción T-302.

Corriente	Caudal molar (kmol/h)	Temperatura (°C)	C_p [kJ/(kmol·°C)]	λ (kJ/kmol)
15	542,70	20,00	30,14	20.067,93
16	2.150,00	10,00	70,00	-
17	472,11	15,47	29,97	19.996,56
18	2.220,59	17,43	79,15	-

Tabla 26. Balance de energía en la columna de absorción T-302.

Parámetro	Valor
H_{15} (kJ/kmol)	20.670,73
h_{16} (kJ/kmol)	700,00
H_{17} (kJ/kmol)	20.460,20
h_{18} (kJ/kmol)	1.379,58
$Q_{entrada}$ (kW)	3.534,18
Q_{salida} (kW)	3.534,18
Cierre	0,00
Error de cierre, %	0,00

2.8. Columna de desorción T-303

En la columna de desorción T-303 se lleva a cabo la desorción de la acroleína, desde la corriente líquida que sale de la columna de absorción T-302 hasta el vapor de agua empleado para esta operación.

Para aplicar un balance de energía en esta columna, se utiliza la Ecuación [21], mostrada a continuación. Como se puede observar, corresponde a un balance de energía en estado estacionario que no contempla términos de generación ni acumulación.

$$Q_{entrada} = Q_{salida}$$

$$n_{19} \cdot h_{19} + n_{20} \cdot H_{20} = n_{21} \cdot h_{21} + n_{22} \cdot H_{22} \quad [21]$$

En la Tabla 27 se muestran los datos de estas corrientes, con los que se realiza el balance de energía. Cabe resaltar que los datos de C_p y de λ fueron obtenidos del simulador *Aspen Hysys*. Por otro lado, en la Tabla 28 se resumen los valores de las entalpías de las corrientes, las cuales se han calculado tal como se expone en las Ecuaciones [7] y [8], y los resultados obtenidos del balance de energía a la columna de desorción T-303.

Tabla 27. Datos de las corrientes de entrada y salida de la columna de desorción T-303.

Corriente	Caudal molar (kmol/h)	Temperatura (°C)	C_p [kJ/(kmol·°C)]	λ (kJ/kmol)
19	2220,59	17,43	79,58	-
20	445,46	110,00	38,32	40.438,87
21	2587,84	99,25	75,67	-
22	78,21	90,92	62,04	39.576,66

Tabla 28. Balance de energía en la columna de desorción T-303.

Parámetro	Valor
h_{19} (kJ/kmol)	1.387,08
H_{20} (kJ/kmol)	44.654,07
h_{21} (kJ/kmol)	7.510,25
H_{22} (kJ/kmol)	45.217,31
$Q_{entrada}$ (kW)	6.381,04
Q_{salida} (kW)	6.381,04
Cierre	0,00
Error de cierre, %	0,00

2.9. Columna de destilación T-304

Como fue comentado anteriormente, en esta columna se enriquece la corriente de producto en acroleína, compuesto que corresponde al producto principal del proceso. Para aplicar un balance de energía en esta columna, primero se ha realizado un balance de energía en el condensador total, y posteriormente, uno global a la columna. Para lo cual, se hace uso de las Ecuaciones mostradas a continuación:

$$V_1 \cdot H_1 + Q_C = D \cdot h_D + L_o \cdot h_o \quad [22]$$

$$F \cdot h_F + Q_C + Q_R = B \cdot h_B + D \cdot h_D \quad [23]$$

Donde:

- H_1, h_D, h_o, h_F, h_B son las entalpías específicas de la corriente de vapor V_1 , del destilado D , del reflujo L_o , de la alimentación F , y de colas B , en kJ/kmol.
- Q_C y Q_R corresponden al calor retirado en el condensador total E-304 y aportado en la caldera parcial E-305, respectivamente, en kW.

Los valores de cada uno de los parámetros mencionados se detallan en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte D: Columna de destilación T-304*, obteniendo los resultados del balance de energía resumidos en la Tabla 29.

Tabla 29. Balance de energía de la columna de destilación T-304.

Parámetro	Resultado (kW)
Q_C	-345,91
Q_R	362,91

2.10. Resumen

En la Tabla 30 mostrada a continuación se resumen los requerimientos de utilidades en la planta. Además, se ha considerado la estimación del consumo eléctrico de la planta, mostrada en el *Anexo III: Análisis de viabilidad económica*.

Tabla 30. Resumen de utilidades en la planta de producción del presente proyecto.

Utilidad	Requerimiento
Agua de refrigeración	70,67 kg/s
Vapor de agua a baja presión	15,75 kg/s
Sales fundidas	184,17 kg/s

Asimismo, en la Tabla 31 se muestran las cantidades compradas de corrientes de proceso.

Tabla 31. Resumen de corrientes de proceso compradas en el presente proyecto.

Corriente	Requerimiento
Agua (corrientes 12 y 16)	43.732,47 kg/h
Vapor de agua (corriente 20)	8.025,00 kg/h

3. Bibliografía

1. TOWLER, G. & SINNOTT, R. *Chemical Engineering Design*. Elsevier, Inc., 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1.
2. HLAVINKA, M. Temperature Increases Across JT Valves and Adiabatic Flashes. *Bryan Research & Engineering, Inc.* [En línea] [Consultado abril de 2021]. Disponible en: <https://www.bre.com/PDF/Temperature-Increases-across-JT-Valves-and-Adiabatic-Flashes.pdf>.
3. ÇENGEL, Y. & CHAJAR, A. *Transferencia de calor y masa*. 4º ed. México: MrGraw Hill, 2011. ISBN: 978-607-15-0540-8.
4. WALAS, S. *Chemical Process Equipment: Selection and Design*. Boston: Butterworth-Heinemann, 1990. ISBN: 0-7506-9385-1.

ANEXO II: CÁLCULOS JUSTIFICATIVOS

ÍNDICE

Parte A: Diseño Mecánico

Parte B: Reactor R-201

Parte C: Columna de absorción T-302

Parte D: Columna de destilación T-304

Parte E: Dimensionamiento básico de equipos

PARTE A:

DISEÑO MECÁNICO

ÍNDICE

1.	Introducción	1
2.	Presión de diseño	1
3.	Temperatura de diseño	1
4.	Selección del material de construcción	1
5.	Mínimo espesor de carcasa requerido	5
6.	Cabezales.....	6
7.	Aislamiento térmico.....	8
8.	Aberturas y conexiones	11
9.	Cargas.....	12
9.1.	Cargas por peso	12
9.1.1.	Reactor R-201.....	13
9.1.2.	Columna de destilación T-304.....	14
9.2.	Cargas por viento	14
9.3.	Cargas por actividad sísmica	15
10.	Esfuerzos	15
10.1.	Esfuerzos primarios	16
10.2.	Esfuerzos principales	17
10.3.	Esfuerzo máximo permisible	17
10.4.	Esfuerzos de compresión y estabilidad elástica	17
11.	Soportes.....	17
12.	Válvulas de alivio.....	19
13.	Bibliografía	22

1. Introducción

En la presente parte del *Anexo II: Cálculos justificativos*, se resumen todos los aspectos a tomar en cuenta para llevar a cabo los diseños mecánicos del reactor R-201, la columna de absorción T-302 y la columna de destilación T-304. Estos equipos serán considerados como recipientes a presión para estimar sus propiedades mecánicas, por lo que se seguirá lo expuesto en el código de diseño ASME *Boiler and Pressure Vessel Code*, Sección VIII, División 1.

2. Presión de diseño

La presión es una de las consideraciones generales que se debe tener en cuenta en los diseños de recipientes a presión. Concretamente, el recipiente debe ser diseñado de forma que aguante la máxima presión a la que pueda ser sometido en el proceso. Existen dos criterios para determinar la presión de diseño de recipientes bajo presión interna, siendo el primero seleccionar dicha presión como la presión a la que se configura el dispositivo de alivio del equipo. Esta presión es entre un 5 y 10% superior a la presión de operación del recipiente, para asegurar un óptimo desempeño durante alteraciones en el proceso. Sin embargo, es recomendado por el código API RP 520 seleccionar una presión de diseño un 10% superior a la presión de operación (1).

Por otro lado, la presión de diseño puede ser obtenida sumándole 25 psi a la presión máxima de operación. Para mantener un mayor margen de seguridad se calculará la presión de diseño con ambos criterios, usando las Ecuaciones [1] y [2], y se seleccionará el valor más elevado (2).

$$P_{\text{diseño}} = P_{\text{máx. operación}} \cdot 1,1 \quad [1]$$

$$P_{\text{diseño}} = P_{\text{máx. operación}} + 25 \text{ psi} \quad [2]$$

3. Temperatura de diseño

Del mismo modo que la presión, los equipos debe ser diseñados para resistir la máxima temperatura que se pueda alcanzar en ellos. Cabe destacar, que la temperatura afecta a la tensión máxima de diseño dado que su valor disminuye con el aumento de la temperatura. Por lo tanto, se debe tomar el valor de la tensión máxima evaluado a la temperatura de diseño. Siguiendo el código ASME BPV Sección VIII Div.1, por razones de seguridad, la temperatura de diseño es la suma de la temperatura máxima de operación y una tolerancia. Por lo que, empleando una tolerancia de 50 °F, se establece la temperatura de diseño empleando la Ecuación [3] (1).

$$T_{\text{diseño}} = T_{\text{máx. operación}} + 50 \text{ °F} \quad [3]$$

4. Selección del material de construcción

La selección del material de construcción siempre ha resultado muy relevante a lo largo de historia. De hecho, las edades en las que ha vivido el hombre han sido nombradas por los materiales de la época. Sin embargo, hoy en día hay una inmensa variedad de materiales disponibles, siendo el número de materiales de ingeniería de decenas de miles (como estimación conservadora). No obstante, cada material posee distintas propiedades y su selección dependerá de la función para la que se utilice este, y de las condiciones de operación (3).

Por consiguiente, es fundamental la correcta selección del material para los equipos y las instalaciones del presente proyecto. De modo que, el material seleccionado garantice una construcción óptima en cuanto a seguridad, calidad y economía. Asimismo, ha de tenerse en

cuenta la corrosión, y la compatibilidad química entre el material de construcción y los compuestos que se encuentren en contacto con este. Para ello, se mostrará a continuación la Metodología Ashby, la cual se empleará para la adecuada selección del material (3).

Para emplear la Metodología Ashby ha de responderse cuatro sencillas preguntas. Estas preguntas corresponden a la función, el objetivo, las limitaciones y las variables libres, y se muestran a continuación:

- 1) ¿Para qué se va a emplear el recipiente?
- 2) ¿Qué condiciones se deben cumplir? ¿Qué se quiere maximizar o minimizar?
- 3) ¿Cuáles son las restricciones del sistema?
- 4) ¿Cuáles son las variables de diseño que se pueden modificar?

Respondiendo estas preguntas se determina cuáles índices de material emplear, siendo los índices de material la función para optimizar los diseños, mediante criterios que toman en cuenta tanto las propiedades de los materiales, como su desempeño para aplicaciones específicas. En otras palabras, una vez seleccionado el índice de material solo se debe elegir el material que maximice (o minimice según el caso de estudio) su valor, dado que este material será el óptimo para la función de diseño establecida (3).

Para los recipientes a presión, por seguridad, son diseñados siempre según criterios de fallo. Entre los criterios, destacan dos: *leak-before-break* y *yield-before-break*. Este último corresponde a una deformación antes de romperse y suele emplearse para equipos pequeños. Por otro lado, *leak-before-break* se emplea cuando se desea que se vierta antes de que rompa, siendo utilizado para equipos grandes, este criterio ofrece un diseño más seguro dado que la fuga puede ser detectada con facilidad y la liberación de la presión sería gradual (3).

Asimismo, en caso del diseño de equipos con intercambio de calor las consideraciones cambian. Siendo fundamental seleccionar un material que puede soportar la temperatura máxima de operación, con buena conductividad térmica, alto límite elástico, y sea suficientemente dúctil para la elaboración de tubos (3). Se muestran en las siguientes Tablas los criterios según la Metodología Ashby para cada equipo a diseñar en el presente proyecto, de forma que sea posible posteriormente, según los índices, usar los gráficos desarrollados por Ashby para seleccionar el material.

Tabla 1. Criterios de la Metodología Ashby para la selección del material del reactor R-201.

Criterio	Carcasa del Reactor R-201	Tubos del Reactor R-201
Función	Asegurar que durante su funcionamiento se contenga la presión de forma segura.	Se emplean como reactor catalítico permitiendo la retirada del calor generado.
Objetivo	Garantizar la seguridad produciendo una fuga antes de la fractura del material.	Maximizar el flujo de calor por unidad de área, sin fallar bajo ΔP .
Limitaciones	Diámetro del equipo fijado por el diseño para contener el número de tubos, el catalizador y la cantidad de fluidos especificados. Temperatura de operación de 290 °C Limitación económica.	Espesor de la conducción fijado de forma que soporte la diferencia de presión externa e interna de los tubos. Temperatura de operación de 350°C Limitación económica.
Variable libre	El material de construcción.	El material de construcción.

Tabla 2. Criterios de la Metodología Ashby para la selección del material para la columna de absorción T-302.

Función	Asegurar su funcionamiento a presión de forma segura.
Objetivo	Maximizar la seguridad del equipo.
Limitaciones	Coste económico y radio del equipo.
Variable libre	Material de construcción a elegir.

Tabla 3. Criterios de la Metodología Ashby para la selección del material para la columna de destilación T-304.

Función	Al ser un recipiente a presión, su función será garantizar que se contenga la presión de manera segura.
Objetivo	Maximizar la seguridad del equipo durante su operación, utilizando el criterio verter antes de romper.
Limitaciones	El diámetro de la columna obtenido en el diseño hidráulico de la columna, y el coste económico.
Variable libre	Material de construcción a emplear.

Siguiendo los criterios mostrados en Tabla 1, Tabla 2 y Tabla 3, al ser los equipos a diseñar recipientes a presión, el objetivo coincide, seleccionando el criterio de fallo *leak-before-break*. Es importante recalcar que este criterio se selecciona en vez del *yield-before-break*, debido a que este último es menos práctico en recipientes de presión de gran tamaño, ya que requiere de exámenes radiográficos para detectar la grieta a tiempo (3).

Al emplear el criterio *leak-before-break* (verter antes de romper) se garantiza que, en caso de formación de una grieta, esta sea lo suficientemente grande como para penetrar el interior y el exterior del recipiente de forma estable, de manera que es mucho más fácil de detectar. Este criterio corresponde al índice de material M_1 , que se puede obtener a partir del espesor del equipo diseñado para no ceder a la presión de operación. Concretamente, si se cumple la expresión que se muestra en la Ecuación [4] el equipo operaría de forma segura (3).

$$P \leq \frac{4 \cdot C^2}{\pi \cdot R} \cdot \left(\frac{K_{1c}^2}{\sigma_f} \right) \quad [4]$$

Siendo:

- P la presión de diseño, N/m².
- C una constante, cuyo valor es cercano a la unidad.
- R el radio del recipiente a presión, en m.
- K_{1c} la tenacidad a la fractura por deformación plana, en MPa·m^{1/2}.
- σ_f el límite elástico, en MPa.

Por consiguiente, si se maximiza el término entre paréntesis de la Ecuación [4], se puede operar de forma segura a mayor presión. Es por ello, que el índice M_1 corresponde a estas propiedades, como se muestra en la Ecuación [5] (3).

$$M_1 = \frac{K_{1c}^2}{\sigma_f} \quad [5]$$

Por lo tanto, el procedimiento es ubicar un gráfico de Ashby que emplee este índice, mostrado en la Figura 1, y trazar una paralela a su línea guía, de forma que atravesase una zona de material. Los materiales que maximizan M_1 son los que ofrecerán un recipiente más seguro (3).

Asimismo, resulta conveniente maximizar otro índice denotado como M_2 , el cual corresponde al límite elástico del material, tal como se muestra en la Ecuación [6]. Mientras mayor sea el límite elástico del material, se necesita un espesor de pared más delgado, resultando beneficioso dado que disminuye la masa de la carcasa del recipiente y su coste (3).

$$M_2 = \sigma_f \quad [6]$$

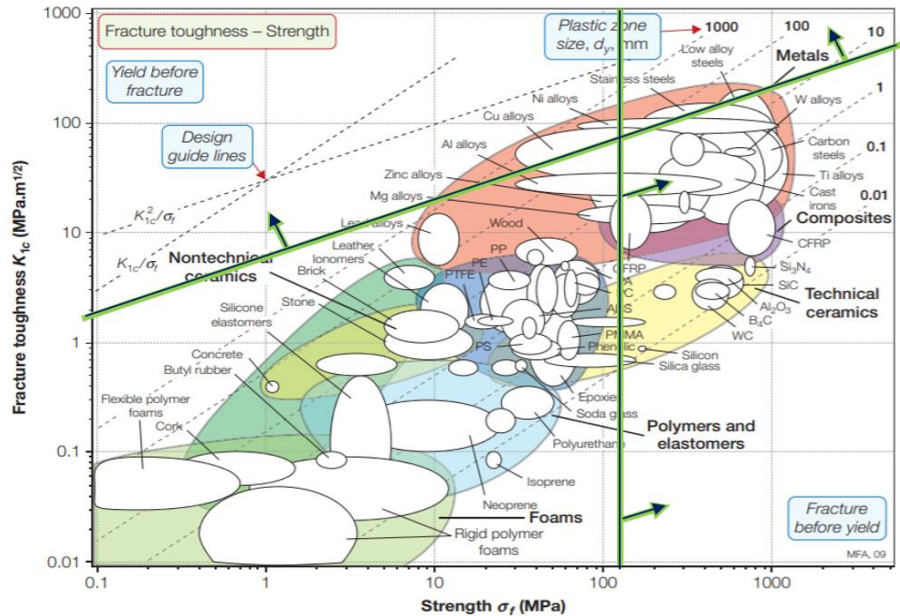


Figura 1. Tenacidad a la fractura por deformación plana frente al límite elástico (3).

Por otra parte, para los tubos del reactor R-201 donde ocurren las distintas reacciones exotérmicas, el índice del material a considerar es el M_3 . El M_3 se emplea en intercambiadores para maximizar el flujo de calor por unidad de área, valorando las propiedades de conductividad térmica (λ) y límite elástico de los materiales, como se muestra en la Ecuación [7] (4).

$$M_3 = \lambda \cdot \sigma_f \quad [7]$$

Por lo tanto, se emplea la Figura 2 para determinar los materiales que maximicen este índice, seleccionando aquellos que estén por encima de la línea dibujada.

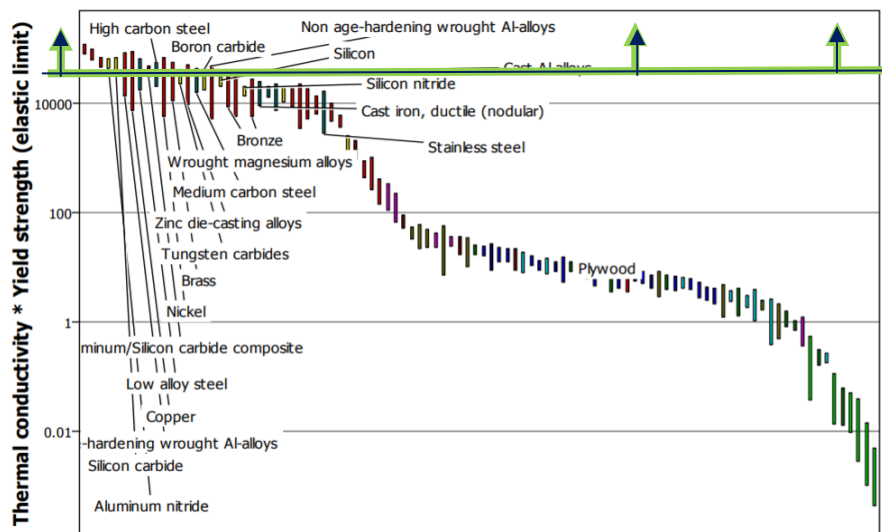


Figura 2. Materiales según el índice M_3 que toma en cuenta su conductividad y su límite elástico (4).

Con los índices estudiados se tiene una lista mucho más reducida de materiales a considerar, siendo los materiales que cumplen dichas características: aleaciones de níquel, de cobre, aceros inoxidable y aceros de baja aleación. Para una mayor reducción se hace un estudio económico de los materiales, para elegir el que menor costo suponga. En la Figura 3 se observa los costes de diferentes materiales en libras y dólares americanos por tonelada.

Metal	£/tonne	US\$/US ton
Carbon steel	300	500
Low alloy steel (Cr-Mo)	400–500	700–850
Austenitic stainless steel		
304	1400	2400
316	1900	3200
Copper	1500	2500
Aluminium	900	1500
Aluminium alloy	850	1400
Nickel	6400	11,000
Monel	5000	8500
Titanium	20,000	34,000

Figura 3. Precio de materiales de construcción (1).

Con lo analizado hasta este punto, los aceros de baja aleación y el acero inoxidable 304 son candidatos factibles para la construcción de los equipos de la planta del presente proyecto, debido a que cumplen los aspectos estudiados y resultan viables económicamente. Sin embargo, también es importante estudiar la compatibilidad química de los materiales con los fluidos utilizados en la planta.

Tomando en cuenta lo expuesto en la bibliografía (5), los aceros de baja aleación no son compatibles químicamente con el agua, compuesto que está presente en todos los equipos de la planta del presente proyecto, en gran cantidad. Mientras que, para el acero inoxidable 304, no ocurre esto. De hecho, en la Tabla 4 se muestra su compatibilidad química con los compuestos utilizados en el proceso, donde: A- Excelente, B-Bueno, C- Pobre y D- No recomendable.

Tabla 4. Compatibilidad química del material con los compuestos del proyecto para el acero inoxidable 304 (5).

Propileno	Helio	Acroleína	Ácido acrílico	Agua
B	A	B	A	A
Dióxido de carbono	Monóxido de carbono	Oxígeno	Nitrógeno	Acetaldehído
A	A	A	A	A

En conclusión, se toma la decisión de emplear el acero inoxidable 304 como material de construcción para fabricar los equipos a utilizar en el proceso, debido a que cumple los tres aspectos estudiados: se encuentra dentro de los criterios de la Metodología Ashby, es compatible químicamente con los fluidos del proceso y es el más viable económicamente.

5. Mínimo espesor de carcasa requerido

Los recipientes han de tener un espesor mínimo seleccionado para resistir la presión interna y ha de sumársele una tolerancia por la corrosión. Para el diseño de recipientes cilíndricos sometidos a presión interna, se sigue el código ASME BPV Sección VIII Div.1 parte UG-27, donde se especifica que ha de determinarse el espesor para soportar la tensión radial y la longitudinal (1).

Se ha de seleccionar el espesor calculado más alto entre los obtenidos de las Ecuaciones [8] y [9], que corresponden al espesor mínimo para la tensión radial y longitudinal, respectivamente (1).

$$t_r = \frac{P_i D_i}{2 SE - 1,2 P_i} + f_c \quad [8]$$

$$t_l = \frac{P_i D_i}{4 SE - 0,8 P_i} + f_c \quad [9]$$

Donde:

- t_r es el espesor mínimo de carcasa para tensión radial, en m.
- t_l es el espesor mínimo de carcasa para tensión longitudinal, en m.
- P_i es la presión de diseño del equipo, en bar.
- D_i es el diámetro interno del equipo, en m.
- S es el máximo esfuerzo permisible para el material seleccionado, en bar.
- E es la eficacia de la unión soldada.
- f_c es el factor de corrosión a aplicar, en m.

Para cada equipo, según su temperatura de diseño, se seleccionará el esfuerzo máximo permisible de la Tabla 5.

Tabla 5. Esfuerzos máximos permisibles para el material seleccionado. Elaboración propia, a partir de (1).

Material	Temperatura máxima (°F)	Valor del esfuerzo a distintas temperaturas °F (bar)				
		100	300	500	700	900
Acero Inoxidable (304)	1.500,00	1.378,95	1.034,21	889,42	806,69	744,63

Por otro lado, la eficacia de la unión soldada se selecciona siguiendo la Tabla 6. Concretamente, se ha seleccionado un grado de examen radiográfico puntual, dado que los equipos no operan con sustancias letales que requieran un ensayo radiográfico completo de todas las soldaduras de los extremos. Por tanto, se elige una soldadura doble puntual (1).

Tabla 6. Eficiencia máxima permisible de unión. Elaboración propia, a partir de (1).

Tipo de unión	Grado de Radiografía		
	Total	Puntual	Ninguna
Soldadura doble o equivalente	1,00	0,85	0,70
Soldadura Simple	0,90	0,80	0,65

Por último, para la selección del factor de corrosión se debe tener en cuenta que el código ASME BPV establece como mínimo un espesor de 1/16" (que equivale a 1,5 mm), que debe aumentarse si existe riesgo de corrosión. Sin embargo, no establece el valor del factor de corrosión, siendo el usuario quien especifica dicha tolerancia basándose en la experiencia y en las condiciones de operación. Particularmente, se va a tomar el valor típico de 4 mm para este factor en el presente proyecto (1).

6. Cabezales

Los recipientes cilíndricos deben estar cerrados en los extremos. Ahora bien, existen distintos tipos de cabezales que pueden ser empleados para ello: Cabezal de placas planas, cabezal hemisféricas, cabezales elipsoidales y cabezal tori esférico.

Para la selección del tipo de cabezal más idóneo se ha descartado el uso de los cabezales planos, dado que estos son empleados más que nada como cubiertas de las vías de acceso o en canales en intercambiadores de calor. Por otro lado, los otros tres cabezales se denominan cabezales abovedados y sus dimensiones se dan en los estándares y códigos correspondientes. El elíptico se recomienda cuando se trabaja a presiones que superen los 15 bar (1).

El hemisférico es empleado también en condiciones de alta presión, siendo este más fuerte que el elíptico. Este emplea un mayor volumen interno y aunque su espesor sea la mitad del de la carcasa, es el más caro para fabricar y presenta dificultades para unirlo a la carcasa (1).

Por último, el cabezal toriesférico es parecido al elíptico, sin embargo, es más sencillo de fabricar. Cuando el recipiente opera a presiones inferiores a 15 bar este cabezal resulta considerablemente más económico, siendo, por lo tanto, el más conveniente para los equipos que serán diseñados en este proyecto (1).

Se puede visualizar las diferencias de los cabezales mencionados en la Figura 4.

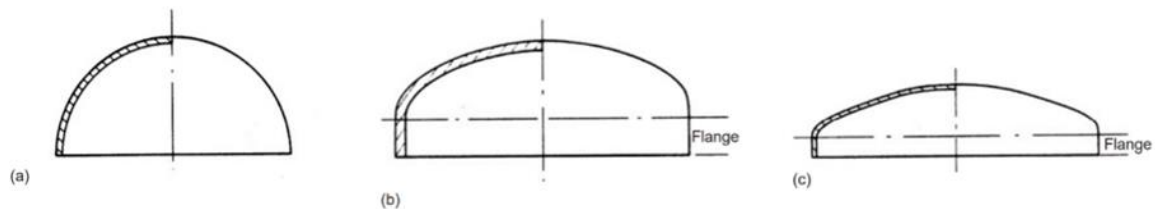


Figura 4 . Forma de los distintos cabezales: a) hemisférico b) elíptico c) toriesférico (1).

En el código ASME BPV Sección VIII Div.1 parte UG-32, se muestran las ecuaciones para el cálculo del espesor de los cabezales elípticos y toriesféricos. Mientras que, para el cabezal hemisférico el código indica que se calcula como si fuera una carcasa esférica. Las fórmulas correspondientes se muestran en las Ecuaciones [10], [11] y [12] (1).

$$t_{hemisférico} = \frac{P_i \cdot D_i}{4 \cdot S \cdot E - 0,4 \cdot P_i} + f_c \quad [10]$$

$$t_{elíptico} = \frac{P_i \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P_i} + f_c \quad [11]$$

$$t_{toriesférico} = \frac{0,885 P_i R_c}{S \cdot E - 0,1 \cdot P_i} + f_c \quad [12]$$

Donde, R_c es el radio de la corona, que se corresponde al diámetro interno del recipiente, D_i . Los cabezales serán construidos con el mismo material que los equipos, aplicándoles también el mismo grado de examen radiográfico.

Específicamente, para los cabezales toriesféricos seleccionados, se debe realizar el diseño mecánico siguiendo la norma DIN 28011. En el diseño, será necesario calcular los distintos parámetros que se muestran en la Figura 5 (6).

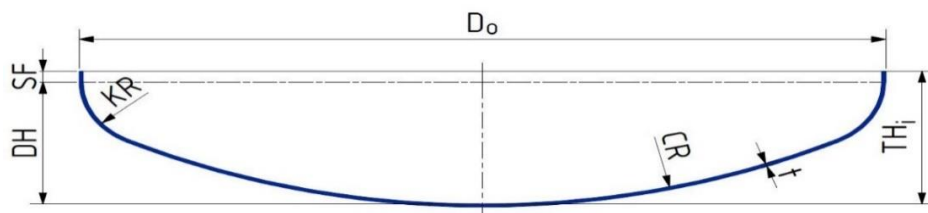


Figura 5. Parámetros para el dimensionamiento del cabezal toriesférico (6).

Donde:

- D_o es el diámetro externo del cabezal, en m.
- CR es el radio de la corona, en m.
- KR es el radio de la tolva, en m.
- SF es la altura del borde recto, en m.
- DH es la profundidad de la parábola, en m.
- TH_i es la altura interna total del cabezal, en m.

Para el cálculo de estos parámetros se emplean las Ecuaciones mostradas a continuación:

$$D_o = D_i + 2 \cdot t_{cabezal} \quad [13]$$

$$CR = D_o \quad [14]$$

$$KR = 0,1 \cdot D_o \quad [15]$$

$$SF = 3,5 \cdot t_{cabezal} \quad [16]$$

$$DH = 0,1935 \cdot D_o - 0,455 \cdot t_{cabezal} \quad [17]$$

$$TH_i = SF + DH \quad [18]$$

Debido que los equipos a diseñar operan a distintas condiciones y tienen dimensiones diferentes, estos cálculos serán mostrados en detalle en el diseño mecánico de cada equipo.

7. Aislamiento térmico

Resulta necesario contar con un material aislante que recubra aquellos recipientes de proceso y conducciones que, debido a su temperatura de operación, lo requieran. El objetivo del aislante es conservar la energía, de manera que las condiciones de proceso no fluctúen con las condiciones ambientales dadas, además de que también sirva de protección para los operadores de la planta en caso de entrar en contacto con dichos recipientes de proceso o conducciones. Otro beneficio que aporta el tener un material aislante es proteger la carcasa del equipo o la conducción de la corrosión atmosférica (2).

En la planta de producción de acroleína del presente proyecto, se considerará necesario tener un aislante para aquellos equipos, en los cuales la temperatura máxima de operación sea superior a 50 °C. Asimismo, se establecerá esa temperatura como límite a la cual podrá estar la superficie del aislante.

Para la selección del material aislante, se ha procedido a evaluar las características de ciertos aislantes que se encuentran disponibles en el mercado. Entre ellos están: fibra de vidrio, lana mineral, celulosa, espuma de poliuretano y poliestireno. De todos los mencionados, destaca la fibra de vidrio por ser el material aislante más ampliamente utilizado, ser uno de los más económicos, no es inflamable y, a su vez, es respetuoso con el medio ambiente. Este material se compone de finas hebras de vidrio que minimizan de manera efectiva la transmisión de calor. La única precaución que se debe tener en cuenta es que los operadores deberán utilizar materiales de protección, como gafas, máscaras y guantes al manipularlo e instalarlo, debido a que se pueden formar polvos de vidrio (7).

El rango de temperaturas para el cual se puede utilizar la fibra de vidrio como material aislante se muestra en la Tabla 7.

Tabla 7. Rango de temperaturas para el empleo de la fibra de vidrio como material aislante (8).

Material aislante	Rango de temperaturas (°C)
Fibra de vidrio	-30 a 540

Gracias a sus ventajosas características, se selecciona la fibra de vidrio como material aislante a utilizar en los equipos que lo requieran, debido a que estos se encuentran a temperaturas incluidas dentro del rango para el cual se puede emplear este aislante.

Para el cálculo del espesor de aislante requerido, se asume que la parte interna de la carcasa del recipiente se encuentra a la temperatura del fluido en el interior del recipiente, de manera que se desprecia la resistencia a la transmisión de calor por convección. Cabe destacar que la temperatura del fluido en el interior del recipiente se asumirá como la temperatura máxima de operación. Siguiendo esta línea, se considerará las resistencias a la transmisión de calor por conducción a través del espesor de la carcasa del recipiente, por conducción a través del material aislante y por convección externa, tal como se muestra en la Figura 6.

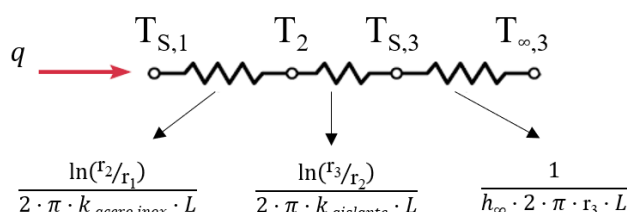


Figura 6. Resistencias a la transmisión de calor. Elaboración propia, a partir de (9).

El calor intercambiado q se puede calcular empleando la Ecuación [19].

$$q = \frac{T_{S,1} - T_{\infty,3}}{\frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{2 \cdot \pi \cdot k_{acero\ inox} \cdot L} + \frac{\ln\left(\frac{r_3}{r_2}\right)}{2 \cdot \pi \cdot k_{aislante} \cdot L} + \frac{1}{h_{\infty} \cdot 2 \cdot \pi \cdot r_3 \cdot L}} \quad [19]$$

No obstante, al tener dos incógnitas, es necesario aplicar la Ecuación [20], que corresponde al cálculo del calor intercambiado entre la parte interna de la carcasa y la pared del aislante.

$$q = \frac{T_{S,1} - T_{S,3}}{\frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{2 \cdot \pi \cdot k_{acero\ inox} \cdot L} + \frac{\ln\left(\frac{r_3}{r_2}\right)}{2 \cdot \pi \cdot k_{aislante} \cdot L}} \quad [20]$$

Donde:

- q es el calor intercambiado, en W.
- $T_{S,1}$, $T_{S,3}$ y $T_{\infty,3}$ corresponden a las temperaturas de la parte interna de la carcasa del recipiente, de la pared del aislante y del ambiente, respectivamente, en K.
- r_1 y r_2 corresponden a los radios interno y externo de la carcasa, respectivamente, en m.
- r_3 es el radio total del recipiente, incluyendo el aislante, en m. Se puede calcular como $r_3 = r_2 + t_{aislante}$, donde $t_{aislante}$ es el espesor del aislante, en m.
- $k_{acero\ inox}$ y $k_{aislante}$ son los coeficientes de conducción del material de la carcasa del recipiente y del aislante, en W/(m·K).
- L hace referencia a la altura del cuerpo cilíndrico del recipiente de proceso, en m.

- h_{∞} es el coeficiente de convección del aire, en $W/(m^2 \cdot K)$. Calculado con la Ecuación [21].

$$h_{\infty} = \frac{Nu_L \cdot k_{aire}}{L} \quad [21]$$

Por lo tanto, será necesario calcular el Nusselt, Nu_L . Los recipientes cilíndricos verticales se pueden aproximar a placas verticales y utilizar las correlaciones para placas planas verticales, siempre y cuando se cumpla la condición de la Ecuación [22].

$$\frac{D_o}{L} \geq \frac{35}{Gr_L^{1/4}} \quad [22]$$

Se puede calcular el número de Grashof, Gr_L , utilizando la Ecuación [23].

$$Gr_L = \frac{g \cdot \beta \cdot (T_{S,3} - T_{\infty,3}) \cdot L^3}{\nu^2} \quad [23]$$

Donde:

- g es la aceleración de la gravedad, $9,81 \text{ m/s}^2$.
- ν es la viscosidad cinemática del aire, en m^2/s .
- β es el coeficiente de dilatación volumétrica del aire (usando la Ecuación [24]), en K^{-1} .

$$\beta = \frac{1}{T_{S,3} + T_{\infty,3}} \quad [24]$$

Cumpliendo la condición de la Ecuación [22], se aplica la correlación de Churchill y Chu, utilizada para casos de convección natural sobre placas planas verticales, empleando la Ecuación [25].

$$Nu_L = \left\{ 0,825 + \frac{0,387 \cdot Ra_L^{1/6}}{\left[1 + \left(\frac{0,492}{Pr} \right)^{9/16} \right]^{8/27}} \right\}^2 \quad [25]$$

Siendo:

- Ra_L el número de Rayleigh, el cual es calculado haciendo uso de la Ecuación [26].
- Pr el número de Prandtl, cuyo valor se encuentra tabulado, en la Tabla 8.

$$Ra_L = Pr \cdot Gr_L \quad [26]$$

En la Tabla 8 se muestran los parámetros del aire y del material aislante seleccionado, fibra de vidrio, que se utilizarán para los cálculos explicados en este apartado.

Tabla 8. Parámetros del aire y del material aislante seleccionado, a 300 K (9).

Parámetro	Aire	Fibra de vidrio
k [W/(m·K)]	$2,63 \cdot 10^{-2}$	$3,60 \cdot 10^{-2}$
ν (m ² /s)	$15,89 \cdot 10^{-6}$	-
Pr	0,71	-

8. Aberturas y conexiones

Los recipientes de proceso cuentan con diferentes aberturas. Como ejemplo están las tubuladuras que permiten la conexión de los extremos de conducciones a los recipientes, para la entrada y salida de las corrientes del proceso. También, serán necesarias otras aberturas para instalar bocas de hombre y los instrumentos de control (1).

Cabe resaltar que las aberturas de los recipientes de proceso debilitan su carcasa, y para compensar este efecto, es conveniente utilizar refuerzos. Una manera sencilla de facilitar la compensación necesaria es soldar una almohadilla o collarín alrededor de la abertura, como se muestra en la Figura 7, que tendrá un diámetro de 1,5 a 2 veces el diámetro de la abertura (1).

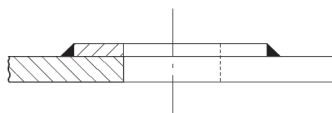


Figura 7. Almohadilla para la compensación de aberturas (1).

Se debe disponer de boquillas en las aberturas de los recipientes de proceso, y por lo general, se utilizan bridas para unirlos con las conducciones. Asimismo, las juntas con bridas también se pueden utilizar para conectar las conducciones con otros equipos de la planta, como bombas y válvulas. Existen varios tipos de bridas, mostradas en la Figura 8, cuya elección se basará en su aplicación. Están disponibles en múltiples tamaños, ajustándose a conducciones de pequeño diámetro hasta varios metros de diámetro (1).

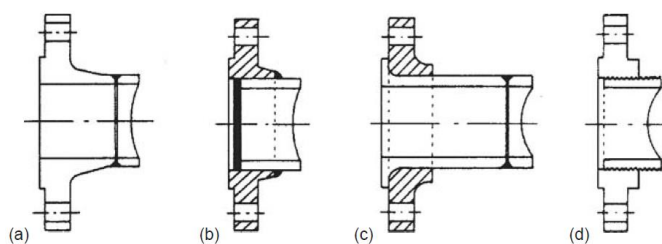


Figura 8. Tipos de bridas: a) Con cuello soldado, b) Deslizantes, c) Solapadas, d) Atornilladas (1).

Las bridas con cuello soldado se utilizan cuando se espera que la brida esté sometida a temperatura, tensiones de cizallamiento y vibraciones, son adecuadas para las conexiones y boquillas de los recipientes de proceso. Las bridas deslizantes, tal como su nombre lo indica, se deslizan sobre la conducción o la boquilla, y se sueldan tanto externamente como internamente. Estas últimas suelen ser más económicas que las primeras, no obstante, presentan una menor resistencia a cargas y vibraciones, y por lo tanto se utilizan generalmente para conducciones (1).

Las bridas solapadas se utilizan también para conducciones, son fáciles de ensamblar y resultan una buena opción para cuando se opera con conducciones de acero inoxidable, debido a que la brida se fabrica con acero al carbono de bajo coste. Por último, las bridas atornilladas se utilizan

para conectar los accesorios que resultan difíciles de soldar, y son adecuadas para conectar las conducciones de pequeño diámetro (menor a 40 mm) a los recipientes de proceso (1).

En los recipientes de proceso de la planta de producción del presente proyecto, se tendrán tantas aberturas como sean necesarias, y en principio, las bridas a utilizar para conectar las conducciones a dichos recipientes serán bridas con cuello soldado. Este mismo tipo de brida será utilizado para conectar las conducciones con las válvulas, bombas, compresor e intercambiadores de calor, presentes en la planta. En aquellos casos en los que las conducciones sean de pequeño diámetro se utilizarán bridas atornilladas. Mientras que, para conectar las conducciones entre sí, se podrán utilizar tanto bridas deslizantes como solapadas.

Por otro lado, es importante comentar que se puede disponer de bocas de hombre, siempre que sean requeridas, en los recipientes de proceso para su inspección y mantenimiento. Estas podrán tener diferentes diámetros, que van desde 14 a 24 pulgadas (10). No obstante, el mantenimiento a los recipientes de proceso se puede realizar de diferentes maneras, dependiendo del equipo.

9. Cargas

Los recipientes a presión deben ser diseñados de forma que puedan soportar la peor combinación de cargas sin fallar. Son varias las cargas a las que este tipo de recipientes se ven sometidos, además de la presión de diseño. Las más importantes, que siempre deben ser consideradas en el diseño de equipos a presión, son: peso máximo del recipiente, en condiciones de operación y en condiciones de prueba hidráulica, cargas por viento, cargas sísmicas y cargas impuestas por la instrumentación incluida en el recipiente (1).

9.1. Cargas por peso

Entre las fuentes de cargas por peso se incluyen: el peso de la carcasa del equipo, el peso de su contenido, el peso de los accesorios internos y externos que tenga el recipiente, y el peso del material aislante que lo recubre (1).

La Ecuación [27] se puede emplear para calcular el peso de la carcasa de un recipiente cilíndrico, con cabezales incluidos y un espesor de pared uniforme, en condiciones de funcionamiento.

$$W_v = C_W \cdot \pi \cdot \rho_m \cdot D_m \cdot g \cdot (L_{total} + 0,8 \cdot D_m) \cdot t \cdot 10^{-3} \quad [27]$$

Donde:

- W_v es el peso total de la carcasa, sin tener en cuenta los accesorios internos, en N.
- C_W es un factor para considerar el peso de boquillas y accesorios internos. Para el caso de los equipos diseñados en este presente proyecto, que presentan numerosos accesorios internos, este factor toma el valor de 1,15.
- ρ_m es la densidad del material del recipiente, en kg/m³.
- D_m es diámetro medio del recipiente, en m. Se calcula como $D_m = D_i + t \cdot 10^{-3}$, es decir, sumándole una vez el espesor de carcasa al diámetro interno del recipiente.
- g es la aceleración de la gravedad, 9,81 m/s².
- L_{total} es la altura del recipiente, en m.
- t es el espesor de la carcasa del recipiente, en mm.

Por otro lado, el peso del material aislante que recubre un recipiente cilíndrico se estima mediante el empleo de la Ecuación [28]. Se debe conocer de antemano el volumen del aislante, $V_{Aislante}$, que puede ser calculado mediante la Ecuación [29].

$$W_{Aislante} = V_{Aislante} \cdot \rho_{Aislante} \cdot g \quad [28]$$

$$V_{Aislante} = \pi \cdot L_{Aislante} \cdot (r_3^2 - r_2^2) \quad [29]$$

Siendo:

- $W_{Aislante}$ es el peso del material aislante, en N.
- $\rho_{Aislante}$ es la densidad del material aislante, en kg/m³.
- $L_{Aislante}$ es la altura del aislante, en m. Este valor corresponde con la altura del cuerpo cilíndrico del recipiente.
- r_2 es el radio externo de la carcasa, en m.
- r_3 es el radio externo del recipiente incluyendo el espesor del aislante, en m. Se calcula como $r_3 = r_2 + t_{Aislante}$.

Es importante mencionar que, el resultado obtenido de la Ecuación [28] debe ser duplicado, de modo que se consideren los accesorios necesarios para la instalación del aislante, su sellado y la absorción de humedad (1).

Con respecto a las otras cargas por peso, debido a que no son de carácter general para cualquier equipo, se organizarán las ecuaciones a utilizar en función de los equipos a diseñar del presente proyecto. Una vez calculadas todas las cargas por peso de manera individual, se procederá a sumarlas, y serán denotadas como W_z .

Asimismo, se debe calcular el peso máximo del recipiente cuando este se encuentra lleno de agua, lo que correspondería a las condiciones de prueba hidráulica. Para ello, se debe estimar el peso del agua contenida en el recipiente, y una vez conocido este valor, se le suma el peso del recipiente en condiciones de operación, ya calculado. Las ecuaciones a utilizar se muestran a continuación:

$$V_{liquido} = \left(\pi \cdot \frac{D_i^2}{4} \cdot L_{total} \right) \quad [30]$$

$$W_{Agua} = V_{liquido} \cdot \rho_{Agua} \cdot g \quad [31]$$

$$W_{P.H.} = W_z + W_{Agua} \quad [32]$$

Donde:

- $V_{liquido}$ es el volumen ocupado por el líquido, en m³.
- ρ_{Agua} es la densidad del agua, tomada como 1.000 kg/m³.
- W_{Agua} es el peso del agua, en N.
- $W_{P.H.}$ es el peso máximo del recipiente en condiciones de prueba hidráulica, en N.

9.1.1. Reactor R-201

Para el reactor R-201 además del peso del aislante y de la propia carcasa, se ha de considerar el peso ejercido por los tubos y el catalizador en el interior del reactor. Para ello, se empieza calculando el volumen ocupado por todos los tubos presentes, mediante la Ecuación [33].

$$V_t = L \cdot \pi \cdot \frac{d_o^2 - d_i^2}{4} \cdot N_t \quad [33]$$

Conociendo este volumen es posible determinar el peso que ejercen, empleando la densidad del acero y la gravedad como se muestra en la Ecuación [34].

$$W_t = V_t \cdot \rho \cdot g \quad [34]$$

Mientras que la presión que ejerce el catalizador se determina mediante la Ecuación [35], conociendo previamente la cantidad de catalizador presente en el reactor en kg ($W_{catalizador}$).

$$W_{CF} = W_{catalizador} \cdot g \quad [35]$$

No obstante, para calcular el peso máximo del recipiente cuando este se encuentra lleno de agua, condiciones de prueba hidráulica, se debe considerar que el agua fluye tanto por carcasa como por los espacios vacíos en los tubos. Por consiguiente, se debe determinar el volumen total existente en el interior de la carcasa (V_{ti}) empleando la Ecuación [36].

$$V_{ti} = L \cdot \pi \cdot \frac{D_i^2}{4} \quad [36]$$

Posteriormente, con la porosidad del lecho (ε) se determina el volumen que ocupa el catalizador usando la Ecuación [37].

$$V_{catalizador} = L \cdot N_t \cdot \pi \cdot (1 - \varepsilon) \cdot \frac{d_i^2}{4} \quad [37]$$

Por último, se puede calcular el volumen del líquido que ocuparía todo el reactor mediante la Ecuación [38], y emplear la Ecuación [31] para determinar la carga correspondiente a este líquido.

$$V_{liquido} = V_{ti} - V_t - V_{catalizador} \quad [38]$$

9.1.2. Columna de destilación T-304

Para la columna de destilación T-304, debido a que se trata de una columna de platos, es necesario calcular el peso de todos los platos existentes en su interior. Para ello, siguiendo lo establecido en la bibliografía (1), el peso de los platos se estima multiplicando 1,2 kN/m² por el área de cada plato y el número de platos. Lo explicado se muestra en la Ecuación [39], mostrada a continuación.

$$W_{Platos} = 1,2 \cdot \pi \cdot \frac{D_i^2}{4} \cdot N \quad [39]$$

Donde:

- W_{Platos} es el peso de los platos, en kN. Cabe acotar que este resultado incluye la carga típica del líquido en cada plato.
- D_i es el diámetro interno de la columna de destilación, en m.
- N es el número de platos reales de la columna de destilación.

9.2. Cargas por viento

Los equipos diseñados en el presente proyecto serán instalados al aire libre debido a que tienen una altura considerable, y, por lo tanto, se vuelve necesario estimar las cargas por viento. Como estos equipos contarán con un soporte, pasan a actuar como vigas en voladizo, tal como se aprecia en la Figura 9. Para una viga en voladizo con carga uniforme, el momento flector vendrá dado por la Ecuación [40].

$$M_x = \frac{W \cdot x^2}{2} \quad [40]$$

$$W = P_w \cdot D_{eff} \quad [41]$$

$$P_w = 0,05 \cdot u_w^2 \quad [42]$$

Siendo:

- M_x es el momento flector, en N·m.
- W es la carga por unidad de longitud, en N/m. Se calcula mediante la Ecuación [41].
- x es la altura del equipo medida desde el suelo, en m.
- P_w es la presión del viento, en N/m². Se calcula haciendo uso de la Ecuación [42].
- D_{eff} es el diámetro efectivo del equipo, en m. Corresponde al diámetro externo del equipo, incluyendo los espesores de la carcasa y del aislante.
- u_w es la velocidad del viento, en km/h.

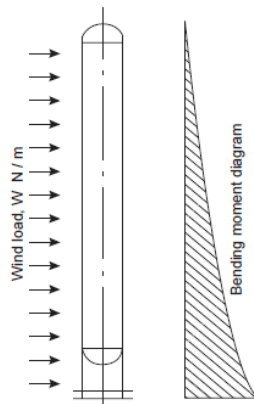


Figura 9. Cargas por viento en equipos al aire libre (1).

Los equipos deben diseñarse para soportar la velocidad del viento más alta que se pueda dar, la cual se puede predecir mediante los registros meteorológicos de la ubicación de la planta. No obstante, se utilizará un valor de 160 km/h, según lo encontrado en la bibliografía (1).

9.3. Cargas por actividad sísmica

El movimiento de la superficie terrestre genera fuerzas de cizallamiento horizontales a las que se someten los equipos, es por ello que, en aquellos casos donde las plantas químicas se encuentran en zonas con actividad sísmica, estas cargas no se pueden despreciar (1). Sin embargo, la planta de producción de acroleína del presente proyecto se encuentra en la provincia de Tarragona, y tal como se expuso en el apartado 9.2.4. *Sismicidad*, del *Documento I: Memoria*, esta provincia presenta una peligrosidad sísmica baja. Por este motivo, no se analizarán las cargas por actividad sísmica en los equipos a diseñar de este proyecto.

10. Esfuerzos

Una vez descritas todas las cargas a las que se someten los equipos, se debe analizar si los recipientes tienen la capacidad de soportarlas. Esto se realiza mediante el estudio de esfuerzos. Para ello, se harán los cálculos utilizando el espesor de carcasa ya determinado para cada equipo, y se verificará que el esfuerzo máximo permisible no exceda el valor dado para el material de construcción seleccionado (1).

10.1. Esfuerzos primarios

Los esfuerzos que se consideran como esfuerzos primarios se enlistan a continuación (1):

1. Esfuerzos longitudinales y radiales debido a la presión interna.
2. Esfuerzo debido al peso del recipiente, su contenido y accesorios.
3. Esfuerzos de flexión.

Los esfuerzos longitudinales y radiales debido a la presión interna en los equipos se pueden estimar empleando las Ecuaciones [43] y [44], respectivamente.

$$\sigma_L = \frac{P \cdot D_i}{4 \cdot t} \quad [43]$$

$$\sigma_R = \frac{P \cdot D_i}{2 \cdot t} \quad [44]$$

Donde:

- σ_L y σ_R son los esfuerzos longitudinales y radiales debido a presión interna, respectivamente, en N/m².
- P es la presión de diseño del recipiente, en N/m².
- D_i es el diámetro interno del recipiente, en m.
- t es el espesor de la carcasa del recipiente, en m.

El esfuerzo debido al peso del recipiente, su contenido y accesorios, σ_W en N/m², se calcula mediante la Ecuación [45].

$$\sigma_W = \frac{W_z}{\pi \cdot (D_i + t) \cdot t} \quad [45]$$

Siendo W_z la suma de todas las cargas por peso que soporta el recipiente, en N, calculadas en el apartado 9.1. *Cargas por peso*.

Por último, los esfuerzos de flexión se derivan de los momentos flectores a los que se someten los recipientes. Estos últimos pueden deberse a las cargas por viento, cargas sísmicas, en los casos que procedan, o simplemente al peso muerto del recipiente y sus accesorios. Estos esfuerzos, calculados utilizando la Ecuación [46], serán de tracción o de compresión conforme a la ubicación, tomando valores positivos si están en contra del viento, y valores negativos si están a favor del viento (1).

$$\sigma_b = \pm \frac{M_x}{I_v} \cdot \left(\frac{D_i}{2} + t \right) \quad [46]$$

$$I_v = \frac{\pi}{64} \cdot (D_o^4 - D_i^4) \quad [47]$$

Donde:

- σ_b corresponde a los esfuerzos de flexión, en N/m².
- D_i es el diámetro interno del recipiente, en m.
- D_o es el diámetro externo del recipiente, en m.
- I_v el segundo momento del área del recipiente con respecto al plano de flexión, en m⁴.

Una vez calculados estos tres esfuerzos primarios, se procede a calcular el esfuerzo longitudinal total, σ_z en N/m², empleando la Ecuación [48].

$$\sigma_z = \sigma_L - \sigma_W \pm \sigma_b \quad [48]$$

10.2. Esfuerzos principales

Los esfuerzos principales se estiman empleando las siguientes Ecuaciones:

$$\sigma_1 = 0,5 \cdot \left[\sigma_R + \sigma_z + \sqrt{(\sigma_R - \sigma_z)^2} \right] \quad [49]$$

$$\sigma_2 = 0,5 \cdot \left[\sigma_R + \sigma_z - \sqrt{(\sigma_R - \sigma_z)^2} \right] \quad [50]$$

$$\sigma_3 = 0,5 \cdot P \quad [51]$$

El tercer esfuerzo principal generalmente es despreciable en comparación a los otros cuando se trata de carcasas con espesores delgados (1).

10.3. Esfuerzo máximo permisible

Siguiendo la línea de lo anteriormente comentado, el espesor de la carcasa de los recipientes debe ser tal que no se exceda el esfuerzo establecido por el material de construcción de los equipos. Para comprobar esto, se debe calcular el esfuerzo máximo permisible, $S_{permisible}$ en N/m², que se tomará como el mayor valor resultante de las Ecuaciones [52], [53] y [54] (1).

$$(\sigma_1 - \sigma_2) \quad [52]$$

$$(\sigma_1 - \sigma_3) \quad [53]$$

$$(\sigma_2 - \sigma_3) \quad [54]$$

10.4. Esfuerzos de compresión y estabilidad elástica

En los casos en que el esfuerzo longitudinal total, σ_z , sea compresivo, el recipiente puede fallar por inestabilidad elástica. El pandeo puede ocurrir en el recipiente completo, o puede ser local. Este último se dará con un esfuerzo considerablemente menor al que se necesitaría para pandear el recipiente completo (1). Se debe verificar que el valor del esfuerzo máximo de compresión en la carcasa de un recipiente no exceda el valor del esfuerzo crítico de compresión. Por consiguiente, se deben calcular estos valores, haciendo uso de las Ecuaciones [55] y [56].

$$\sigma_c = \sigma_W + \sigma_b \quad [55]$$

$$\sigma_{c,crítico} = 2 \cdot 10^{10} \cdot \left(\frac{t}{D_o} \right) \quad [56]$$

Siendo:

- σ_c el esfuerzo máximo de compresión, en N/m².
- $\sigma_{c,crítico}$ el esfuerzo crítico de compresión, en N/m².
- t el espesor de la carcasa del recipiente, en m.
- D_o el diámetro externo de la carcasa del recipiente, en m.

11. Soportes

La selección del soporte para los equipos dependerá del tamaño, el peso y la forma del recipiente. Sin embargo, ha de considerarse a la vez sus condiciones de operación, la ubicación y sobre todo la disposición del equipo. Es preciso recalcar que el soporte ha de resistir tanto el peso del

recipiente como las cargas externas y, de ser necesario, se deberán incorporar en ellos aberturas para el acceso de las tuberías que se requieran (1).

Para los recipientes con una disposición horizontal se emplean los soportes tipo silla, mientras que, si se encuentran en disposición vertical y poseen una altura considerable se usan soportes tipo falda. Por otro lado, se pueden emplear soportes de abrazaderas para todo tipo de recipientes. En la Figura 10 se pueden observar como ejemplo las configuraciones de estos soportes (1).

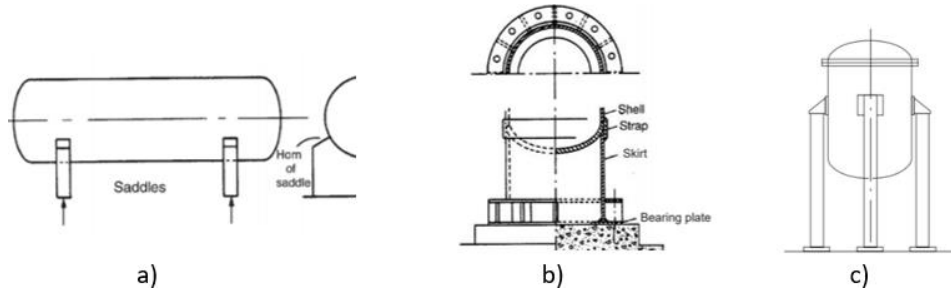


Figura 10. Configuraciones de los distintos soportes a) silla, b) falda, c) abrazadera (1).

Cabe destacar, que los equipos a diseñar tienen una disposición vertical y aunque se explicará con más detalle en sus respectivos diseños mecánicos la selección del soporte, se concluye que los soportes a seleccionar son de tipo falda.

Además de ser recomendado para los recipientes verticales, el soporte tipo falda tiene la ventaja de no imponer cargas concentradas en la carcasa del equipo. Asimismo, este tipo de soporte supone una carcasa cilíndrica o cónica soldada al cabezal inferior del equipo, pudiendo ser de distintos diseños como se muestra en la Figura 11.

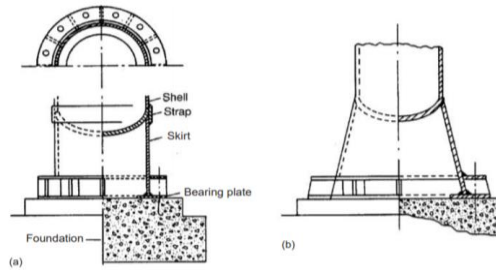


Figura 11. Diseños típicos del soporte tipo falda. a) Falda recta, b) Falda cónica (1).

Para garantizar que el espesor del soporte es capaz de resistir las cargas por el peso muerto del recipiente, así como los momentos de flexión ejercidos al equipo, se calcularán los esfuerzos resultantes en el soporte (σ_s) empleando las siguientes Ecuaciones:

$$\sigma_s(\text{tracción}) = \sigma_{bs} - \sigma_{ws} \quad [57]$$

$$\sigma_s(\text{compresión}) = \sigma_{bs} + \sigma_{ws} \quad [58]$$

$$\sigma_{bs} = \frac{4 \cdot M_x}{\pi \cdot (D_s + t_{sk}) \cdot t_{sk} \cdot D_s} \quad [59]$$

$$\sigma_{ws} = \frac{W_T}{\pi \cdot (D_s + t_{sk}) \cdot t_{sk}} \quad [60]$$

$$\hat{\sigma}_s \text{ máximo (tracción)} = \sigma_{bs} - \sigma_{ws} (\text{operación}) \quad [61]$$

$$\hat{\sigma}_s \text{ máximo (compresión)} = \sigma_{bs} + \sigma_{ws} (\text{ensayo}) \quad [62]$$

Donde:

- σ_{bs} es el esfuerzo de flexión en el soporte, en N/m².
- σ_{ws} es el esfuerzo por el peso propio de la falda, en N/m².
- M_x es el momento máximo de flexión en la base de la falda, en N·m.
- W_T es el peso máximo del recipiente, calculado en el apartado de cargas por peso, en N.
- D_s es el diámetro interno de la falda, que corresponderá al diámetro del recipiente, en m.
- t_{sk} es el espesor de la falda, en m.

Por lo tanto, se realizarán estos cálculos una vez obtenidas las cargas correspondientes de cada equipo, dado que el esfuerzo en condiciones de ensayo es considerando el recipiente lleno de agua para la realización de la prueba hidráulica. Mientras que, el esfuerzo en condiciones de operación solo se considera el peso muerto del recipiente (1).

Cabe destacar, que se deberá además seleccionar una altura y un espesor adecuado para el soporte, cuyos valores no deberán ser inferior a 2,10 m y 6 mm, respectivamente (1).

Posteriormente se verificará que se cumplan los criterios de diseño, Ecuaciones [63] y [64] (1).

$$\hat{\sigma}_s \text{ máximo (compresión)} < 0,125 \cdot E_y \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s} \right) \cdot \text{sen } \theta \quad [63]$$

$$\hat{\sigma}_s \text{ máximo (tracción)} < S \cdot E \cdot \text{sen } \theta \quad [64]$$

Siendo, E_y el modulo de Young del material, en N/m² que ha de tomarse de la bibliografía (11), y θ el ángulo de la base de la falda, cuyo valor típico es entre 80 y 90°. Se seleccionará 90°, que corresponden a una falda recta.

12. Válvulas de alivio

En este apartado se mostrará los pasos a seguir para el dimensionamiento de las válvulas de alivio presentes en los equipos a diseñar, dado que estos son los instrumentos más empleados comúnmente como dispositivos de alivio de los equipos.

Estos dispositivos son imprescindibles para la seguridad, siendo requeridos para todos los equipos a presión dentro del alcance del Código ASME BPV Sección VIII. La función de esta válvula es aliviar la presión del equipo en caso de que esta exceda la máxima presión permitida, previniendo por lo tanto accidentes catastróficos (1).

Para el dimensionamiento de las válvulas de alivio se siguen las instrucciones del código API 520. *Sizing, Selection, and Installation of Pressure-Relieving Devices in Refineries*. Las recomendaciones de este código son especialmente destinadas a complementar el contenido del Código ASME BPV Sección VIII (12). Este último ha sido el código empleado para el diseño de los equipos R-201, T-302 y T-304. Las válvulas de alivio se encuentran en una amplia gama de materiales y tamaños, por lo que puede ser seleccionadas siguiendo el estándar API 526 (1).

El funcionamiento del dispositivo es muy simple, una vez alcanzada la presión de ajuste de la válvula, esta "estalla" y el disco se levanta del asiento, permitiendo la salida del fluido. Cabe destacar, que el caudal que pasa por esta válvula estará limitado solo por el área del orificio del asiento, siendo este un parámetro clave en el dispositivo (1).

Ahora bien, para su dimensionamiento, se debe tener en cuenta que no se están considerando contingencias de fuego, y que no se precisa un certificado de capacidad según el código ASME BPV Sec. VIII. Div.1. Por lo tanto, al ser esta válvula el dispositivo primario de seguridad, la presión de alivio aguas arriba debe ser tal que se evite que la presión del equipo aumente un 10% de la máxima permitida (1).

Siguiendo las recomendaciones del apartado 5.4.2. *Operating Contingencies* del API 520 es posible calcular los límites de presión para la instalación del equipo, usando como referencia la presión de diseño. El cálculo se realiza, siguiendo la Tabla 9, multiplicando la presión de diseño del equipo por el factor correspondiente para cada parámetro (12).

Tabla 9. Factores para el cálculo de la presión de alivio de la válvula. Elaboración propia, adaptado de (12).

Parámetro	Factor
Presión máxima acumulada (bar)	1,10
Presión de consigna (bar)	1
Sobrepresión permitida (bar)	0,10
Presión de alivio (bar)	24,70

Posteriormente, al tratarse de corrientes gaseosas, es requiere conocer si el flujo es subcrítico o crítico, dado que, según el tipo de flujo que sea, el procedimiento a seguir varía para el dimensionamiento. Para determinar el tipo de flujo se emplea la Ecuación [65].

$$P_{cf} = P_1 \cdot \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad [65]$$

Siendo:

- P_{cf} es la presión crítica de flujo, en bar.
- P_1 es la presión máxima acumulada, en bar.
- γ es el cociente entre las capacidades caloríficas del gas ideal ($\frac{C_p}{C_v}$), (se obtiene de Hysys).

Al comprobar que la presión crítica calculada es mayor o igual que la presión aguas abajo, se considera el flujo como crítico, y se puede empezar el dimensionamiento.

Para un flujo crítico el área efectiva de descarga puede determinarse empleando la Ecuación [66].

$$A = \frac{W}{C \cdot K_d \cdot P_1 \cdot K_c \cdot K_b} \cdot \sqrt{\frac{T \cdot Z}{M}} \quad [66]$$

Siendo:

- A es el área efectiva de descarga de la válvula, en mm².
- P_1 es la presión máxima acumulada, en kPa.
- W es el caudal de vapor de paso, en kg/h.
- T es la temperatura de alivio del vapor, en K.
- Z el factor de compresibilidad, el cual representa la desviación de la idealidad.
- M es el peso molecular del vapor, g/mol.
- K_d es el coeficiente efectivo de descarga, siendo este 0,975 para la válvula de alivio,
- K_c es el factor de corrección debido a combinaciones con discos de rupturas, al no tener discos se toma un valor de 1.

- K_b es el factor de corrección por contrapresión, el cual se puede asumir como 1.
- C es un coeficiente que se calcula mediante la Ecuación [67].

$$C = 520 \cdot \sqrt{\gamma \cdot \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}} \quad [67]$$

Por último, con el área calculada se debe seleccionar un valor estándar siguiendo el código API 526, siendo el valor seleccionado siempre igual o mayor al calculado. Para ello, se emplea el Catálogo Crosby, que se muestra en la Figura 12, la cual muestra también los modelos de válvulas disponibles (13).

Crosby Spring Loaded Pressure Relief Valve							
Orifice Areas							
Table T7-11							
							
Style JOS	Style JBS	Style JOS-H (with open bonnet)	Style JO	Style JB	Series 800	Series 900 OMNI-TRIM	Series BP
*Indicates available orifices							
Orifice Designation and Effective Area Sq. In. (Sq. mm)	Series BP Fixed Blowdown Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Liquid 3/4" x 1", 1" x 1"	Style JOS,/JBS Closed Bonnet Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam 1 D 2 to 8 T ₂ 10	Style JLT-JOS/JBS Closed Bonnet Pressure Relief Valve Liquid 1 D 1 to 8 T ₂ 10	Style JOS-H Open Bonnet Pressure Relief Valve Steam 1 D 2 to 8 T ₂ 10	Style JO/JB Closed Bonnet Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam 10 V 14 to 20 BB ₂ 24	Series 800 Adjustable Blowdown Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam 3/4" x 1" to 1-1/2" x 2-1/2"	Series 900 OMNI-TRIM® Fixed Blowdown Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam, Liquid 1/2" x 1" to 1-1/2" x 2-1/2"
-	0.074 (47.7)	*					*
D	0.110 (71.0)	*	*	*		*	*
E	0.196 (126)	*	*	*		*	*
F	0.307 (198)	*	*	*		*	*
G	0.503 (325)	*	*	*		*	*
H	0.785 (506)	*	*	*			
J	1.287 (830)	*	*	*			
K	1.838 (1186)	*	*	*			
L	2.853 (1841)	*	*	*			
M	3.600 (2323)	*	*	*			
N	4.340 (2800)	*	*	*			
P	6.379 (4116)	*	*	*			
Q	11.05 (7129)	*	*	*			
R	16.00 (10323)	*	*	*			
T	26.00 (16774)	*	*	*			
T ₂	27.87 (17982)	*	*	*			
V	42.19 (27219)				*		
W	60.75 (39193)				*		
Y	82.68 (53342)				*		
Z	90.95 (58677)				*		
Z ₂	108.86 (70232)				*		
AA	136.69 (88187)				*		
BB	168.74 (108864)				*		
BB ₂	185.00 (119355)				*		
Crosby Catalog No.		310	310	310	307	902	902

Figura 12. Catálogo para estandarizar las válvulas de alivio (13).

13. Bibliografía

1. **TOWLER, G. & SINNOTT, R.** *Chemical Engineering Design*. Elsevier, Inc., 2008. ISBN 978-0-7506-8423-1.
2. **WALAS, S.** *Chemical Process Equipment, Selection and Design*. Boston: Butterworth-Heinemann, 1990. ISBN 0-7506-9385-1.
3. **ASHBY, M.** *Materials Selection in Mechanical Design*. 4º ed. Oxford: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2011. ISBN: 978-1-85617-663-7.
4. **OKAFOR, C., TAGBO, A., OBIAFUDO, O. & NWADLIKE, E.** Material Selection and Fluid Flow Analysis of Parallel Flow Heat Exchangers. *Archives of Current Research International*, 2016, 6, 1-14. SSRN: <https://ssrn.com/abstract=2908369>.
5. **GRACO.** *Chemical Compatibility Guide*. [En línea] 2013. [consultado abril de 2021]. Disponible en: https://www.graco.com/content/dam/graco/ipd/literature/misc/chemical-compatibility-guide/Graco_ChemCompGuideEN-B.pdf.
6. **SLAWINSKI.** *Torisphepherical head according to DIN 28011*. [En línea] [consultado abril de 2021]. Disponible en: <https://www.slawinski.co.uk/products/torispherical-heads/>.
7. **Thermaxx Jackets.** *5 Most Common Thermal Insulation Materials*. [En línea] 2011. [consultado mayo de 2021]. Disponible en: <https://www.thermaxxjackets.com/5-most-common-thermal-insulation-materials/>.
8. **Engineering ToolBox.** *Insulation Materials - Temperature Ranges*. [En línea] 2005. [consultado mayo de 2021]. Disponible en: https://www.engineeringtoolbox.com/insulation-temperatures-d_922.html.
9. **INCROPERA, F., DEWITT, D., BERGMAN T. & LAVINE A.** *Fundamentals of heat and mass transfer*. 6º ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2007. ISBN: 0-471-45728-0.
10. **BACKHURST, J. & HARKER, J.** *Process Plant Design*. London: Heinemann Educational Books Ltd, 1973. ISBN: 0-435-72563-7.
11. **Alloy Wire International.** *Stainless Steel 304*. [En línea] [consultado mayo de 2021]. Disponible en: <https://www.alloywire.es/products/stainless-steel-304/>.
12. **AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE.** *Sizing, Selection, and Installation of Pressure Relieving Devices in Refineries*. 7º ed. Washington, DC: American Petroleum Institute, 2000.
13. **CROSBY.** *Crosby Pressure Relief Valve Engineering Handbook*. 1º ed. 1997.

PARTE B:
REACTOR R-201

ÍNDICE

1.	Introducción.....	1
2.	Catalizador seleccionado y sus propiedades.....	3
3.	Mecanismo de reacción	5
3.1.	Difusión interna en el catalizador	8
3.2.	Difusión externa en el catalizador.....	11
4.	Selección del tipo de reactor y su configuración	12
5.	Selección de las condiciones de operación	13
6.	Cinética de reacción	15
7.	Balance de materia	17
8.	Masa necesaria de catalizador.....	21
8.1.	Resultados de la hoja de cálculo.....	23
9.	Balance de Energía	25
10.	Dimensiones del Reactor.....	28
10.1.	Diseño de los tubos	29
10.1.1.	Caída de presión en el lado de los tubos	32
10.1.2.	Coefficiente de convección en el lado de los tubos.....	33
10.2.	Diseño de la carcasa	34
10.2.1.	Coefficiente de convección en el lado de la carcasa.....	38
10.2.2.	Caída de presión en la carcasa.....	40
10.3.	Verificación del coeficiente global de convección.....	41
11.	Diseño mecánico del reactor R-201.....	43
11.1.	Presión y temperatura de diseño	43
11.2.	Selección del material de construcción.....	43
11.3.	Cálculo de los espesores de la carcasa y tubos.....	44
11.4.	Cabezales	44
11.5.	Dimensionado del aislante	45
11.6.	Aberturas y conexiones.....	47
11.7.	Análisis de cargas.....	47
11.7.1.	Cargas por peso.....	48
11.7.2.	Cargas por viento.....	49
11.8.	Análisis de esfuerzos	49
11.8.1.	Esfuerzos primarios.....	49
11.8.2.	Esfuerzos principales.....	50
11.8.3.	Esfuerzos máximo permisible	50
11.9.	Soporte del equipo.....	51
12.	Válvula de alivio PSV-203	51
13.	Hoja de especificaciones del equipo	53
14.	Bibliografía	54

1. Introducción

Todo proceso químico consiste en una serie de operaciones unitarias consecutivas encargadas de transformar las materias primas en el producto deseado. En estos procesos el diseño de cada equipo involucrado es importante a fin de garantizar la eficiencia y la rentabilidad de la producción. Sin embargo, el equipo que define la economía de un proyecto es el reactor.

El reactor se considera el corazón del proceso, al ser el único equipo encargado de la elaboración del producto. El diseño de este equipo, a diferencia del de los demás, no puede hacerse mediante un método directo, sino que está regido por los requerimientos de la reacción (1).

En la producción de la acroleína, la reacción química que determina el diseño del reactor es la transformación del propileno. Este último puede reaccionar formando diversos compuestos además de la acroleína, como lo son el ácido acrílico, el acetaldehído, entre otros. Los compuestos obtenidos dependerán de las características del catalizador de la reacción, por lo que se debe seleccionar un catalizador con una alta actividad y selectividad hacia la acroleína. Además, debe considerarse que las reacciones catalíticas heterogéneas son de las más complejas, pero las mismas son importantes debido a su frecuente empleo en los procesos industriales (2).

La Figura 1 muestra las rutas de reacción en la oxidación parcial del propileno en presencia de molibdato de bismuto, el catalizador de mayor uso en la industria. Se observa que la oxidación engloba muchas reacciones en paralelo y consecutivo (11 en total), lo que evidencia la importancia de controlar la generación de subproductos (3).

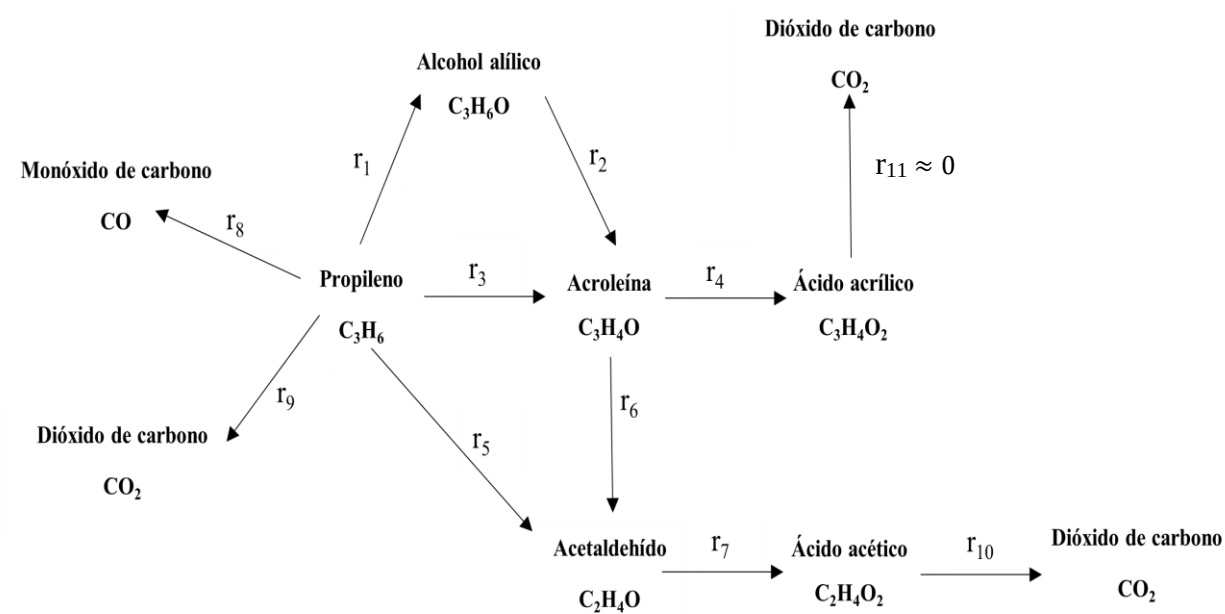


Figura 1. Rutas de reacción presentes en la oxidación parcial del propileno. Elaboración propia, adaptada de (3).

Para la obtención de acroleína, se ha demostrado que el propileno se transforma inicialmente en un complejo alilo mediante la abstracción de hidrógeno en la superficie del catalizador. La formación de este compuesto intermedio ha sido reconocida como la etapa limitante de la oxidación del propileno. Sin embargo, después de esta etapa lenta ocurre una incorporación rápida del átomo de oxígeno en el complejo alilo, seguido por una segunda etapa de abstracción de hidrógeno. Estos pasos se resumen en la ruta r_3 de la Figura 1 (3).

La acroleína no se forma solo por la oxidación directa del propileno, sino que se obtiene también de la oxidación del compuesto intermedio alcohol alílico, como se muestra en las reacciones r_1 y r_2 . Cabe destacar que el alcohol alílico reacciona para formar acroleína con una elevada selectividad, por lo que su presencia a la salida del reactor es nula (3).

Uno de los subproductos principales es el ácido acrílico, pero su reacción puede contradecirse en distintos estudios. Esto se debe a que algunos consideran que su reacción es paralela del propileno, consecutiva de la acroleína, o ambas a la vez. No obstante, se ha demostrado que al operar a bajas temperaturas la conversión del propileno es baja, y la formación del ácido acrílico se inhibe casi completamente. Lo anterior se interpreta como dependencia a la formación de acroleína, y se considera exclusivamente como reacción consecutiva (3).

Por otro lado, tanto el dióxido como el monóxido de carbono son subproductos de desecho, pero presentan una gran importancia en la sostenibilidad de la planta. Es por ello que el reactor se diseña buscando disminuir la formación de estos compuestos, que son principalmente obtenidos mediante las reacciones paralelas de propileno (r_8 y r_9). Estas reacciones ocurren debido a la combustión completa del propileno, donde la temperatura y el catalizador desempeñan un papel crucial, como se explicará más adelante en el apartado 3. *Mecanismo de reacción* (3-4).

Otro subproducto importante es el de acetaldehído, cuya formación tiene lugar mediante la ruptura del doble enlace de carbono en el propileno durante la oxidación, tal como se muestra en la ruta r_5 . En el sistema una pequeña parte de acetaldehído también se forma por la oxidación adicional de la acroleína, ruta r_6 . El acetaldehído a su vez puede transformarse en ácido acético, y este en dióxido de carbono. Sin embargo, debido a la alta selectividad hacia la acroleína, estos compuestos aparecen en trazas despreciables.

Cabe destacar que, si se trabaja a temperaturas muy elevadas, la oxidación de los compuestos hacia óxidos de carbono deja de ser despreciable, por lo que las reacciones r_{10} y r_{11} tendrían que considerarse. No obstante, se trabajará en condiciones óptimas para poder despreciarlos. Actualmente no existen unas condiciones exactas para la operación del reactor, pero se conocen rangos típicos que varían entre 250-400 °C y 1,5 a 2,4 bar. En el apartado 5. *Selección de las condiciones de operación* se mostrarán las condiciones a las que se verá sometido el reactor para optimizar la producción de acroleína (5).

Igualmente, en el diseño del reactor no se tomará en cuenta la formación del alcohol alílico, como compuesto intermedio, para simplificar el sistema, ya que este compuesto está presente a niveles de trazas. Con el mismo razonamiento, se despreciarán las reacciones que r_6 , r_{10} y r_{11} , dado que tienen muy baja selectividad y no implican un cambio significativo en el sistema. Con todas estas consideraciones, el sistema de reacción que será estudiado en detalle se muestra en la Figura 2.

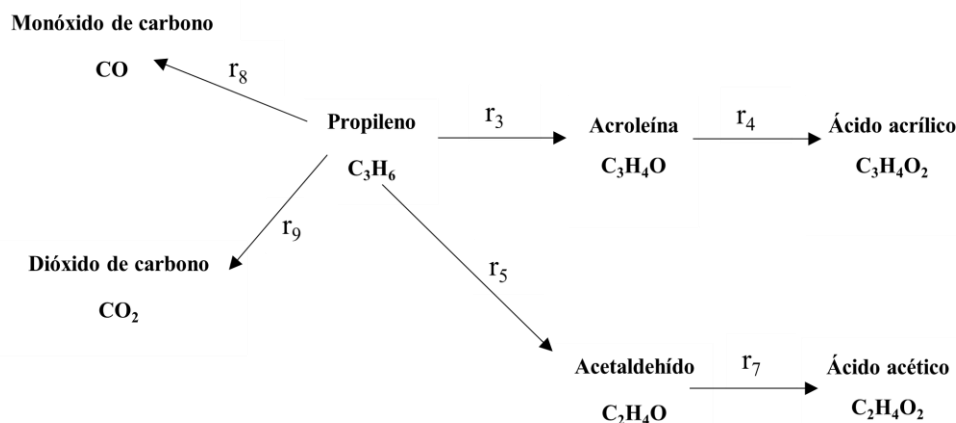


Figura 2. Reacciones a partir de la oxidación del propileno que serán consideradas para el diseño del reactor.
Elaboración propia, adaptada de (3).

En los siguientes apartados se justificará la selección del catalizador y la configuración del reactor, así como las condiciones de operación. Se presentará además los cálculos necesarios para dimensionar y diseñar el reactor y una descripción más detallada del mecanismo de reacción.

2. Catalizador seleccionado y sus propiedades

Por definición, un catalizador es una sustancia que, en pequeñas proporciones, cambia la velocidad de una reacción sin afectar la termodinámica de la misma. En un principio se sostenía que el catalizador no se veía afectado en la reacción y por tanto no sufría cambios. Sin embargo, esta es una definición muy optimista que difiere de la realidad, puesto que industrialmente se ha demostrado que con el tiempo los catalizadores cambian su estructura, actividad y selectividad (2).

Actualmente se afirma que el catalizador aumenta la velocidad para alcanzar el equilibrio químico sin sufrir cambios químicos en el proceso. El catalizador consigue aumentar la velocidad de reacción reduciendo la energía de activación necesaria que debe superarse para formar los productos. Dado que la energía de activación es como una barrera que hay que superar para que se produzca la reacción, a menor energía de activación más rápida es la reacción (2).

Para la oxidación de propileno a acroleína es fundamental emplear un catalizador que active el hidrocarburo a temperaturas relativamente bajas. Esto se hace para evitar la combustión total, la cual puede convertirse en un problema debido a que los enlaces del propileno son más fuertes que algunos productos intermedios. Lo anterior propicia que el catalizador cree una tendencia a oxidar los productos intermedios hasta productos de la combustión total, dando lugar a los óxidos de carbono (4).

Por consiguiente, para evitar que los productos continúen oxidándose, se requiere un catalizador con interacciones débiles con el producto deseado y con una desorción rápida de los productos.

Antiguamente la acroleína era obtenida mediante la oxidación del propileno utilizando óxido cuproso como catalizador. Sin embargo, desde 1959 con el descubrimiento de SOHIO de las propiedades catalíticas del molibdato de bismuto, este se ha convertido en el catalizador más empleado industrialmente (2).

La base de estos catalizadores consta de un sistema binario de Bi y Mo, siendo los más destacados aquellos que poseen un relación atómica Bi/Mo de 2 a 2/3. Las estructuras más destacadas son α -Bi₂Mo₃O₁₂, β -Bi₂Mo₂O₉ y γ -Bi₂MoO₆. Todas ellas son descritas como activas y selectivas para la oxidación parcial de propileno, aunque α -Bi₂Mo₃O₁₂ parece ser no solo más activa y selectiva, sino también más estable (2).

A pesar de la abundancia de investigaciones, muchos modelos propuestos son de aplicabilidad limitada, y encontrar las condiciones que optimizan el proceso sigue siendo un desafío. La mayor dificultad se debe a la complejidad de la red de reacciones, el calor generado y el alto dinamismo del sistema catalítico (3).

Es por lo anterior que, aunque la introducción de los catalizadores de molibdato de bismuto data de hace 50 años, aún se desarrollan estudios para su mejora. La adición de otros compuestos como el potasio y el sodio presenta ciertas ventajas como mejorar la adsorción de olefinas y la desorción de productos. Asimismo, el hierro, el cobalto y níquel permiten aumentar la actividad del catalizador. Todos estos compuestos son empleados como promotores en bajos porcentajes, y la mayor selectividad se consigue empleando óxido de metal multicomponente. De este último se encuentran algunos ejemplos en el apartado 7.5 *Selección del catalizador* del Documento I: Memoria (4-5).

Dado que pequeños cambios en la actividad del catalizador pueden conllevar un gran impacto económico, se seleccionó el catalizador más empleado comercialmente: molibdato de bismuto multicomponente soportado en alúmina. Este catalizador, en patentes recientes, ha propiciado altos valores de selectividad; además, es el utilizado en el estudio del cual se emplearán las cinéticas (3,6-7).

El catalizador seleccionado puede encontrarse en la industria como *pellets* cilíndricos o pequeños sólidos esféricos. Para este diseño y siguiendo el estudio de las cinéticas, se optó por partículas esféricas con un diámetro de 4,5 mm. Por otro lado, debido a que los reactivos entran al reactor en fase gaseosa, la reacción catalítica es heterogénea. Unido a ello, al tratarse de un reactor de flujo en pistón con configuración de carcasa y tubos (selección justificada en el apartado 4. *Selección del tipo de reactor y su configuración*), se tiene como referencia las heurísticas, que para estos casos recomiendan catalizadores con diámetros entre 2 y 5 mm (8). De tal forma, se validó el diámetro obtenido en el estudio de la cinética.

Sin embargo, no se han encontrado todos los datos específicos para este catalizador, por lo que se han estimado utilizando los datos de las patentes US 4,129,600 y US 2002/0136678A1.

La bibliografía también ofrece rangos típicos para la densidad aparente del lecho (ρ_L), la porosidad del lecho (ε_L) y la densidad del sólido catalizador (ρ_s). Esto permitió confirmar que los valores seleccionados se encontraban en rangos aceptables (6-7, 9).

Con estos datos es posible estimar la porosidad de las partículas del catalizador (ε_p), mediante la Ecuación [1].

$$\rho_L = \rho_s \cdot (1 - \varepsilon_L) \cdot (1 - \varepsilon_p) \quad [1]$$

Una vez calculada la porosidad del catalizador, esta fue comparada con las porosidades usuales, y el resultado fue aceptado. Otro parámetro importante del catalizador es su superficie específica. Se ha demostrado que superficies específicas menores a 3 m²/g disminuyen notoriamente la conversión, mientras que superficies específicas mayores a 15 m²/g producen más CO y CO₂, afectando negativamente a la economía del proceso (6).

En la Tabla 1 se recogen todas las características del catalizador empleado.

Tabla 1. Propiedades del catalizador empleado en el reactor R-201.

Propiedad	Valor
Diámetro de la partícula, d_p (mm)	4,50
Densidad aparente del lecho, ρ_L (kg/m ³)	920,00
Densidad del sólido, ρ_s (kg/m ³)	5.670,00
Superficie específica, a_p (m ² /g)	9,00
Tortuosidad, τ_p	1,51
Porosidad del lecho, ε_L	0,66
Porosidad del catalizador, ε_p	0,52
Esfericidad, ϕ	1,00

3. Mecanismo de reacción

Puesto que entender la reacción de oxidación parcial del propileno es fundamental para el rendimiento del proceso, durante los últimos 50 años el mecanismo de esta reacción ha sido tema de estudio. Siendo la variedad de productos que derivan de la acroleína, como la metionina, el principal motivo para que dichas investigaciones continúen y sea posible conocer de forma precisa la reacción (3).

Afortunadamente, un aspecto que las extensas investigaciones han revelado con detalle son los pasos elementales de la oxidación parcial. Esta oxidación en catalizadores de molibdato de bismuto sigue el mecanismo propuesto por Mars-van Krevelen. El primer paso es la absorción del propileno en el catalizador, seguido por la abstracción del hidrógeno del propileno formando un complejo alílico en la superficie del catalizador. En el segundo paso se incorpora una especie de oxígeno activo del catalizador, llamado oxígeno reticular, a la especie alílica. Esto implica una pérdida de oxígeno en el catalizador que debe reoxidarse mediante el fluido gaseoso. Finalmente, en el tercer paso ocurre la segunda abstracción de hidrógeno (3).

El primero de los pasos anteriores, la abstracción del hidrógeno, es generalmente aceptado como el limitante en la reacción. Dicha noción es apoyada por todos los documentos encontrados en la bibliografía. Sin embargo, en apartados posteriores se expondrán los cálculos para demostrar que no hay limitaciones por difusión interna o externa.

Durante la oxidación del propileno el catalizador se reduce, ocasionando que el oxígeno abandone la red y genere vacantes. Este oxígeno de la red puede ser sustituido por el oxígeno que se encuentra en el fluido gaseoso.

Por otro lado, cabe destacar que existen dos tipos de iones de oxígeno: el electrofílico y el nucleófilo. El oxígeno nucleófilo es el responsable de la oxidación selectiva del propileno para dar acroleína, pues ataca a la molécula de propileno donde hay mayor densidad de electrones. Esto produce la especie π -alílica simétrica (paso limitante), y la adición posterior del oxígeno permite producir la acroleína. El oxígeno electrofílico corresponde a las siguientes especies iónicas: el superóxido (O_2^-), el peróxido (O_2^{2-}) y el óxido (O^-), responsables de la formación de los productos de la combustión total. Esto es relevante cuando se seleccionan las condiciones de operación, dado que a elevadas temperaturas la superficie del catalizador posee mayoritariamente iones electrofílicos, aumentando la producción de CO y CO₂ (4).

La probabilidad de formar las especies de iones electrofílicos disminuye si se emplean óxidos cuyo catión metálico se encuentre en su nivel de oxidación más elevado. La Figura 3 representa la transformación del oxígeno gaseoso al oxígeno de la red del catalizador (2,4).

Por consiguiente, el catalizador es reducido constantemente y luego se reoxida mediante el oxígeno gaseoso, siendo el mecanismo de reducción y reoxidación, comúnmente conocido como redox. Sin embargo, el mecanismo de Mars-van Krevelen expone que se transfieren protones y electrones entre el propileno y el catalizador, requiriendo que el catalizador no solo tenga propiedades redox apropiadas, sino también las propiedades convenientes de ácido-base (2).

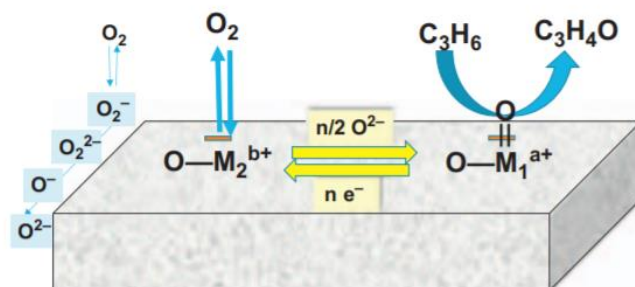


Figura 3. Representación del mecanismo redox de Mars- van Krevelen de la reacción (2).

En la Figura 4 se muestran las principales características del mecanismo de la reacción. Se puede observar que siguen los pasos mencionados anteriormente:

- 1 Abstracción del hidrógeno para formar el compuesto alílico, ocurre en los centros del Bi.
- 2 Adición del oxígeno formando el compuesto π -alilo, adsorción en los centros del Mo de di-oxo.
- 3 Segunda abstracción de hidrógeno, que ocurre en los sitios del Mo.
- 4 Reoxidación de los sitios Bi y Mo reducidos.

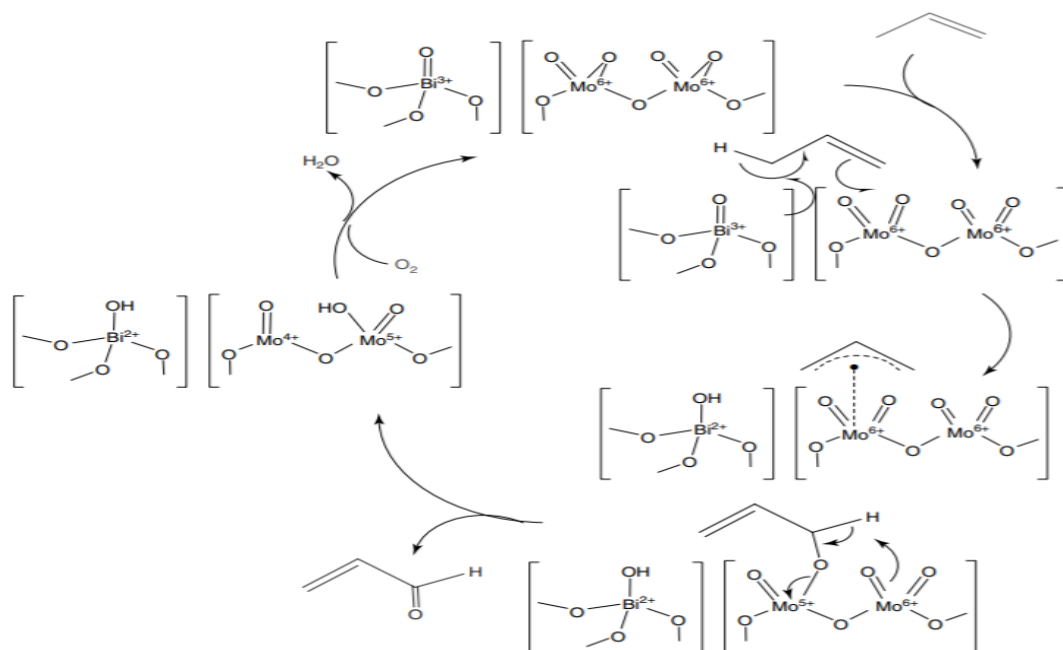


Figura 4. El mecanismo de oxidación del propileno a acroleína en catalizadores BiMoO (10).

Dado que en estos catalizadores la oxidación, reducción y reoxidación de la superficie ocurren simultáneamente, diversos estudios han tratado de ubicar los lugares concretos responsables de cada

una de las etapas en el mecanismo. De tal manera, se ha estimado la presencia de distintos centros activos, unos completamente oxidados y otros reducidos. En los pasos anteriores se especificó en donde estos tienen lugar. Asimismo, la Figura 5 muestra la representación de los centros activos de los catalizadores BiMoO , así como su función según su estructura (3,10).

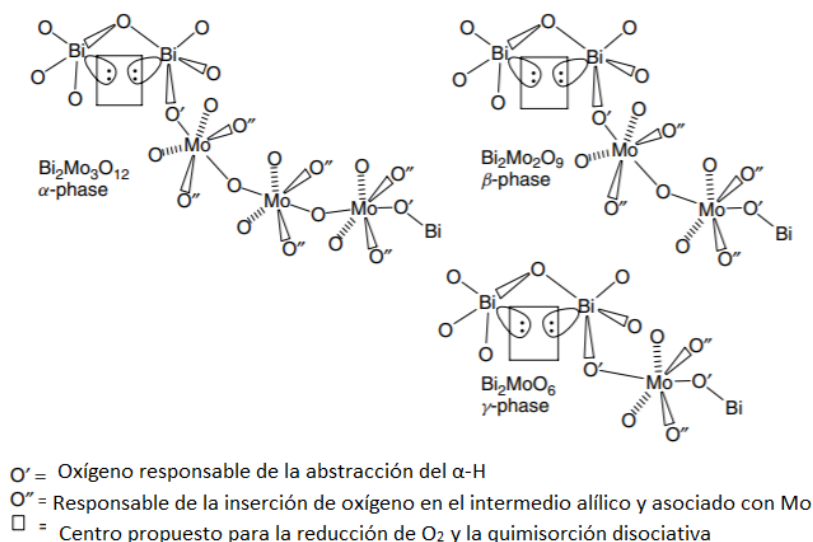


Figura 5. Representación de los centros activos en distintas estructuras del catalizador. Adaptado de (10).

Sin embargo, se asumirá que solo hay un sitio activo donde ocurre el proceso de oxidación para las distintas reacciones, dado que así fue supuesto en el estudio para la obtención de las ecuaciones cinéticas del modelo que será empleado en este proyecto (3).

Por otro lado, para el óptimo diseño del equipo es fundamental corroborar la etapa limitante, puesto que esta determina la velocidad de reacción global. Las reacciones catalíticas siguen una secuencia de siete pasos que son mostrados en la Figura 6.

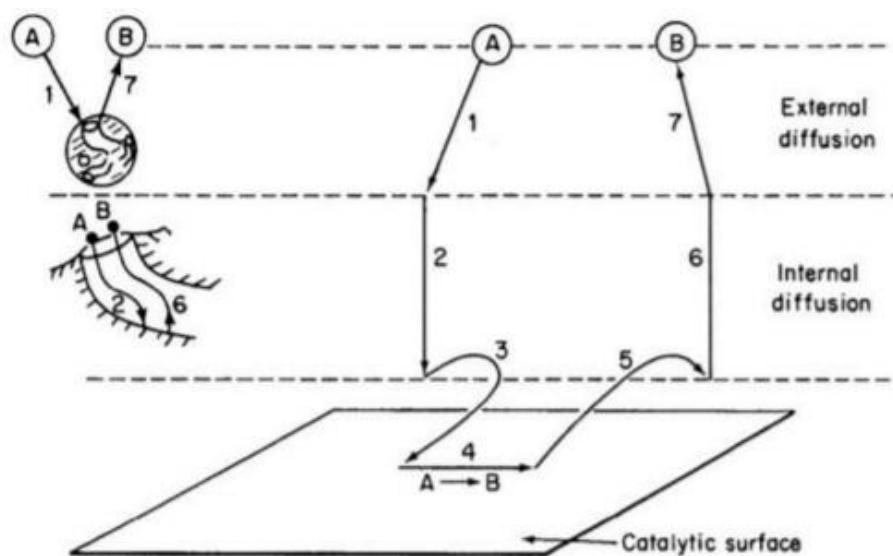


Figura 6. Los distintos pasos presentes en las reacciones catalíticas heterogéneas (11).

Este ejemplo muestra una reacción de un reactante A para dar un producto B. La misma empieza en el paso 1, donde ocurre la difusión del reactivo desde el fluido hasta la superficie externa del catalizador. Posteriormente en el paso 2, el reactivo debe difundirse hasta la superficie interna del catalizador, atravesando el poro. El paso 3 hace referencia a la adsorción del reactivo en la superficie, y en el paso 4 ocurre la reacción para producir B en la superficie del catalizador. Una vez formado el producto, este se debe devolver al fluido, empezando por el paso 5, la desorción en la superficie del catalizador. Seguidamente, en el paso 6 ocurre la difusión del producto desde la parte interna del catalizador hasta la boca del poro. Por último, en el paso 7, el producto pasa del exterior del catalizador hasta el seno del fluido (11).

Se observa que los pasos son clasificados en 3 tipos: difusión externa con transferencia de materia, difusión interna, y superficie catalítica. El paso 4, que corresponde a la reacción en la superficie catalítica, es ampliamente aceptado como etapa limitante. Sin embargo, se empleará el criterio de Weisz-Prater para estimar si debe considerarse la limitación por difusión interna, y el criterio de Mears para la influencia en la difusión externa (3).

3.1. Difusión interna en el catalizador

Para poder considerar que no hay ninguna limitación debido a la difusión interna, el documento adicional del estudio de la cinética advierte que se debe satisfacer la Ecuación [2] (3).

$$\frac{r^{obs} \cdot d_p^2}{4 \cdot (1 - \varepsilon_L) \cdot D_{pp,Aire} \cdot \frac{\varepsilon_p}{\tau_p} \cdot c_{pp}} \leq 1 \quad [2]$$

Donde:

- r^{obs} es la velocidad de reacción efectiva relacionada con el volumen, en mol/ (m³·s).
- d_p es el diámetro del catalizador, en m.
- ε_L es la porosidad del lecho.
- $D_{pp,Aire}$ es el coeficiente de difusión, en m²/ s.
- ε_p es la porosidad del catalizador.
- τ_p es la tortuosidad del catalizador.
- c_{pp} es la concentración del propileno en la corriente gaseosa, en mol/m³.

Los datos del catalizador fueron mostrados en el apartado 2.Catalizador seleccionado y sus propiedades, mientras que r^{obs} ha sido calculada, siguiendo los pasos bibliográficos, como el valor más elevado de la velocidad de reacción de la acroleína multiplicado por la densidad del lecho. Por lo tanto, se está asumiendo que solo está teniendo lugar la reacción de propileno a acroleína. Asimismo, la concentración del propileno será presentada más adelante en el apartado 7.Balance de materia (3).

El coeficiente de difusividad fue calculado y a la vez comparado con el obtenido de una tesis doctoral. Para calcularlo se ha empleado la fórmula de Hirschfelder-Bird-Spotz que se muestra en la Ecuación [3] (12-13).

$$D_{pp,Aire} = \frac{18,583 \cdot 10^{-4} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{M_1 + M_2}{M_1 \cdot M_2}\right)^{0,5}}{P \cdot \sigma_{pp,Aire}^2 \cdot \Omega} \quad [3]$$

Como se puede observar el coeficiente de difusividad depende de la presión (P en *bar*) y temperatura (T en K) de operación, los pesos moleculares (M_1, M_2 en g/mol), el diámetro de colisión ($\sigma_{pp,Aire}$ en Å) y la integral de colisión (Ω).

Para la obtención del diámetro de colisión y la integral de colisión se emplearon las constantes de fuerza de Lennard-Jones tabuladas, así como las Ecuaciones [4] y [5].

$$\sigma_{pp,Aire} = \frac{\sigma_{pp} + \sigma_{Aire}}{2} \quad [4]$$

$$\frac{\epsilon_{pp,Aire}}{k_B} = \sqrt{\frac{\epsilon_{pp}}{k_B} \cdot \frac{\epsilon_{Aire}}{k_B}} \quad [5]$$

Siendo k_B la constante de Boltzmann ($1,38 \cdot 10^{-16}$ en ergs/K) y $\epsilon_{pp,Aire}$ la energía característica en ergio. Los valores de ϵ_{pp}/k_B y ϵ_{Aire}/k_B son sacados de tablas, al igual que el diámetro de colisión. Posteriormente, con el valor calculado en la Ecuación [5], se emplean en la Ecuación [6] para calcular la temperatura adimensional.

$$T^* = \frac{T}{\epsilon_{pp,Aire}/k_B} \quad [6]$$

Finalmente, la integral de colisión se consigue de la Figura 7, ubicando la temperatura adimensional calculada.

$\frac{kT}{\epsilon_{12}}$	Ω_D	$\frac{kT}{\epsilon_{12}}$	Ω_D	$\frac{kT}{\epsilon_{12}}$	Ω_D
0.30	2.662	1.65	1.153	4.0	0.8836
0.35	2.476	1.70	1.140	4.1	0.8788
0.40	2.318	1.75	1.128	4.2	0.8740
0.45	2.184	1.80	1.116	4.3	0.8694
0.50	2.066	1.85	1.105	4.4	0.8652
0.55	1.966	1.90	1.094	4.5	0.8610
0.60	1.877	1.95	1.084	4.6	0.8568
0.65	1.798	2.00	1.075	4.7	0.8530
0.70	1.729	2.1	1.057	4.8	0.8492
0.75	1.667	2.2	1.041	4.9	0.8456
0.80	1.612	2.3	1.026	5.0	0.8422
0.85	1.562	2.4	1.012	6	0.8124
0.90	1.517	2.5	0.9996	7	0.7896
0.95	1.476	2.6	0.9878	8	0.7712
1.00	1.439	2.7	0.9770	9	0.7556
1.05	1.406	2.8	0.9672	10	0.7424
1.10	1.375	2.9	0.9576	20	0.6640
1.15	1.346	3.0	0.9490	30	0.6232
1.20	1.320	3.1	0.9406	40	0.5960
1.25	1.296	3.2	0.9328	50	0.5756
1.30	1.273	3.3	0.9256	60	0.5596
1.35	1.253	3.4	0.9186	70	0.5464
1.40	1.233	3.5	0.9120	80	0.5352
1.45	1.215	3.6	0.9058	90	0.5256
1.50	1.198	3.7	0.8998	100	0.5130
1.55	1.182	3.8	0.8942	200	0.4644
1.60	1.167	3.9	0.8888	400	0.4170

Figura 7. Valores de la integral de colisión para distintos valores de temperatura adimensional (14).

Todos los parámetros tabulados que han sido empleados, así como los resultados de los cálculos, son mostrados en la Tabla 2.

Tabla 2. Parámetros empleados para el cálculo del coeficiente de difusión con sus respectivos valores.

Parámetro	Valor
Velocidad de reacción efectiva, r^{obs} [mol/(m ³ ·s)]	5,36
Diámetro de colisión del propileno, σ_{pp} (Å)	4,68
Diámetro de colisión del aire, σ_{Aire} (Å)	3,71
Diámetro de colisión de la mezcla, $\sigma_{pp,Aire}$ (Å)	4,19
ϵ_{pp} / k_B (K)	298,90
ϵ_{Aire} / k_B (K)	78,60
$\epsilon_{pp,Aire} / k_B$ (K)	153,28
Temperatura de operación, T (K)	350,00
Temperatura adimensional, T^*	4,10
Integral de collision, Ω	0,88
Peso molecular del propileno, M_1 (g/mol)	42,08
Peso molecular del aire, M_2 (g/mol)	28,96
Presión de operación, P (bar)	2,00
Coeficiente de difusión, $D_{pp,Aire}$ (cm ² /s)	0,99
Concentración del propileno, c_{pp} (mol/m ³)	3,60

Asimismo, para verificar que el coeficiente de difusión del propileno y aire calculado corresponde con los obtenidos con datos experimentales, se optó por emplear la Ecuación [7] para extrapolar un valor de dicha difusividad teniendo como referencia el encontrado en una tesis a distinta temperatura de operación (11).

$$D_2 = D_1 \cdot \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{0,5} \quad [7]$$

El coeficiente de difusividad se obtuvo a 400 °C con un valor de 0,64 cm²·s⁻¹. Se obtiene por lo tanto un valor del coeficiente, a la temperatura de operación, de 0,61 cm²·s⁻¹. El valor difiere del calculado por lo que se realizará la verificación de la Ecuación [2] con ambos para asegurar que de igual forma se cumpla la restricción (12).

Los resultados evaluados en la Ecuación [2] se muestran a continuación:

$$0,65 \leq 1$$

$$1,05 \leq 1$$

Como se puede observar con el coeficiente calculado, que se muestra primero, se cumple perfectamente la restricción mientras que empleando el coeficiente de difusividad extrapolado se infringe levemente. Dado que los valores de diámetro de colisión, así como la integral de colisión puede variar ligeramente según la bibliografía empleada y los resultados experimentales, y los resultados obtenidos no difieren mucho del permitido, se asumirá despreciable la limitación interna del catalizador.

Se concluye por lo tanto que la difusión interna no limita la reacción y se prosigue con la comprobación de la influencia de la difusión externa.

3.2. Difusión externa en el catalizador

Para poder despreciar la influencia de la difusión externa en la reacción y certificar que no es la etapa limitante se debe cumplir, siguiendo el criterio de Mears, la Ecuación [8] (3).

$$\frac{r^{obs} \cdot d_p}{2 \cdot (1 - \varepsilon_L) \cdot k_g \cdot c_{pp}} < 0,15 \quad [8]$$

Como se puede observar el único parámetro adicional que se debe considerar es k_g , que es el coeficiente de transferencia de masa en $m \cdot s^{-1}$. Este parámetro será calculado mediante la Ecuación [9].

Para ello primero será necesario emplear la correlación de Schmidt, Sc , y el número de Reynolds, Re_p , que se muestran en las Ecuaciones [11] y [12]. Posteriormente, los valores obtenidos se sustituyen, para determinar la correlación de Sherwood, Sh_p , en la Ecuación [10]. Finalmente, con el valor de la correlación de Sherwood, en la Ecuación [9] se despeja el valor de k_g (3).

$$Sh_p = \frac{k_g \cdot d_p}{D_{pp,Aire}} \quad [9]$$

$$\varepsilon_L \cdot Sh_p = 0,357 \cdot Re_p^{0,641} \cdot Sc^{0,33} \quad [10]$$

$$Sc = \frac{\mu_f}{D_{pp,Aire} \cdot \rho_f} \quad [11]$$

$$Re_p = \frac{v_o \cdot d_p \cdot \rho_f}{\mu_f} \quad [12]$$

Siendo:

- μ_f la viscosidad dinámica de la mezcla gaseosa, en Pa·s.
- ρ_f la densidad de la mezcla gaseosa, en $kg \cdot m^{-3}$.
- v_o la velocidad superficial de la mezcla gaseosa, en m/s

Los valores de densidad y viscosidad fueron obtenidos mediante el programa *Hysys* mientras que, la velocidad es calculada como el cociente del flujo volumétrico que pasa por uno de los tubos del reactor entre su sección transversal. Para la velocidad se requiere conocer por lo tanto el diámetro de los tubos y el flujo de paso que será mostrada más adelante, y se calcula empleando la Ecuación [54]. Estos valores se muestran junto con los resultados de las correlaciones calculadas en la Tabla 3.

Tabla 3. Parámetros y resultados necesarios para verificar el criterio de Mears.

Parámetro	Valor
Viscosidad dinámica de la mezcla gaseosa, μ_f (Pa·s)	$3,06 \cdot 10^{-5}$
Densidad de la mezcla, ρ_f (kg/m^3)	1,10
Velocidad, v_o (m/s)	1,78
Schmidt, Sc	0,28
Número de Reynolds, Re_p	287,58
Sherwood, Sh_p	13,40
Coeficiente de transferencia de materia, k_g (m/s)	0,29

Con todos los parámetros calculados es posible volver a la Ecuación [8] y verificar que la difusividad externa no limita la reacción, el resultado se muestra a continuación:

$$0,03 < 0,15$$

Cabe destacar, que este valor, así como los resultados de la Tabla 3 fueron obtenidos empleando el valor del coeficiente de difusividad calculado. Asimismo, también se realizaron los cálculos usando el coeficiente extrapolado sin embargo en este caso la diferencia fue insignificante. Concretamente, con el calculado se obtuvo el valor de 0,033 mientras que con el extrapolado el valor fue de 0,046 para el criterio de Mears.

Se concluye por lo tanto que ninguno de los pasos de difusión limita en la reacción para la producción de acroleína. Los resultados coinciden con los resultados expuestos en la bibliografía donde se pueden encontrar resultados experimentales que demuestran que la etapa limitante es la reacción química.

4. Selección del tipo de reactor y su configuración

Normalmente para las reacciones catalíticas heterogéneas son usados los reactores de lecho fijo, siendo estos mismos los más empleados industrialmente para la producción de la acroleína a partir del propileno. Sin embargo, el control de la temperatura en los reactores de lecho fijo suele presentar mayor dificultad, y al tratarse de una reacción exotérmica ha de incluir un sistema de refrigeración adecuado (5).

Por otro lado, este tipo de reactor ofrece una mayor conversión por peso de catalizador que cualquier otro al tratarse de reacciones catalíticas. Presenta además la ventaja de ser práctico, con construcción económica y fácil de mantener. Son muchas las empresas que utilizan este tipo de reactor para la producción de acroleína como son BASF, Degussa, Mitsubishi Chemical Corporation en Japón y Mitsubishi Rayon Co. Ltd. entre otros (5).

Por otra parte, se podría considerar el reactor de lecho fluidizado que también es empleado en sistemas catalíticos y no presenta problemas de uniformidad en la temperatura del reactor. Sin embargo, son más caros de construir y presenta dificultad en el diseño, dado entre otras cosas a pérdidas en el ciclón. Siendo además el diámetro de las partículas catalizadoras un parámetro importante para que haya fluidización, habría que considerar partículas con diámetros inferiores. Para un reactor fluidizado aproximadamente el diámetro debería ser 0,1 mm según heurísticas, mientras que el diámetro típico para el catalizador que se emplea en el presente proyecto es mucho mayor (5,8).

La heurística también recomienda el uso de reactores de lecho fijo con la configuración de carcasa y tubo cuando es necesario una elevada transferencia de calor. Por lo tanto, dado que la reacción es altamente exotérmica, siguiendo la heurística y los ejemplos industriales encontrados, se opta por realizar el diseño del reactor como un reactor de lecho fijo multitubular con intercambio de calor. Un ejemplo de este equipo es mostrado en la Figura 8 (2,8).

Esta configuración permite emplear un fluido refrigerante para mantener la reacción controlada mientras el fluido gaseoso reacciona con el catalizador en los distintos tubos. Cabe destacar, que el contacto continuo entre el refrigerante y el fluido reaccionante en los tubos es lo que permite operar con un perfil de temperaturas lo más constante posible (15).

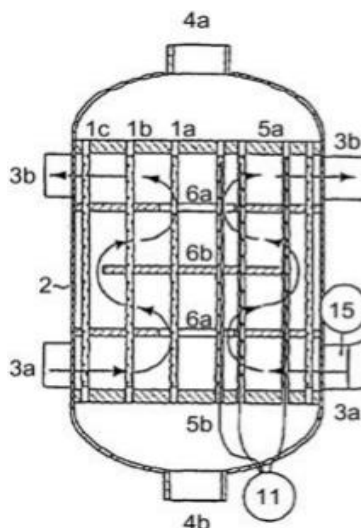


Figura 8. Ejemplo de un reactor con la configuración de carcasa y tubos (2).

La temperatura constante presenta una gran ventaja frente a la otra configuración factible, que es el reactor con enfriamiento por inyección fría. En este tipo de reactores se trabaja con múltiples lechos separados por zonas de enfriamiento. Aunque igualmente se esté intercambiando calor en el reactor, este presenta importantes fluctuaciones de temperatura lo que puede conllevar a un sobrecalentamiento accidental, afectando en el peor caso la seguridad del proceso, o de ser en menor medida la vida útil del catalizador (15).

Respecto al diseño del reactor seleccionado, existen muchas variaciones, por lo que se pueden encontrar distintas patentes según la empresa que lo diseñe. Estas diferencias suceden más que nada debido al compromiso al que se debe llegar entre diámetros, longitud de los tubos o número de tubos para mejorar el proceso sin aumentar el coste ni poner en riesgo el mismo. Por ejemplo, se recomiendan tubos con diámetros pequeños para mejorar el área de transferencia de calor sin embargo esto conlleva a un mayor número de tubos y por lo tanto un mayor coste de inversión. Por otro lado, si se aumenta la longitud de los tubos se puede disminuir la cantidad de estos, pero aumentaría la caída de presión y se favorecería la oxidación total de algunos compuestos (2).

Se tratará por tanto el diseño del reactor como un método iterativo en el apartado 10. *Dimensiones del Reactor*, tomando en cuenta las dimensiones estándares y típicas en la industria y procurando llegar a un compromiso entre estos parámetros para optimizar el proceso.

5. Selección de las condiciones de operación

Se examinarán en este apartado la temperatura y la presión de operación, así como las concentraciones de entrada de los reactivos al reactor que permitan la producción de acroleína más eficiente.

Respecto a la temperatura se debe trabajar de forma que se pueda superar la energía de activación requerida, pero sin llevar la reacción fuera de control.

Es importante resaltar que se recomienda no superar los 405 °C en el reactor para evitar justo una explosión térmica (*runaway*) y la sinterización del catalizador. Asimismo, como se mencionó en el apartado 3. *Mecanismo de reacción* a mayor temperatura se consigue una mayor oxidación promoviendo la formación de óxidos de carbono (16).

Industrialmente la temperatura típica de operación se encuentra entre 250 y 400 °C, y dado que se trata de una reacción altamente exotérmica, se ha optado por operar de forma isotérmica, retirando el calor generado por la reacción mediante una configuración semejante a un intercambiador de calor. Concretamente, el estudio que obtuvo el modelo cinético recomienda la operación entre aproximadamente 320 y 375 °C. Empleando en el estudio una temperatura de 350 °C. Para visualizar como afecta la temperatura de operación al reactor se optó por el uso del programa de *Aspen Hysys*, con el objetivo de ver a la temperatura se maximizar la producción de acroleína (3).

En la Figura 9 se muestra el resultado del *Case Study*, donde se observa la cantidad de acroleína producida a distintas temperaturas de operación. Como se puede contemplar, se consigue una mayor producción de acroleína al trabajar a una temperatura de 350 °C. Los resultados obtenidos concuerdan con los esperados, mostrando una disminución de la acroleína a mayores temperaturas debido a la combustión total de los compuestos.

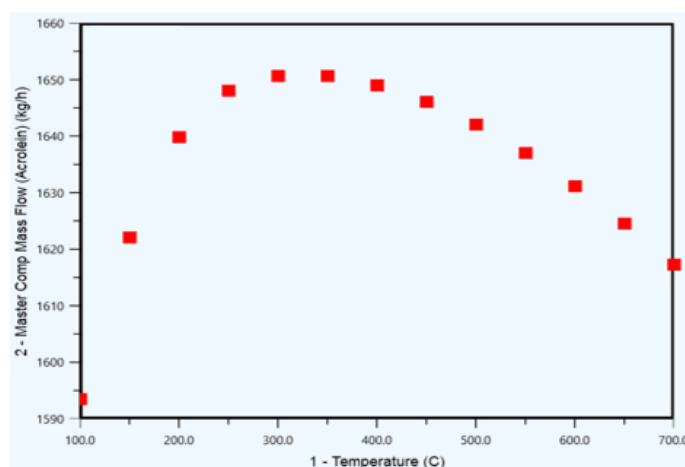


Figura 9. Caso de estudio en Hysys que muestra la cantidad de acroleína obtenida según la temperatura de operación.

Asimismo, empleando la herramienta *Excel* y las velocidades de reacción del ácido acrílico y la acroleína fue posible obtener la Figura 10. En ella se puede observar como la velocidad reacción del ácido acrílico se vuelve mucho más rápida al aumentar la temperatura, superando la correspondiente a la acroleína, para una conversión del 97% de propileno. Concordando por lo tanto con la simulación de *Hysys*.

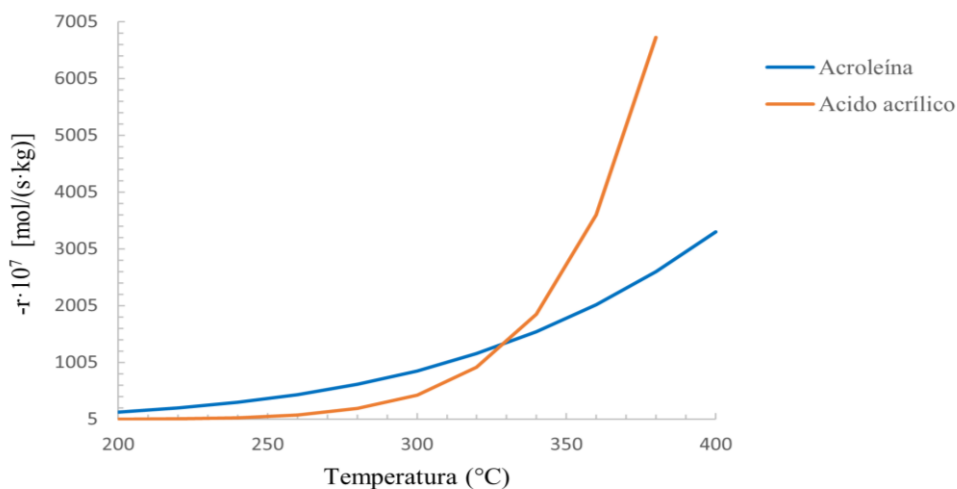


Figura 10. Velocidades de reacción de la acroleína y el ácido acrílico en función de la temperatura. Elaboración propia.

Una vez seleccionada la temperatura, se prosiguió con el estudio de la presión de operación. Los valores recomendados se encuentran entre 1,5 a 2,5 bar. Trabajar a altas presiones permite obtener un alto rendimiento espacio-tiempo, y es por ello por lo que se puede preferir en la industria; sin embargo, podría desplazar el equilibrio hacia las reacciones indeseadas. Asimismo, a mayor presión también aumenta el peligro y se consideró apropiado trabajar por lo tanto a una presión de 2 bar, presión de operación del estudio de cinéticas, que cumple con el intervalo usual de operación (12).

De igual forma, al simular el equipo en *Aspen Hysys* se comprobó que aumentando la presión aumenta la velocidad de reacción, y por lo tanto la formación de acroleína. Sin embargo, la diferencia entre operar a 2 o a 2,5 bar fue insignificante. Favoreciendo la idea de operar a 2 bar en vez de a 2,5 dada la escasa diferencia.

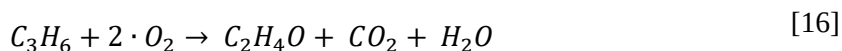
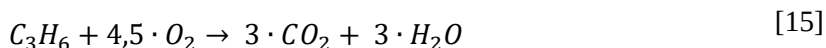
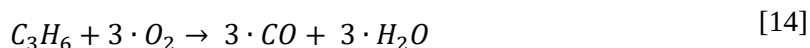
Por otro lado, para las concentraciones de entrada al reactor es fundamental tener en cuenta los límites de inflamabilidad del propileno. Para la seguridad del proceso es recomendado que en la entrada el propileno se encuentre en una concentración volumétrica de entre 5 y 10%. Asimismo, la relación molar entre el propileno, el aire y el inerte es de 1:8: (1-6). Un aumento de la cantidad de propileno a la entrada implica, por tanto, un aumento del aire y del inerte requerido, y con ello un aumento en las dimensiones de los equipos.

La cantidad exacta de propileno requerido será calculado en el apartado 7. *Balance de materia*. Sin embargo, la concentración de este compuesto se tomará igual al empleado en el estudio de las cinéticas. Este valor corresponde a un 7,5% molar de propileno en la entrada y siguiendo las recomendaciones se ha optado por una relación 1: 8,6: 3,8 de propileno, aire e inerte respectivamente (3,17).

En cuanto al inerte se han encontrado diversas opciones y, en vista de que se necesita casi 4 veces más inerte que propileno, se ha de seleccionar un compuesto que no solo no reaccione y se mantenga en fase gaseosa en las condiciones de operación, sino que a su vez sea factible separar más adelante de la corriente para ser recirculado. En concreto, se empleará helio como inerte, de forma que, aunque suponga un coste de inversión superior, durante los años de vida de la planta su coste no será representativo, dado que se estará recuperando constantemente mediante las membranas SEPURAN®. Estas membranas son diseñadas exclusivamente para la recuperación del helio, y se utilizan industrialmente para tratar corrientes gaseosas compuestas por CO, CO₂, H₂O y N₂, además del He, logrando una recuperación del helio del 99% (18).

6. Cinética de reacción

La entrada al reactor R-201 consta de propileno, aire y helio, siendo el propileno y el oxígeno en exceso los reactivos. El equipo trabajará a una temperatura constante, y en él se llevarán a cabo las distintas reacciones mostradas en la Figura 2. Para una mejor visualización de lo que acontece en el reactor, se muestra a continuación las reacciones (3).



La primera reacción, R_1 , (Ecuación [13]) es la del producto deseado (acroleína), mientras que las siguientes tres reacciones muestran las reacciones en paralelo para la formación de subproductos a partir del propileno: monóxido de carbono R_2 , dióxido de carbono R_3 y acetaldehído R_4 , respectivamente. Por último, la Ecuación [17] muestra la reacción del ácido acrílico obtenido mediante la oxidación de la acroleína R_5 , y la Ecuación [18] muestra la formación del ácido acético derivado del acetaldehído R_6 .

Para la obtención de un modelo cinético de las reacciones mostradas anteriormente, se han realizado varios estudios, y aunque el mecanismo de la reacción principal es bien conocido, las reacciones que ocurren en paralelo y consecutivo se ven presentes en escasos estudios. A pesar de ello, se han propuesto mecanismos diferentes que pueden explicar estas reacciones (3).

En particular, se estima que se deba a especies electrofílicas del oxígeno y a distintos sitios activos en el catalizador. Se llaman sitios reducidos a los sitios donde intervienen las especies electrofílicas del oxígeno, y sitios completamente oxidados al resto. El proceso de adsorción se considera diferente en ellos, lo que explicaría la formación de diferentes productos (3).

No obstante, no ha sido posible agregar todos estos aspectos detallados en el modelo matemático para definir la cinética de la reacción, por lo que el modelo se ha basado en un estudio macroscópico del mecanismo, asumiendo: que la superficie del catalizador está en estado estacionario, que solo existe un tipo de sitio activo y que solo hay una especie de oxígeno. Posteriormente, fue verificado el modelo cinético comparando los resultados con los reales industrialmente, y se dedujo que estas simplificaciones no perjudican el modelo (3).

El modelo se realizó siguiendo el mecanismo de Mars-van Krevelen descrito anteriormente, el cual es aplicable también para las reacciones secundarias, obteniendo por tanto la expresión general, válida para cada una de las reacciones, que se muestra en la Ecuación [19].

$$-r'_j = \frac{k_j \cdot P_i \cdot k_{reox} \cdot P_{O_2}}{K_{pp} \cdot P_{pp} + K_{AC} \cdot P_{AC} + k_{reox} \cdot P_{O_2}} \quad [19]$$

Nótese que la letra j hace referencia a la reacción que se esté considerando, teniendo cada una su factor exponencial correspondiente al producto que se forme en la reacción, como se mostrará más adelante.

Por otro lado, la letra i se emplea para indicar el reactivo de la reacción, el cual cambia según la reacción a considerar; puede ser el propileno, acroleína o el acetaldehído. Asimismo, la letra P hace referencia a la presión parcial del compuesto en bar, dependiendo la velocidad solo de la presión del propileno (pp), el oxígeno (O_2), la acroleína (AC) y el acetaldehído cuando sea considerado reactivo, introduciéndolo en P_i para la producción de ácido acético.

Finalmente, se puede observar que, además del factor exponencial de las reacciones, k_j con unidades de $\text{mol}/(\text{bar} \cdot \text{s} \cdot \text{kg})$, se tienen otros tres parámetros k_{reox} , K_{pp} y K_{AC} , siendo k_{reox} la constante de velocidad para la reoxidación del catalizador. Por otro lado, los parámetros K_{pp} y K_{AC} son la suma de diversas constantes de velocidad, k_j , para que la reacción tenga en cuenta la inhibición presente debido a las otras reacciones que están ocurriendo al mismo tiempo en la superficie del catalizador (3).

Por tanto K_{pp} será la suma de las k_j presentes en las reacciones a partir del propileno, como se muestra en la Ecuación [20]; y K_{AC} el valor de k_5 , que es el correspondiente a la reacción del ácido acrílico a partir de la acroleína.

$$K_{pp} = k_1 + k_2 + k_3 + k_4 \quad [20]$$

Los valores del factor preexponencial de cada reacción, así como la energía de activación, se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4. Factor preexponencial y energía de activación de las distintas reacciones presentes en el reactor R-201 (3).

Reacción	Factor preexponencial k_{0j} [mol/(bar · s · kg)]	Energía de activación E_j (kJ/mol)
R ₁	53,52	38.566,12
R ₂	44,26	64.260,43
R ₃	0,21	31.661,70
R ₄	2.321,57	80.683,09
R ₅	790.167,32	102.727,92
R ₆	217,02	47.196,65
Redox	265.667,30	56.912,15

El parámetro k depende de la temperatura y según su termodinámica es posible emplear la expresión de Arrhenius, que se muestra en la Ecuación [21], para obtener dicho parámetro cinético a la temperatura de operación.

$$k_j = k_{0j} \cdot \exp\left(\frac{-E_j}{R \cdot T}\right) \quad [21]$$

Los resultados obtenidos mediante la Ecuación [21] así como los valores de temperatura y la constante R empleados se muestran a continuación en la Tabla 5.

Tabla 5. Parámetros cinéticos para la oxidación parcial del propileno a la temperatura de operación del reactor R-201.

Parámetro	Valor
R [J/(mol·K)]	8,31
T (K)	623,15
k_1 [mol/(bar · s · kg)]	$3,13 \cdot 10^{-2}$
k_2 [mol/(bar · s · kg)]	$1,82 \cdot 10^{-4}$
k_3 [mol/(bar · s · kg)]	$4,52 \cdot 10^{-4}$
k_4 [mol/(bar · s · kg)]	$4,01 \cdot 10^{-4}$
k_5 [mol/(bar · s · kg)]	$1,94 \cdot 10^{-3}$
k_6 [mol/(bar · s · kg)]	$2,40 \cdot 10^{-2}$
k_{redox} [mol/(bar · s · kg)]	4,51

7. Balance de materia

Para la realización del balance de materia se emplea, al igual que en todos los equipos, la Ecuación [22]. Al trabajar en estado estacionario el término de acumulación se anula, pero a diferencia del resto, al tratarse de un reactor, se ha de considerar el término de la generación.

$$Entrada + Generación = Salida + Acumulación \quad [22]$$

Lo primero que se debe considerar es la cantidad de propileno necesario para poder producir la cantidad de acroleína establecida de 10 mil toneladas anuales. Para ello, ha de tenerse en cuenta una serie de parámetros, como los días y horas de trabajo de la planta, al igual que la conversión alcanzada.

La planta opera las 24 horas del día durante 320 días al año, y con el catalizador es posible alcanzar una conversión del 97% de propileno. Sin embargo, ha de considerarse también la complicada red de reacciones, dado que no todo el propileno será transformado a acroleína, ni toda la acroleína formada será obtenida a la salida del reactor, debido a que una parte de esta se convertirá en ácido acrílico. Por lo tanto, es necesario conocer la selectividad de las reacciones en paralelo, así como la conversión de acroleína y acetaldehído para las reacciones consecutivas.

Asimismo, ha de considerarse la eficacia de los demás equipos de la planta, por lo que se ha calculado la concentración inicial del propileno teniendo en cuenta las pérdidas de la acroleína en los distintos equipos. Para ello, se realizó una primera estimación de las eficiencias de los demás equipos en *Aspen Hysys*, para determinar los kilogramos de acroleína que se pierden, aumentando así la cantidad a producir en el reactor.

Por consiguiente, en el siguiente cálculo, mostrado en la Ecuación [23], la cantidad másica de acroleína son las 10 mil toneladas que se quieren producir más la suma de los kilogramos extras calculados que se pierden en los distintos equipos de la planta. De este modo se asegura una salida de la planta, como mínimo, de 10 mil toneladas de acroleína.

$$F_{pp} = M_{ac} \cdot \frac{1.000 \text{ kg}}{1 \text{ ton}} \cdot \frac{1 \text{ kmol}}{56,06 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ año}}{320 \text{ días}} \cdot \frac{1 \text{ día}}{24 \text{ horas}} \cdot \frac{1 \text{ mol propileno}}{X \text{ mol acroleína}} \cdot \frac{1}{S_1} \quad [23]$$

Siendo M_{ac} las toneladas al año de acroleína, S_1 la selectividad de la reacción, X la conversión del propileno (0,97), y F_{pp} el caudal molar necesario de propileno en la entrada del reactor, en kmol/h.

Conocida la cantidad de propileno necesaria, y empleando las relaciones molares entre este y el aire (1:8,59), y con el helio (1:3,8), es posible calcular la masa de cada compuesto a la entrada del reactor empleando sus pesos moleculares.

Cabe destacar, que la selectividad para la producción de la acroleína, al igual que el resto de las selectividades, fueron obtenidas bibliográficamente y se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6. Selectividades y conversiones para las distintas rutas de reacción (3).

Parámetro	Valor
Selectividad hacia la acroleína, S_1	0,83
Selectividad hacia el monóxido de carbono, S_2	0,02
Selectividad hacia el dióxido de carbono, S_3	0,13
Selectividad hacia el acetaldehído, S_4	0,02
Conversión de la acroleína, X_{ac}	0,10
Conversión del acetaldehído, X_{at}	0,32

Empleando S_1 en la Ecuación [23], junto con un valor de M_{ac} de 14.135,83 toneladas al año, se calculó F_{pp} , y mediante las relaciones molares también se calculó la entrada de aire y helio. Los resultados se muestran en la Tabla 7.

Tabla 7. Flujos molares de los distintos compuestos a la entrada del reactor.

Parámetro	Valor
Flujo molar de propileno a la entrada, $F_{pp,0}$ (kmol/h)	40,78
Flujo molar de aire a la entrada, $F_{aire,0}$ (kmol/h)	350,13
Flujo molar de helio a la entrada, $F_{helio,0}$ (kmol/h)	155

Asimismo, multiplicando la selectividad de cada reacción por los moles iniciales del propileno y su conversión, es posible saber la cantidad de propileno que se consume en cada reacción, y siguiendo las reacciones, se pueden calcular los moles necesarios de oxígeno estequiométricamente. Esto se realizará para cada una de las reacciones, de forma que es posible, a la vez obtener los moles formados de cada producto. Posteriormente, los moles de los compuestos son transformados en kilos mediante sus correspondientes pesos moleculares, verificando por último que se cumple la Ecuación [22].

Cabe destacar, que para el cálculo de los moles formados de los ácidos acrílico y acético se emplea la misma lógica. Una vez calculado los moles formados de acroleína y acetaldehído estos se multiplican por sus respectivas conversiones, y se determina así por estequiometría el oxígeno consumido y los productos formados, siendo por tanto la masa de acroleína y acetaldehído la resta entre la masa formada mediante las reacciones del propileno y la reaccionada para la formación de los subproductos.

Los resultados para la conversión final establecida del propileno, acroleína y acetaldehído se muestran en la Tabla 8.

Tabla 8. Balance de materia al reactor R-201.

Compuesto	Entrada- Corriente 9		Salida- Corriente 10	
	Flujo Molar $\left(\frac{kmol}{h}\right)$	Flujo Masico $\left(\frac{kg}{h}\right)$	Flujo Molar $\left(\frac{kmol}{h}\right)$	Flujo Masico $\left(\frac{kg}{h}\right)$
Propileno	40,78	1.715,94	1,22	51,48
Oxígeno	73,34	2.346,71	11,51	368,34
Acroleína	-	-	29,48	1.652,88
CO	-	-	2,73	76,45
CO ₂	-	-	16,10	708,50
Acetaldehído	-	-	0,46	20,11
Ácido Acrílico	-	-	3,35	241,30
Ácido Acético	-	-	0,22	12,96
Agua	-	-	51,66	930,63
Nitrógeno	276,79	7.753,79	276,79	7.753,79
Helio	155,00	620,40	155,00	620,40
Masa Total Entrada:	12.436,84	Masa Total Salida:	12.436,84	

Sin embargo, para poder calcular los flujos molares de los compuestos a lo largo del reactor al igual que las concentraciones, primero que nada, al tratarse de reacciones que tienen lugar en fase gas, se calculó la expansión para cada una de las reacciones empleando la Ecuación [24].

$$\varepsilon = \frac{n_f - n_i}{n_i} \quad [24]$$

Siendo ε la expansión, n_f los moles finales de la reacción y n_i los iniciales.

Este cálculo fue realizado para cada una de las reacciones, teniendo en cuenta la cantidad de helio que hay por cada mol de propileno, al igual que cada mol de nitrógeno en la corriente respecto a un mol de oxígeno.

Cabe destacar que, para la reacción 1 y 4 (formación de la acroleína y el acetaldehído) no se muestra el cálculo de la expansión, dado que, al ser una reacción sin cambio en el número de moles, el valor de la expansión es de cero.

- **Reacción 2**

	Propileno	Oxígeno	Inertes	→	CO	Agua	n_{total}
x=0	1	5,42	24,18		0	0	30,60
x=1	0	2,42	24,18		3	3	32,60

- **Reacción 3**

	Propileno	Oxígeno	Inertes	→	CO₂	Agua	n_{total}
x=0	1	8,13	34,38		0	0	43,5
x=1	0	3,63	34,38		3	3	44

- **Reacción 5**

	Acroleína	Oxígeno	Inertes	→	Ácido Acrílico	n_{total}
x=0	1	0,90	3,40		0	5,3
x=1	0	0,40	3,40		1	4,8

- **Reacción 6**

	Acetaldehído	Oxígeno	Inertes	→	Ácido Acético	n_{total}
x=0	1	0,90	3,40		0	5,3
x=1	0	0,40	3,40		1	4,8

Se muestra en la Tabla 9 la expansión calculada de cada una de las reacciones empleando la Ecuación [24].

Tabla 9. Expansión de las reacciones presentes en el reactor R-201.

Reacción	Expansión
R ₁	0,00
R ₂	0,06
R ₃	0,01
R ₄	0,00
R ₅	-0,09
R ₆	-0,09

Los resultados concuerdan con lo esperado, dado que no se ha obtenido un cambio notorio en el caudal volumétrico en la salida del reactor. Sin embargo, se tendrán en cuenta estas expansiones para los próximos cálculos.

Asimismo, es posible emplear las siguientes ecuaciones en función de la conversión del propileno para calcular la concentración de cada uno de los compuestos presentes en el reactor:

$$C_p = C_{p0} - \frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_1}{1 + \varepsilon_1 \cdot X \cdot S_1} - \frac{C_{CO}}{3} - \frac{C_{CO_2}}{3} - \frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_4}{1 + \varepsilon_4 \cdot X \cdot S_4} \quad [25]$$

$$C_{AC} = \frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_1}{1 + \varepsilon_1 \cdot X \cdot S_1} - \left(\frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_1}{1 + \varepsilon_1 \cdot X \cdot S_1} \right) \cdot \frac{X_{AC} \cdot S_5}{1 + \varepsilon_5 \cdot X_{AC} \cdot S_5} \quad [26]$$

$$C_{CO} = \frac{3 \cdot C_{p0} \cdot X \cdot S_2}{1 + \varepsilon_2 \cdot X \cdot S_2} \quad [27]$$

$$C_{CO_2} = \frac{3 \cdot C_{p0} \cdot X \cdot S_3}{1 + \varepsilon_3 \cdot X \cdot S_3} + \frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_4}{1 + \varepsilon_4 \cdot X \cdot S_4} \quad [28]$$

$$C_{ach} = \frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_4}{1 + \varepsilon_4 \cdot X \cdot S_4} - \left(\frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_4}{1 + \varepsilon_4 \cdot X \cdot S_4} \right) \cdot \frac{X_{ach} \cdot S_6}{1 + \varepsilon_6 \cdot X_{ach} \cdot S_6} \quad [29]$$

$$C_{AA} = \left(\frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_1}{1 + \varepsilon_1 \cdot X \cdot S_1} \right) \cdot \frac{X_{AC} \cdot S_5}{1 + \varepsilon_5 \cdot X_{AC} \cdot S_5} \quad [30]$$

$$C_{acet} = \left(\frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_4}{1 + \varepsilon_4 \cdot X \cdot S_4} \right) \cdot \frac{X_{ach} \cdot S_6}{1 + \varepsilon_6 \cdot X_{ach} \cdot S_6} \quad [31]$$

$$C_{H_2O} = \frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_1}{1 + \varepsilon_1 \cdot X \cdot S_1} + \frac{3 \cdot C_{p0} \cdot X \cdot S_2}{1 + \varepsilon_2 \cdot X \cdot S_2} + \frac{3 \cdot C_{p0} \cdot X \cdot S_3}{1 + \varepsilon_3 \cdot X \cdot S_3} + \frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_4}{1 + \varepsilon_4 \cdot X \cdot S_4} \quad [32]$$

$$C_{O_2} = C_{O_{20}} - \frac{C_{p0} \cdot X \cdot S_1}{1 + \varepsilon_1 \cdot X \cdot S_1} - C_{CO} - \frac{4,5}{3} \cdot C_{CO_2} - \frac{2 \cdot C_{p0} \cdot X \cdot S_4}{1 + \varepsilon_4 \cdot X \cdot S_4} - 0,5 \cdot C_{AA} - 0,5 \cdot C_{acet} \quad [33]$$

Siendo C_i la concentración del compuesto i en mol por litro. Además, se usa p para referirse al propileno, mientras que se usa $p0$ para indicar la concentración inicial del propileno. Del mismo modo, AC hace referencia a la acroleína, CO es monóxido de carbono, CO_2 es dióxido de carbono, ach es el acetaldehído, AA es el ácido acrílico, acet es el ácido acético, H_2O el agua que se forma y finalmente O_2 es el oxígeno. Cabe destacar que para el oxígeno siendo el otro reactivo, se aplica la misma lógica del propileno, empleando O_{20} para referirse al valor inicial.

No ha sido incluido los inertes, helio y nitrógeno, dado que la masa de estos no varía a lo largo del reactor.

8. Masa necesaria de catalizador

En el apartado 7. *Balance de materia*, se ha tenido en cuenta la selectividad y conversión de cada reacción. Sin embargo, para alcanzar dicha conversión el reactor necesita una cierta cantidad de catalizador, que será determinada a continuación.

Para determinar la masa de catalizador para un reactor de lecho fijo, se emplea la Ecuación [34] (11).

$$\frac{W_{catalizador}}{F_{pp,0}} = \int_0^X \frac{dX}{-r'_{global}} \quad [34]$$

Donde:

- $W_{catalizador}$ es la masa de catalizador, en kg.
- $F_{pp,0}$ es el flujo molar del propileno a la entrada del reactor, en mol/s.
- X es la conversión alcanzada del propileno.
- $-r'_{global}$ es la suma de las velocidades de reacción de las reacciones 1, 2, 3, y 4, en mol/(kg cat·s).

Para resolver la integral se han aplicado el método de trapecios en una hoja de cálculo de Excel. Se ha fijado una columna de conversión del propileno con un paso de 0,01, y posteriormente se ha calculado, siguiendo las Ecuaciones [25], [26], [27], [28], [29], [30], [31], [32] y [33], las concentraciones de cada compuesto.

Sin embargo, como se muestra en la Ecuación [19], las velocidades de reacción dependen de la presión, no de la concentración, por lo que fue calculada la presión empleando gases ideales, como se muestra en la Ecuación [35].

$$P_i = \frac{C_i \cdot T \cdot 0,082}{0,986} \quad [35]$$

La presión de cada componente, P_i , se obtiene en bar usando su respectiva concentración calculada, C_i en mol por litro y la temperatura de operación en Kelvin.

Con las presiones calculadas para cada paso de la conversión, se prosiguió calculando $-r'_j$ de cada reacción para sumarlas obtener $-r'_{global}$. Una vez resuelta la integral mediante el método de trapecios, y multiplicado por el flujo molar inicial del propileno, se obtuvo una masa de catalizador de:

$$W_{catalizador} = 6.590,99 \text{ kg}$$

Cabe destacar que, se muestran las tablas con los datos para el cálculo de $W_{catalizador}$ en el subapartado 8.1. *Resultados de la hoja de cálculo*. Finalmente, se puede observar en la Figura 11 la variación de flujo de los componentes a lo largo del reactor.

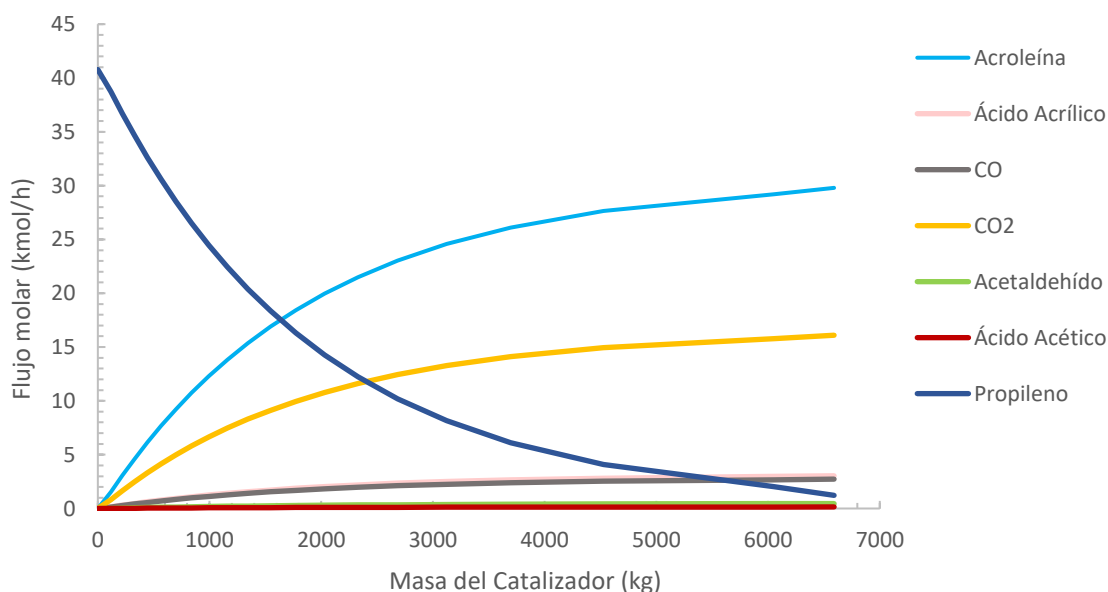


Figura 11. Variación de los flujos molares a lo largo del reactor. Elaboración propia.

8.1. Resultados de la hoja de cálculo

Para el cálculo de la masa del catalizador, al igual que para la representación de los flujos molares a lo largo del reactor, se ha empleado un paso de conversión del propileno de 0,01. Sin embargo, para mostrar con mayor claridad los pasos a seguir, se mostrarán en las siguientes tablas los resultados obtenidos usando un paso mayor, de 0,05.

Tabla 10. Concentraciones a lo largo del reactor calculadas mediante la Ecuación [25] hasta la Ecuación [33].

X	Concentración · 10³ (mol/l)								
	C₃H₆	O₂	C₃H₄O	CO	CO₂	C₂H₄O	C₃H₄O₂	C₂H₄O₂	H₂O
0	3,60	6,48	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0,05	3,42	6,19	0,13	0,01	0,07	0,00	0,02	0,00	0,24
0,1	3,24	5,91	0,27	0,02	0,15	0,00	0,03	0,00	0,47
0,15	3,06	5,62	0,40	0,04	0,22	0,01	0,05	0,00	0,71
0,2	2,88	5,33	0,54	0,05	0,29	0,01	0,06	0,00	0,94
0,25	2,70	5,04	0,67	0,06	0,37	0,01	0,08	0,00	1,18
0,3	2,52	4,76	0,81	0,07	0,44	0,01	0,09	0,00	1,41
0,35	2,34	4,47	0,94	0,09	0,51	0,01	0,11	0,00	1,65
0,4	2,16	4,18	1,07	0,10	0,59	0,02	0,12	0,01	1,88
0,45	1,98	3,89	1,21	0,11	0,66	0,02	0,14	0,01	2,12
0,5	1,80	3,60	1,34	0,12	0,73	0,02	0,15	0,01	2,35
0,55	1,62	3,32	1,48	0,14	0,81	0,02	0,17	0,01	2,59
0,6	1,44	3,03	1,61	0,15	0,88	0,02	0,18	0,01	2,82
0,65	1,26	2,74	1,74	0,16	0,95	0,03	0,20	0,01	3,06
0,7	1,08	2,45	1,88	0,17	1,03	0,03	0,22	0,01	3,29
0,75	0,90	2,17	2,01	0,19	1,10	0,03	0,23	0,01	3,53
0,8	0,72	1,88	2,15	0,20	1,17	0,03	0,25	0,01	3,76
0,85	0,54	1,59	2,28	0,21	1,25	0,03	0,26	0,01	4,00
0,9	0,36	1,30	2,42	0,22	1,32	0,04	0,28	0,01	4,23
0,95	0,18	1,02	2,55	0,24	1,39	0,04	0,29	0,01	4,47

Tabla 11. Presión parcial a lo largo del reactor calculada con la Ecuación [35] con datos de la Tabla 10.

X	Presión · 10 (bar)								
	C₃H₆	O₂	C₃H₄O	CO	CO₂	C₃H₄O₂	C₂H₄O	C₂H₄O₂	H₂O
0	1,87	3,36	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
0,05	1,77	3,21	0,07	0,01	0,04	0,00	0,01	0,00	0,12
0,1	1,68	3,06	0,14	0,01	0,08	0,00	0,02	0,00	0,24
0,15	1,59	2,91	0,21	0,02	0,11	0,00	0,02	0,00	0,37
0,2	1,49	2,76	0,28	0,03	0,15	0,00	0,03	0,00	0,49
0,25	1,40	2,61	0,35	0,03	0,19	0,01	0,04	0,00	0,61
0,3	1,31	2,46	0,42	0,04	0,23	0,01	0,05	0,00	0,73
0,35	1,21	2,31	0,49	0,05	0,27	0,01	0,06	0,00	0,85
0,4	1,12	2,16	0,56	0,05	0,30	0,01	0,06	0,00	0,97
0,45	1,03	2,02	0,63	0,06	0,34	0,01	0,07	0,00	1,10

Tabla 11 (Continuación). Presión parcial a lo largo del reactor calculada con la Ecuación [35] con datos de la Tabla 10.

X	Presión · 10 (bar)								
	C₃H₆	O₂	C₃H₄O	CO	CO₂	C₃H₄O₂	C₂H₄O	C₂H₄O₂	H₂O
0,5	0,93	1,87	0,69	0,06	0,38	0,01	0,08	0,00	1,22
0,55	0,84	1,72	0,76	0,07	0,42	0,01	0,09	0,00	1,34
0,6	0,75	1,57	0,83	0,08	0,46	0,01	0,10	0,00	1,46
0,65	0,65	1,42	0,90	0,08	0,49	0,01	0,10	0,00	1,58
0,7	0,56	1,27	0,97	0,09	0,53	0,01	0,11	0,00	1,71
0,75	0,47	1,12	1,04	0,10	0,57	0,02	0,12	0,01	1,83
0,8	0,37	0,97	1,11	0,10	0,61	0,02	0,13	0,01	1,95
0,85	0,28	0,83	1,18	0,11	0,64	0,02	0,14	0,01	2,07
0,9	0,19	0,68	1,25	0,12	0,68	0,02	0,14	0,01	2,19
0,95	0,09	0,53	1,32	0,12	0,72	0,02	0,15	0,01	2,31

Tabla 12. Velocidades de reacción y resultado empleando el método de trapecios de la integral.

X	Velocidad de reaccion · 10⁴ ($\frac{mol}{s \cdot kg}$)						$\frac{1}{-r'_{global}}$	$\int_0^X \frac{dX}{-r'_{global}}$
	-r'₁	-r'₂	-r'₃	-r'₄	-r'₅	-r'₆		
0	57,95	0,34	0,84	0,74	0,00	0,00	167,04	8,57
0,05	55,06	0,32	0,80	0,70	0,13	0,00	175,82	9,04
0,1	52,16	0,30	0,75	0,67	0,27	0,00	185,58	9,55
0,15	49,27	0,29	0,71	0,63	0,40	0,01	196,49	10,13
0,2	46,37	0,27	0,67	0,59	0,53	0,01	208,76	10,79
0,25	43,48	0,25	0,63	0,56	0,67	0,01	222,66	11,53
0,3	40,58	0,24	0,59	0,52	0,80	0,01	238,54	12,39
0,35	37,68	0,22	0,54	0,48	0,93	0,01	256,87	13,38
0,4	34,79	0,20	0,50	0,45	1,07	0,02	278,25	14,54
0,45	31,89	0,19	0,46	0,41	1,20	0,02	303,50	15,93
0,5	29,00	0,17	0,42	0,37	1,33	0,02	333,81	17,62
0,55	26,10	0,15	0,38	0,33	1,47	0,02	370,83	19,70
0,6	23,21	0,13	0,34	0,30	1,60	0,02	417,09	22,34
0,65	20,31	0,12	0,29	0,26	1,74	0,03	476,55	25,81
0,7	17,42	0,10	0,25	0,22	1,87	0,03	555,79	30,56
0,75	14,52	0,08	0,21	0,19	2,00	0,03	666,65	37,49
0,8	11,62	0,07	0,17	0,15	2,14	0,03	832,79	48,55
0,85	8,73	0,05	0,13	0,11	2,27	0,03	1.109,37	69,27
0,9	5,83	0,03	0,08	0,07	2,41	0,04	1.661,50	124,32
0,95	2,92	0,02	0,04	0,04	2,55	0,04	3.311,38	

Para el cálculo de la integral con el método de trapecios se siguió la Ecuación [36]:

$$\int_{x-1}^X \frac{dX}{-r'_{global}} = \frac{(X - X_{-1})}{2} \cdot \left(\frac{1}{-r'_{global}_X} + \frac{1}{-r'_{global}_{(X-1)}} \right) \quad [36]$$

9. Balance de Energía

Como ha sido mencionado previamente, un factor imprescindible para el correcto funcionamiento del equipo es el control de la temperatura de operación. Al tratarse de una reacción exotérmica ha de retirarse calor constantemente para operar isotérmicamente.

Para ello el reactor consta de una configuración de carcasa y tubos que permite el intercambio de calor entre los reactivos en fase gas con una mezcla de sales en fase líquida, que se empleará como refrigerante.

Para determinar la cantidad de calor que se requiere retirar, es preciso calcular la entalpía de reacción. Se prosigue, por lo tanto, con la obtención de las entalpías de formación, H_f° , de todos los compuestos presentes en las reacciones. Estos datos son obtenidos del simulador *Aspen Hysys* a una temperatura de 298 K y se muestran en la Tabla 13.

Tabla 13. Entalpía de formación de los reactivos y productos del reactor R-201.

Compuesto	H_f° (J/mol)
Propileno	20.429
Oxígeno	0
Acroleína	-70.918
CO	-110.590
CO ₂	-393.790
Acetaldehído	-164.390
Ácido Acrílico	-336.200
Ácido Acético	-435.079
Agua	-241.814

Con las entalpías de formación obtenidas es posible calcular la entalpía de reacción estándar, tal como se muestra en la Ecuación [37]. Esta entalpía de reacción estándar será calculada para las seis reacciones presentes en el reactor, cuyo resultado indica el calor liberado por la reacción en condiciones estándar, siendo las condiciones estándar 25 °C, 1 atm y componente puro (19).

$$\Delta H_{r_j}^\circ = \sum v_i \cdot H_{f,i_{producto}}^\circ - \sum v_i \cdot H_{f,i_{reactivo}}^\circ \quad [37]$$

Como se puede observar la entalpía de reacción estándar para cada reacción j ($\Delta H_{r_j}^\circ$) es el sumario de la entalpía de formación de los productos multiplicado por su respectivo coeficiente estequiométrico (v_i), menos el sumario de la entalpía de formación de los reactivos por sus coeficientes estequiométricos (19).

Sin embargo, el calor producido por las reacciones es distinto dado que el reactor opera a una temperatura de 350 °C. Por consiguiente, dado que se opera a presión constante y sin cambios de fases, es posible emplear la Ecuación [38] para determinar la variación de la entalpía en un intervalo de temperatura (19).

$$\Delta H_{r_j} = \Delta H_{r_j}^\circ + \sum v_i \cdot \int_{298\text{ K}}^{623\text{ K}} C_{p_i} \cdot dT \quad [38]$$

El calor específico de cada compuesto i , Cp_i , varía con la temperatura, pero no se ha conseguido los parámetros necesarios para calcularlo para todos los compuestos. Por lo que se calculará la integral con los valores del calor específico a las temperaturas límites obtenidos de *Aspen Hysys* y aplicando el método de trapecios.

Los valores del calor específico empleados se muestran en la Tabla 14.

Tabla 14. Calor específico de los compuestos a diferentes temperaturas.

Compuesto	$Cp_i \left(\frac{J}{mol \cdot K} \right)$	
	$T = 298 K$	$T = 623 K$
Propileno	63,89	110,13
Oxígeno	29,16	32,25
Acroleína	113,02	106,29
CO	29,07	30,61
CO ₂	38,27	47,05
Acetaldehído	100,81	88,03
Ácido Acrílico	154,71	125,86
Ácido Acético	90,96	107,64
Agua	75,69	36,77

Se muestran finalmente a continuación el valor de la entalpía estándar de reacción y la entalpía corregida por la temperatura, calculadas con las Ecuaciones [36] y [37] respectivamente, en la Tabla 15, para cada reacción presente en el reactor.

Tabla 15. Entalpías calculadas para las diversas reacciones.

Reacción	$\Delta H^\circ_{r_j} \left(\frac{J}{mol} \right)$	$\Delta H_{r_j} \left(\frac{J}{mol} \right)$
R ₁	-333.161	-317.505
R ₂	-1.077.641	-1.051.935
R ₃	-1.927.241	-1.904.003
R ₄	-820.423	-805.833
R ₅	-265.282	-260.318
R ₆	-270.689	-274.092

Como se puede observar los resultados tienen signo negativo reafirmando que se trata de reacciones exotérmicas.

Por último, empleando la Ecuación [39], es posible determinar el calor generado por cada reacción usando los datos mostrados anteriormente.

$$Q_{r_j} = \sum \Delta H_{r_j} \cdot F_{i,0} \cdot X_i \cdot S_j \quad [39]$$

Como se observa se multiplicará cada reacción por el flujo molar inicial del reactivo, por la conversión y por la selectividad de estas. Las primeras cuatro son las reacciones paralelas, donde se usará $F_{i,0}$ como el flujo inicial de propileno en mol por segundo. Mientras que para la formación de ácido acrílico y el ácido acético se emplea el flujo de sus reactivos acroleína y acetaldehído respectivamente. Cabe

destacar, que para estas dos últimas reacciones solo se multiplica por la conversión del reactivo, mostradas en la Tabla 6, dado que la selectividad es de 1.

Por lo tanto, empleando los flujos correspondientes de 11,33 de propileno, 9,12 de acroleína y 0,19 mol por segundo de acetaldehído se obtienen los resultados mostrados en la Tabla 16.

Tabla 16. Calor generado por las reacciones.

Reacción	Q_{r_j} (kJ/s)
R ₁	-2.895,51
R ₂	-265,84
R ₃	-2.719,62
R ₄	-150,52
R ₅	-242,13
R ₆	-16,43
Total	-6.290,04

Como se puede observar la reacción principal para la producción de la acroleína, así como la correspondiente al dióxido de carbono son altamente exotérmicas. El calor total generado debe ser retirado mediante intercambio de calor del sistema para operar en condiciones isotérmicas. Para ello se emplea, como se explicó anteriormente, la configuración de carcasa y tubos en el reactor.

Las reacciones se llevan a cabo en los tubos llenos con el catalizador mientras que el refrigerante circula por la carcasa retirando el calor generado. Por consiguiente, es necesario determinar el caudal del fluido refrigerante necesario. Cabe destacar, que se ha seleccionado la mezcla de sales como refrigerante dado es muy práctica cuando se trabaja a altas temperaturas, y se han encontrado diversas fuentes bibliográficas recomendando su uso para la producción de acroleína.

Las sales son una solución rentable, que permiten mantener el tamaño del equipo en el mínimo posible gracias a sus propiedades de transporte de calor. Asimismo, el coste de mantenimiento y la energía necesaria para hacer circular este fluido son bajos, y es un compuesto no tóxico que presenta ventajas medioambientales frente a otros refrigerantes (20).

Son varias las sales fundidas comerciales recomendadas para este sistema, por lo que se han realizado los cálculos correspondientes, y se ha seleccionado las sales fundidas cuyo flujo másico es menor para este sistema, siendo estas las Hitec, las cuales se ha convertido actualmente en una de la solución más competitiva.

Hitec tiene una composición de 7% de NaNO₃, 49% NaNO₂ y un 44% de KNO₃ con una temperatura de fusión de 415 K. Sus propiedades son estimadas según la temperatura en Kelvin, empleando las siguientes Ecuaciones [40] y [41] (21).

$$\rho_{Hitec} = 2279,799 - 0,7324 \cdot T \quad [40]$$

$$\mu_{Hitec} = \exp [-4,343 - 2,0143 \cdot (\ln(T - 273) - 5,011)] \quad [41]$$

Para el cálculo del caudal, se emplean las Ecuaciones [42] y [43].

$$Q_{retirado} = -Q_{r_{total}} \quad [42]$$

$$Q_{\text{retirado}} = m_{\text{Hitec}} \cdot C_{p\text{Hitec}} \cdot (t_2 - t_1) \quad [43]$$

Siendo

- m_{Hitec} flujo másico del refrigerante, en kg/s
- $C_{p\text{Hitec}}$ el calor específico medio entre la temperatura de entrada y salida, en J/(mol·K)
- t_2 temperatura de salida del refrigerante, en K
- t_1 temperatura de entrada del refrigerante, en K

Contemplando las temperaturas típicas del refrigerante, y mediante iteraciones, se han seleccionado las temperaturas de operación. Cabe destacar que el fluido debe ser tratado en un circuito cerrado cerca del reactor para mantener su temperatura de entrada constante. Estos valores, junto con los demás parámetros de las sales, se recogen en la Tabla 17.

Tabla 17. Caudal del refrigerante y los parámetros necesarios para su cálculo (19).

Parámetro	Valor
Q_{retirado} (kJ/s)	6.290,04
$C_{p\text{Hitec}}$ [kJ/(kg·K)]	1,56
ρ_{Hitec} (kg/m ³)	1.878,44
μ_{Hitec} (Pa·s)	$3,84 \cdot 10^{-3}$
k_{Hitec} [W/m·K]	0,48
t_2 (°C)	290,00
t_1 (°C)	260,00
m_{Hitec} (kg/s)	134,40

10. Dimensiones del Reactor

El reactor opera isotérmicamente gracias a la configuración establecida de carcasa y tubos. Este tipo de configuración es de las más habituales en la industria al trabajar con reacciones exotérmicas, por sus diversas ventajas. Cabe destacar, que se logra una mayor área superficial en estos equipos, y además facilitan la limpieza (19).

Se trata por lo tanto de un haz de tubos situados en el interior de una carcasa, por la que fluye la corriente del refrigerante. Las dimensiones de los tubos, así como de la carcasa, serán calculadas siguiendo el estándar de la Asociación de Fabricantes de Intercambiadores Tubulares (TEMA).

TEMA establece valores estándares de diseño para los diámetros de los tubos y la carcasa, así como la longitud de los tubos, y otros parámetros para la construcción de los intercambiadores de calor, que se tendrán en cuenta en el diseño de este equipo (22).

Para el diseño del reactor se sigue el mismo procedimiento que el empleado para el diseño de un intercambiador de calor. El procedimiento es un método iterativo que sigue los siguientes pasos (19):

1. Determinar las condiciones de operación del equipo, como los caudales de los fluidos y las temperaturas.
2. Buscar las propiedades físicas y termodinámicas de los fluidos. Por ejemplo, la densidad, viscosidad y la conductividad térmica.
3. Establecer la configuración del intercambiador.
4. Estimar un valor inicial del coeficiente global, U .
5. Determinar la diferencia media logarítmica de temperaturas, ΔT_{ml} .
6. Calcular el área de transferencia requerida en el sistema.

7. Realización del diseño del equipo.
8. Calcular los coeficientes de convección de los ambos fluidos.
9. Determinar el coeficiente global de transferencia de calor y verificar que la diferencia sea despreciable respecto al valor estimado en el paso 4. Si es significativa la diferencia se vuelve al paso 6 empleando el valor de U calculado.
10. Calcular la caída de presión en los tubos y en la carcasa. Si da un valor mayor al permitido se vuelve a los pasos 7 o 4 o 3, siguiendo ese orden.

Por lo tanto, siguiendo estos pasos se realizará a continuación el diseño de las dimensiones de los tubos y la carcasa.

10.1. Diseño de los tubos

Dado que en los tubos se encuentran las partículas catalizadoras, donde se llevarán a cabo las reacciones, estos tubos serán diseñados para contener toda la masa del catalizador previamente calculada. Cabe destacar, que todos los tubos son idénticos y en ellos se distribuirá el catalizador uniformemente.

Principalmente es necesario calcular el número de tubos necesarios para situar todo el catalizador garantizando que estos presenten el área necesaria para el intercambio de calor. Sin embargo, aunque la vida media del catalizador es elevada, es recomendado aumentar el peso total del catalizador entre un 10 y 20%, debido a las posibles pérdidas por envejecimiento. Este aumento permite mantener un margen de seguridad para cumplir los requisitos establecidos de la planta (23).

Asimismo, teniendo en cuenta la presencia de reacciones no deseadas se ha decidido incrementar el peso del catalizador un 20%. Obteniendo por lo tanto un valor de:

$$W_{catalizador} = 7.909,19 \text{ kg}$$

Con la masa del catalizador definida, en kg, y la densidad aparente del lecho conocida, en kg/m³, es posible calcular el volumen total del lecho, en m³, como se muestra en la Ecuación [44].

$$V_L = \frac{W_{catalizador}}{\rho_L} \quad [44]$$

Para conocer el número de tubos requeridos para el volumen del lecho calculado se emplea la Ecuación [45].

$$V_L = \frac{\pi \cdot d_i^2 \cdot L}{4} \cdot N_t \quad [45]$$

Siendo:

- V_L el volumen total del lecho, en m³
- L la longitud de los tubos, en m
- d_i el diámetro interior de los tubos, en m
- N_t el número de tubos en el reactor

No obstante, la cantidad de tubos y sus dimensiones deben seleccionarse de forma que se verifique que hay suficiente área de contacto con el refrigerante para mantener la temperatura constante.

Se requiere por lo tanto conocer el área de transferencia necesaria para retirar el calor generado. Para calcularla primero se calculó la diferencia de temperatura media logarítmica como se muestra en la Ecuación [46].

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \frac{(T_1 - t_2)}{(T_2 - t_1)}} \quad [46]$$

Siendo las temperaturas T_2 y T_1 las temperaturas de salida y entrada respectivamente, de la corriente que pasa por tubos. Por otro lado, t_2 y t_1 corresponden con la de temperatura del refrigerante que circula por la carcasa (19).

Asimismo, esta diferencia de temperatura debe ser corregida mediante el factor F_t tal como se muestra en la Ecuación [47] (19).

$$\Delta T_{ml}^* = \Delta T_{ml} \cdot F_t \quad [47]$$

Para el cálculo del factor F_t primero es necesario calcular los parámetros adimensionales R y S que dependen de las temperaturas como se muestran en las Ecuaciones [48] y [49].

$$R = \frac{T_1 - T_2}{t_2 - t_1} \quad [48]$$

$$S = \frac{t_2 - t_1}{T_1 - t_1} \quad [49]$$

Finalmente, se emplea la Ecuación [50] para el cálculo de F_t .

$$F_t = \frac{\sqrt{R^2 + 1} \cdot \ln \left[\frac{(1 - S)}{(1 - R \cdot S)} \right]}{(R - 1) \cdot \ln \left[\frac{2 - S \cdot [R + 1 - \sqrt{R^2 + 1}]}{2 - S \cdot [R + 1 + \sqrt{R^2 + 1}]} \right]} \quad [50]$$

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 18.

Tabla 18. Resultados obtenidos para la corrección de la diferencia de temperatura media logarítmica.

ΔT_{ml}	S	R	F_t	ΔT_{ml}^*
73,99	0,33	0,00	1,00	73,99

Posteriormente, siguiendo los pasos del procedimiento mostrados anteriormente, se estima un coeficiente global de transmisión de calor para poder calcular el área requerida.

Después de iterar, y tomando como referencia los valores recomendados por la bibliografía, se ha seleccionado el siguiente valor para el coeficiente global (19):

$$U_{propuesto} = 107,10 \frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}$$

Con este valor y empleando la Ecuación [51] se determina el área requerida.

$$Q_{retirado} = U_{propuesto} \cdot A_{requerida} \cdot \Delta T_{ml}^* \quad [51]$$

Por último, se emplea la Ecuación [52] para calcular el número de tubos requeridos según sus especificaciones seleccionadas.

$$A_{disponible} = N_t \cdot \pi \cdot d_t \cdot L \quad [52]$$

Donde d_t es el diámetro externo de cada tubo. Cabe destacar que para resolver el sistema de ecuaciones es necesario fijar las dimensiones de los tubos siguiendo los estándares de diseño de TEMA (22).

Para la selección de las dimensiones de los tubos, se han de considerar también las recomendaciones bibliográficas para reactores industriales de producción de acroleína. Con el objetivo de disminuir el número de tubos, así como el coste del equipo, lo ideal sería emplear una longitud de tubos elevada, como puede ser la máxima siguiendo el estándar de TEMA de 7,32 m. Sin embargo, en este caso para no promover la oxidación del producto no se recomienda emplear tubos con una longitud superior a 5 m (22).

Por otro lado, también es posible disminuir el número de tubos empleando un diámetro interno elevado. Aunque nuevamente se tienen restricciones, dado que para esta reacción exotérmica en la industria no se aconseja emplear diámetros superiores a los 50 mm ni inferiores a 15 mm. Diámetros muy pequeños aumentarían demasiado el coste, mientras que, con un diámetro elevado podrían aparecer puntos calientes (*hotspots*) y habría una tendencia a llegar a una reacción descontrolada (7).

Por lo tanto, mediante iteraciones se irán fijando los valores de los diámetros y de la longitud, de forma que se satisfagan tanto la Ecuación [52] (área requerida) y [45] (volumen del lecho). Además, el valor estándar del diámetro interno debe seleccionarse de los estándares de TEMA, de tal forma que: no se aleje de los 50 mm recomendados, y al sumarle el espesor mínimo calculado, siguiendo los requisitos del diseño mecánico (apartado 11.4. *Cálculos de los espesores de la carcasa y tubos*), se obtenga el diámetro externo (22).

En la Tabla 19 se recogen los valores empleados, así como los resultados obtenidos del área de transferencia. Como se observa, el diámetro interno del tubo corresponde con el Schedule 40 del acero para un diámetro nominal de 50 mm.

Tabla 19. Datos para el dimensionamiento de los tubos.

Parámetro	Valor
L (m)	4,88
d_t (mm)	63,5
d_i (mm)	52,5
V_L (m ³)	8,62
n_t (m)	816
$A_{requerida}$ (m ²)	793,77
$A_{disponible}$ (m ²)	794,39

Con las dimensiones calculadas, en los siguientes subapartados se proseguirá con la determinación de la caída de presión, así como el cálculo del coeficiente de convención del fluido que circula por los tubos.

Por último, se debe seleccionar la disposición que tendrán los tubos en el interior de la carcasa. En la Figura 12 se pueden observar las disposiciones típicas para los tubos.

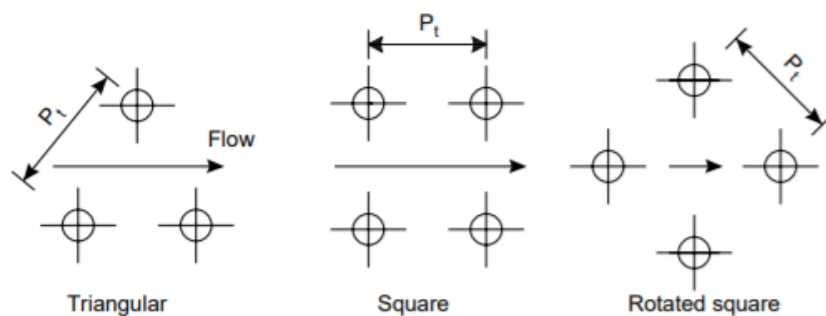


Figura 12. Configuraciones típicas de los tubos en los intercambiadores de calor (19).

Particularmente, la disposición triangular ofrece una mayor tasa de transferencia de calor, pero puede aumentar la caída de presión del fluido por carcassas si se comparada con la configuración cuadrada.

Las disposiciones cuadradas son empleadas normalmente cuando el equipo opera con fluidos sucios que requieran una limpieza del exterior de los tubos. Por lo tanto, siguiendo las recomendaciones de heurística, al no tener fluidos sucios se ha optado por la disposición triangular de los tubos.

10.1.1. Caída de presión en el lado de los tubos

La caída de presión, o en su defecto la pérdida de carga, es la variable que indica si las dimensiones seleccionadas de los tubos son adecuadas o deben ser cambiadas. Existen distintas ecuaciones que permiten hacer esta comprobación. Al emplear las ecuaciones para la pérdida de carga se aconseja que esta esté entre los valores de 0,069 y 0,231 kg/cm²/m. Por otro lado, diversos autores recomiendan realizar los cálculos respecto a la presión de entrada, poniendo como límite que no debe excederse el 10% de esta (23).

Se ha optado por emplear el criterio más aceptado, utilizando la ecuación de Ergun para determinar la caída de presión a lo largo del reactor. Esta ecuación es ampliamente usada al trabajar con reactores heterogéneos catalíticos, dado que puede emplearse para diversas partículas con distintas formas o tamaños. Dicha expresión de Ergun se muestra en la Ecuación [53].

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \cdot v_o \cdot \frac{(1 - \varepsilon_L)^2 \cdot \mu_{fluido}}{\varepsilon_L^3 \cdot d_p^2 \cdot \phi^2} + 1,75 \cdot \frac{\rho_{fluido} \cdot v_o^2 \cdot (1 - \varepsilon_L)}{\phi \cdot d_p \cdot \varepsilon_L^3} \quad [53]$$

Donde:

- ΔP es la caída de presión a través de la longitud L del tubo, en N/m²
- v_o es la velocidad del fluido, en m/s
- ε_L es la porosidad del lecho
- μ_{fluido} es la viscosidad del fluido, en Pa · s
- d_p es el diámetro de la partícula catalizadora, en m
- ϕ es la esfericidad de la partícula
- ρ_{fluido} es la densidad del fluido, en kg/m³

Los parámetros correspondientes al catalizador son mostrados en la Tabla 1 mientras que los correspondientes al fluido se encuentran en la Tabla 3.

Por otro lado, ha de calcularse la velocidad del fluido dividiendo el caudal del fluido por la sección de los tubos, como se muestra en la Ecuación [54].

$$v_o = \frac{\frac{m}{\rho_{fluido}}}{N_t \cdot \pi \cdot \frac{d_i^2}{4}} \quad [54]$$

Asimismo, se ha calculado el tiempo de residencia del fluido en el reactor para verificar que se encuentre entre los recomendados de 2 a 3,5 segundos, empleando la Ecuación [55].

$$\tau = \frac{V_L}{Q_{fluido}} \quad [55]$$

Se muestra en la Tabla 20 los resultados obtenidos.

Tabla 20. Resultados de la caída de presión y tiempo de residencia.

Parámetro	Valor
m (kg/s)	3,45
v_o (m/s)	1,78
Q_{fluido} (m ³ /s)	3,14
ΔP (bar)	0,09
τ (s)	2,74

Teniendo en cuenta que se opera a 2 bar, se concluye que las dimensiones de los tubos no representan ningún problema para el reactor, obteniendo una caída de presión despreciable y dentro de los valores admisibles. De todas formas, una vez construido el reactor se debe comprobar que la caída de presión sea igual en cada tubo, de no ser así, podrían formarse caminos preferentes (23). Asimismo, el tiempo de residencia calculado está entre los valores típico, por lo que se proseguirá con el cálculo del coeficiente de convección.

10.1.2. Coeficiente de convección en el lado de los tubos

El coeficiente de convección depende de las propiedades físicas del fluido, del caudal, y de la disposición física que hay para la transferencia de calor. Para calcularlo, es necesario emplear ciertos números adimensionales que se mostrarán a continuación.

Primero es necesario el número Reynolds para partícula, siguiendo la Ecuación [56]. Esta ecuación representa la relación existente entre las fuerzas de inercia y las fuerzas viscosas del lecho.

$$Re_p = \frac{d_p \cdot \rho_{fluido} \cdot v_o}{\mu_{fluido}} \quad [56]$$

Posteriormente, se calcula el número Prandtl, que se determina mediante las propiedades del fluido empleando la Ecuación [57].

$$Pr_t = \frac{Cp_{fluido} \cdot \mu_{fluido}}{k_{fluido}} \quad [57]$$

Por último, con los números adimensionales Reynolds y Prandtl calculados, se puede despejar el coeficiente de convección usando el número Nusselt, como se muestra de la Ecuación [58] (24).

$$Nu = \frac{d_p \cdot h_i}{k_{fluido}} = 2 + 0,6 \cdot Re^{0,5} \cdot Pr^{0,33} \quad [58]$$

Cabe destacar, que los parámetros del fluido son obtenidos de la herramienta *Aspen Hysys* y se muestran en la Tabla 21 junto con los resultados.

Tabla 21. El coeficiente de convección en los tubos con los parámetros requeridos para su cálculo.

Parámetro	Valor
$C_{p,fluido}$ [kJ/(kg·°C)]	1,49
k_{fluido} [W/(m·K)]	0,07
Re_p	287,76
Pr_t	0,63
Nu	10,73
h_i [W/(m ² ·°C)]	172,84

El valor obtenido para el coeficiente de transferencia de calor por convección puede ser comparado con los típicos, el cual entra en los típicos para convección forzada para gases (cuyo rango es de 25-250 W/(m²·°C)). Este resultado encaja en el esperado, y será empleado en el apartado 10.3. *Verificación del coeficiente global de convección*, para comprobar el valor estimado del coeficiente global de transmisión de calor después de realizar el diseño de la carcasa del equipo (25).

10.2. Diseño de la carcasa

La carcasa del equipo es como un gran tubo que contiene en su interior el haz de tubos previamente diseñados. En los extremos la carcasa está cerrada mediante los *tubesheets*, que no son más que unas placas tubulares (1).

Hay diversos tipos de intercambiadores de carcasa y tubos, según la configuración del equipo. Las configuraciones de TEMA más empleada actualmente son las que emplean láminas tubulares fijas. Estas placas se encuentran soldadas a la carcasa y sirven como bridas para atornillar los cabezales (1).

Para emplear esta configuración solo se requiere que los materiales de los tubos y la carcasa se puedan soldar entre si (de no ser así podrían realizarse mediante juntas, pero no es recomendado). Asimismo, su coste relativo es bajo y sus características coinciden con los ejemplos para reactores tubulares en la industria (1).

Aunque los cabezales flotantes podrían ser también una opción, estos no se aconsejan cuando se trata de un solo paso de tubos suponiendo a la vez el uso de bridas especiales y un aumento considerable en el coste (1). Por lo tanto, se la seleccionado la configuración BEM de TEMA, que es de las más sencillas y económicas, y se muestra en la Figura 13.

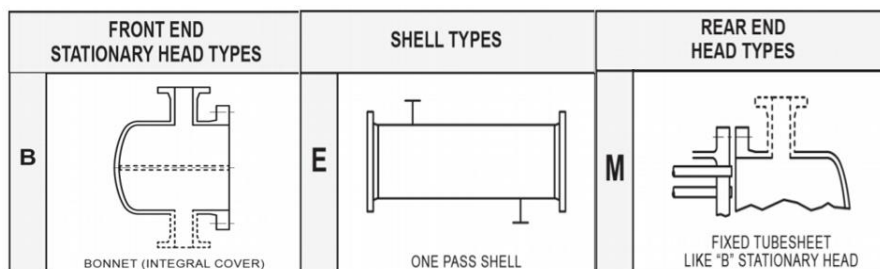


Figura 13. Configuración seleccionada para el reactor R-201 (1).

Sin embargo, ha de tenerse en cuenta que el reactor posee una orientación vertical impuesta por el tipo de reacciones que tiene lugar en su interior, así como el estado gaseoso del fluido. Asimismo, el uso de esta orientación requiere un espacio mucho menor en la planta y facilita su limpieza. Posteriormente se realizará el diseño mecánico del equipo y su respectivo plano, pero se tiene que considera que su estructura será semejante a la mostrada en la Figura 8.

La diferencia en la orientación podría afectar al valor del coeficiente de convección en la carcasa. Sin embargo, esto afecta mayoritariamente al efecto de arrastre que se presenta principalmente en intercambiadores con condensación o cambio de fase. En la bibliografía se ha encontrado factores de corrección para el coeficiente de convección para distintas orientaciones del equipo, pero solo para *reboilers* y condensadores. Asimismo, cuando no hay cambio de fase en el equipo, se ha encontrado que no es necesario un factor de corrección dado que la diferencia puede ser despreciada.

Por consiguiente, se continuará el diseño de la carcasa empleando la metodología típica para un intercambiador de calor, aunque estos tengan normalmente una disposición horizontal.

El dimensionado de la carcasa se realiza de ultimo dado que depende de la disposición, diámetro y *pitch* de los tubos. Además, también depende de la configuración seleccionada dado que podría haber distintas recomendaciones de la claridad.

Para calcular el diámetro del haz de tubos la carcasa se emplea la Ecuación [59].

$$D_b = d_t \cdot \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{1/n_1} \quad [59]$$

Siendo el diámetro del haz de tubos D_b . Por lo tanto, además del diámetro externo de los tubos y el número de tubos es necesario conocer las constantes K_1 y n_1 . El valor de estas constantes depende de la posición de los tubos (que ha sido previamente seleccionado en el apartado 10.1. *Diseño de los tubos* una disposición triangular) así como del número de pasos por tal como se muestra la Figura 14 (19).

Triangular pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
K_1	0.319	0.249	0.175	0.0743	0.0365
n_1	2.142	2.207	2.285	2.499	2.675

Figura 14. Valores de las constantes K_1 y n_1 para una disposición triangular de los tubos (19).

De la figura se han marcado los valores seleccionados y ahora se puede calcular el *pitch* recomendado mediante la Ecuación [60].

$$p_t = 1,25 \cdot d_t \quad [60]$$

Además, empleando la Ecuación [61] se puede determinar el número de tubos en la fila central.

$$\text{Tubos centrales} = \frac{D_b}{p_t} \quad [61]$$

Para determinar la claridad (que es la distancia entre el exterior del haz de tubos y el diámetro interno de la carcasa) se emplea la Figura 15. Nuevamente, se ha marcado en la figura el tipo de intercambiador ya seleccionado, dado que de su línea se debe obtener el valor de la claridad.

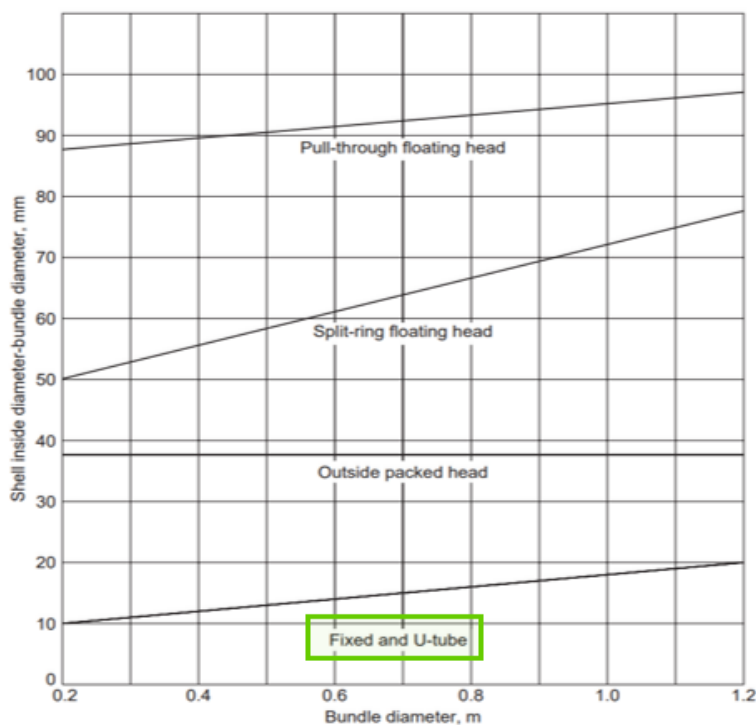


Figura 15. Valor de la claridad en función de los cabezales del equipo (19).

Sin embargo, para diámetros del haz de tubos superiores a 1,2 m, no es posible hacer una lectura de la claridad, por lo que, en dicho caso se realiza una regresión lineal que permite obtener su valor. Dicha regresión se muestra en la Ecuación [62].

$$CL = 8 \cdot 10^{-3} + 0,01 \cdot D_b \quad [62]$$

Ahora es posible ahora determinar el diámetro interno de la carcasa empleando la Ecuación [63].

$$D_i = D_b + 2 \cdot CL \quad [63]$$

Todos los resultados y los valores obtenidos para determinar el diámetro interno de la carcasa se muestran en la Tabla 22.

Tabla 22. Parámetros requeridos y el diámetro interno de la carcasa.

Parámetro	Valor
n_1	0,32
K_1	2,14
$D_b(m)$	2,48
$p_t(m)$	0,08
Tubos centrales	31
$CL(m)$	$3,27 \cdot 10^{-2}$
$D_i(m)$	2,54

Al igual que los tubos el valor de la carcasa debe ser estandarizado, siendo los estándares de TEMA se toma por lo tanto un diámetro nominal de 100 pulgadas. En el diseño mecánico será calculado el espesor

mínimo requerido para la carcasa, pero habrá que considerar también las recomendaciones de TEMA que se muestran a continuación en la Figura 16 (22).

Nominal Shell Diameter		Minimum Thickness			
		Carbon Steel		Alloy *	
		Pipe	Plate		
6	(152)	SCH. 40	-	1/8	(3.2)
8-12	(203-305)	SCH. 30	-	1/8	(3.2)
13-29	(330-737)	SCH. STD	3/8 (9.5)	3/16	(4.8)
30-39	(762-991)	-	7/16 (11.1)	1/4	(6.4)
40-60	(1016-1524)	-	1/2 (12.7)	5/16	(7.9)
61-80	(1549-2032)	-	1/2 (12.7)	5/16	(7.9)
81-100	(2057-2540)	-	1/2 (12.7)	3/8	(9.5)

Figura 16. Espesores mínimos para la carcasa según su diámetro nominal.
Los valores a la derecha se encuentran en pulgadas y a la izquierda en milímetros (22).

Normalmente, para carcasa de diámetros inferiores a 610 mm TEMA recomienda emplear tuberías estándar. Sin embargo, en este caso, ha de fabricarse mediante una chapa de acero laminada, enrollándola y soldándola (1).

Por otro lado, ha de considerarse los deflectores, también llamados *baffles*, presentes en el interior de la carcasa. Los deflectores se encargan del soporte a los tubos, evitando pérdidas de firmeza. Pero es que, además, emplearlos es el método más eficaz para tratar los problemas de vibración del haz de tubos. La vibración del haz de tubos puede causar graves daños, y con los deflectores se puede corregir, evitando el flujo cruzado y promoviendo el flujo longitudinal (1).

Estos dispositivos son placas perforadas con diámetros semejantes al diámetro de la carcasa. Asimismo, los deflectores proporcionan mejoras en el diseño en cuanto a la transferencia de calor, dado que esos dispositivos promueven la turbulencia, incrementando la velocidad del fluido y mejorando la velocidad de transferencia de calor. Para el montaje, entre los tubos y los deflectores, se empleando como soporte varillas y espaciadores, que los mantienen unidos (19).

El término de *baffle cut* se emplea para poder especificar las dimensiones del segmento removido del *baffle*. En otras palabras, el *baffle cut* es la altura del segmento que se remueve, pero expresado en porcentaje respecto a la altura total del deflector. Estos cortes pueden ser entre el 15 y el 45%. Sin embargo, para proporcionar una buena transferencia de calor lo óptimo es seleccionar entre 20 y 25%. Aunque hay diversas configuraciones para los deflectores, se ha seleccionado el estilo típico que se muestra en la Figura 17. Como se puede observar se deben instalar consecutivamente, rotándolos 180°. Además, se ha optado por un corte del 25%, el cual será utilizado más adelante (19).

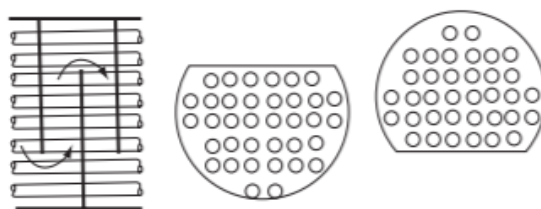


Figura 17. Configuración de los deflectores que se implementaran en el reactor (19).

Ahora bien, debe calcularse el espaciado (B) que hay entre los *baffles* usando la Ecuación [64].

$$B = c \cdot D_i \quad [64]$$

Siendo c un porcentaje del valor del diámetro de la carcasa. El rango tipo de c es entre 20 y 100%. Teniendo en cuenta que: a menor espaciado el coeficiente de transferencia de calor aumenta, se ha seleccionado para el presentes proyecto un valor c del 25%.

Por lo tanto, es posible determinar el número de *baffles* en el equipo mediante la Ecuación [65].

$$N_{baffles} = \frac{L}{B} - 1 \quad [65]$$

Los resultados del dimensionamiento de los deflectores de la carcasa se muestran en la Tabla 23.

Tabla 23. Dimensionado de los baffles del equipo.

Parámetro	Valor
c	25%
B	0,62
$N_{baffles}$	6

10.2.1. Coeficiente de convección en el lado de la carcasa

Para el cálculo del coeficiente de convección del fluido que circula por la carcasa se empleará el método de Kern. Este método ha sido obtenido mediante ensayos experimentales con intercambiadores de calor comerciales y ofrece predicciones satisfactorias del coeficiente. Sin embargo, este método no tiene en cuenta fugas o el *bypass* (flujos preferentes) en sus cálculos por lo que la caída de presión calculada por este método puede ser un poco menos precisa. Sin embargo, por lo común es aceptado este método y no se justifica el uso de métodos más elaborados para diseños cuando pueda haber incertidumbre en otros parámetros (19).

Lo primero que se debe calcular es el área de flujo cruzado para la fila de tubos centrales de la carcasa (A_s). Para ello se utiliza la Ecuación [66].

$$A_s = \frac{D_i \cdot B \cdot (p_t - d_o)}{p_t} \quad [66]$$

Posteriormente, deben calcularse la velocidad másica y lineal siguiendo las Ecuaciones [67] y [68].

$$G_s = \frac{m_{Hitec}}{A_s} \quad [67]$$

$$v_s = \frac{G_s}{\rho_{Hitec}} \quad [68]$$

Siendo:

- G_s la velocidad másica del fluido, en $\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$.
- m_{Hitec} el flujo masico del refrigerante, en kg/s .
- A_s el área de flujo cruzado, en m^2 .
- v_s la velocidad lineal, en m/s .
- ρ_{Hitec} , la densidad del refrigerante, en kg/m^3 .

El siguiente paso es calcular el diámetro equivalente de la carcasa usando la Ecuación [69].

$$d_e = \frac{1,1 \cdot (p_t^2 - 0,917 \cdot d_o^2)}{D_o} \quad [69]$$

Con estos parámetros es posible calcular los números adimensionales de Reynolds, Prandt y Nusselt.

Primero se calcula el número de Reynolds empleando la Ecuación [70].

$$Re = \frac{d_e \cdot G_s}{\mu_{Hitec}} \quad [70]$$

Siendo μ la viscosidad del fluido mostrada en la Tabla 17.

Posteriormente, se calcula el número de Prandt con la Ecuación [71].

$$Pr_t = \frac{Cp_{Hitec} \cdot \mu_{Hitec}}{k_{Hitec}} \quad [71]$$

Por último, ha de determinarse el valor del factor j_h utilizando la Figura 18 y posteriormente, ha de emplearse este valor en la Ecuación [72] para el cálculo del módulo de Nusselt.

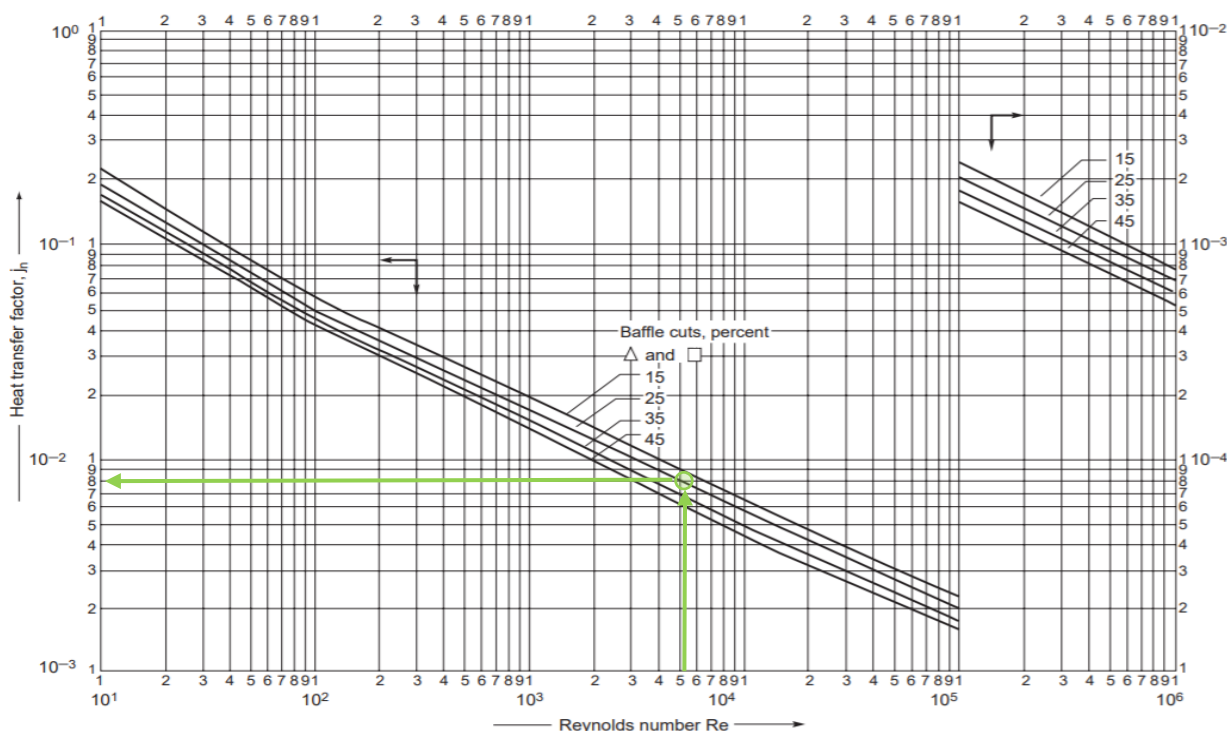


Figura 18. Factor j_h en función del número de Reynolds y el porcentaje de corte del deflector (19).

$$Nu = \frac{h_o \cdot d_e}{k_f} = j_h \cdot Re \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} \quad [72]$$

Cabe destacar que, para una primera estimación se asumirá que $\mu = \mu_w$. Siendo μ_w la viscosidad a la temperatura de la pared. Esto se debe a que normalmente el término $\left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14}$ es insignificante, sobre

todo para líquidos. Sin embargo, posteriormente se verificará que podía despreciarse este término calculando la temperatura de la pared y μ_w .

Por último, con el módulo Nusselt calculado empleando la Ecuación [72] se despeja el valor del coeficiente de la carcasa, h_o . Todos los parámetros requeridos para su cálculo y su valor se muestran en la Tabla 24.

Tabla 24. Parámetros para el cálculo del coeficiente de convección de la carcasa.

Parámetro	Valor
A_s (m ²)	$31,46 \cdot 10^{-2}$
G_s [kg/(m ² ·s)]	427,14
v_s (m/s)	0,23
d_e (m)	$4,50 \cdot 10^{-2}$
Re	5.019,96
Pr	12,47
j_h	$8,00 \cdot 10^{-3}$
Nu	92,34
h_o [W/(m ² ·°C)]	570,80

El rango típico para el coeficiente de convección forzada para líquidos es de 100 a 20000 $\frac{W}{m^2 \cdot ^\circ C}$, estando el valor contenido de 570,80 entre este rango se ha considerado razonable (25).

Ahora bien, se prosigue verificando que el término de la viscosidad puede ser despreciado. Para ello se calcula la temperatura de la pared exterior de los tubos (t_w) empleando la Ecuación [73] (19).

$$t_w = t + \frac{U_{propuesto} \cdot (T - t)}{h_o} \quad [73]$$

Siendo T la temperatura media del fluido en la carcasa y t la del fluido que circula por los tubos.

De la Ecuación [73] se obtuvo un valor de $t_w = 335,93$ °C, con este valor se calcula la viscosidad del fluido a la temperatura de la pared usando la Ecuación [41].

El resultado es $\mu_w = 2,56 \cdot 10^{-3}$ Pa·s, por lo tanto, comparado con la viscosidad del fluido mostrado en la Tabla 17, el término $\left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0,14}$ resulta de 1,06.

El valor de 1,06 es pequeño lo que justifica haber despreciado este término. De todas formas, si se aplicara esta corrección se hubiera aumentado levemente el coeficiente de transferencia de calor estimado y se disminuiría la caída de presión.

10.2.2. Caída de presión en la carcasa

Finalmente, para terminar el diseño de la carcasa se comprueba la caída de presión. Por ende, se emplea primero la Figura 19 para determinar el factor de fricción j_f .

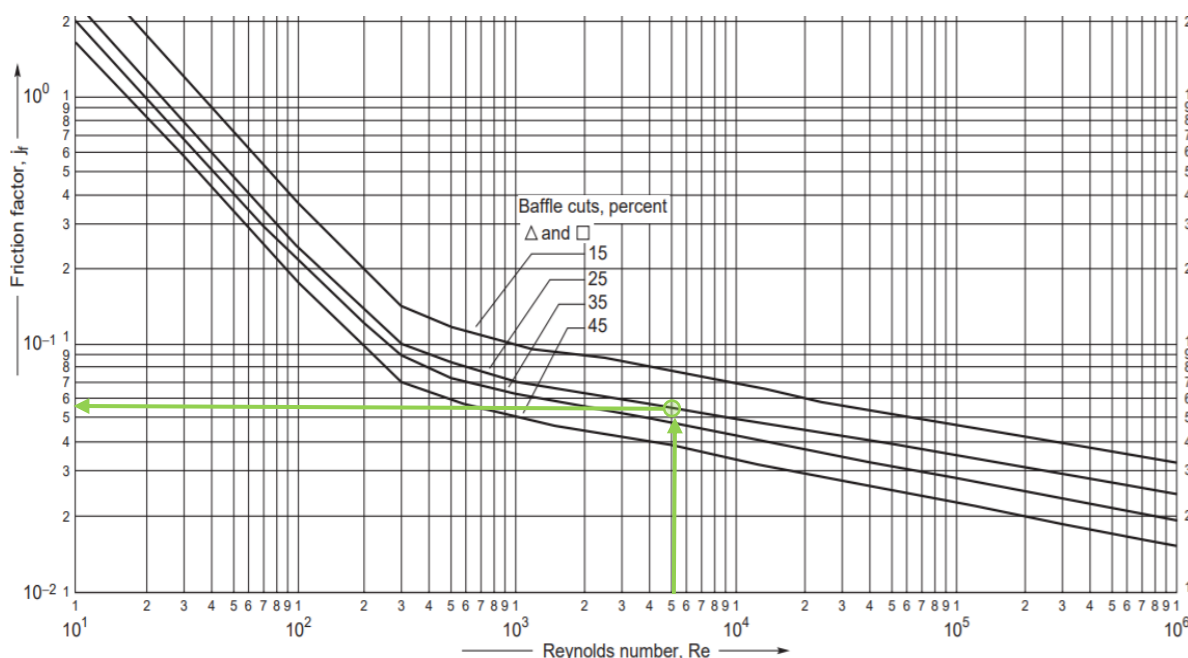


Figura 19. Factor de fricción para el cálculo de la caída de presión en función del número de Reynolds (19).

Con el factor determinado se emplea la Ecuación [74], y al igual que antes se despreciará el término de la viscosidad.

$$\Delta P = 8 \cdot j_f \cdot \left(\frac{L_t}{B}\right) \cdot \left(\frac{D_s}{d_e}\right) \cdot \frac{\rho_{Hitec} \cdot v_s^2}{2} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{-0,14} \quad [74]$$

Los resultados se muestran en la Tabla 25.

Tabla 25. Caída de presión en la carcasa.

Parámetro	Valor
j_f	$5,50 \cdot 10^{-2}$
$\Delta P(\text{bar})$	0,09

Esta caída de presión es aceptable teniendo en cuenta que para líquidos la caída de presión permitida es de hasta 0,7 bar.

10.3. Verificación del coeficiente global de convección

Los cálculos realizados anteriormente han sido realizados con un valor del coeficiente global de convección estimado. Concretamente, se estimó un valor de $107,10 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$. Sin embargo, se ha de verificar que este número sea correcto, calculando el coeficiente con los coeficientes de convección obtenidos para la carcasa y los tubos.

Este coeficiente se calcula empleando la Ecuación [75], y solo puede ser aceptado si la diferencia entre el valor estimado y el calculado es menor al 30% (19).

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_t \ln\left(\frac{d_t}{d_i}\right)}{2k_w} + \frac{d_t}{d_i h_{id}} + \frac{d_t}{d_i h_i} \quad [75]$$

Siendo:

- d_t el diámetro externo de los tubos, en m

- d_i el diámetro interno de los tubos, en m
- h_o coeficiente de convección calculado para la carcasa, en $W/(m^2 \cdot K)$
- h_{od} coeficiente de suciedad para la carcasa, en $W/(m^2 \cdot K)$
- h_{id} coeficiente de suciedad para el lado de tubos, en $W/(m^2 \cdot K)$
- h_i coeficiente de convección calculado para los tubos, en $W/(m^2 \cdot K)$
- k_w conductividad térmica del material de construcción, en $W/(m \cdot K)$

Se tiene en cuenta los coeficientes de ensuciamiento debido a las incrustaciones que se forman en la superficie del equipo a causa del continuo paso del fluido. Este es uno de los motivos por los que se sobredimensionan estos equipos, los restos depositados disminuyen el coeficiente global de transmisión dado a su baja conductividad térmica. Se ha empleado la Figura 20 para estimar el valor de los coeficientes de suciedad.

Fluid	Coefficient ($W/m^2 \cdot ^\circ C$)
River water	3000–12,000
Sea water	1000–3000
Cooling water (towers)	3000–6000
Towns water (soft)	3000–5000
Towns water (hard)	1000–2000
Steam condensate	1500–5000
Steam (oil free)	4000–10,000
Steam (oil traces)	2000–5000
Refrigerated brine	3000–5000
Air and industrial gases	5000–10,000
Flue gases	2000–5000
Organic vapours	5000
Organic liquids	5000
Light hydrocarbons	5000
Heavy hydrocarbons	2000
Boiling organics	2500
Condensing organics	5000
Heat transfer fluids	5000
Aqueous salt solutions	3000–5000

Figura 20. Valores típicos del factor de ensuciamientos según el fluido (19).

Por otro lado, para la conductividad térmica del material (acero inoxidable 304) se emplea se interpola según la temperatura entre los valores expuestos en la bibliografía (25). El cambio de la conductividad con la temperatura se puede observar en la Figura 21. La justificación de la selección de este material para la construcción del reactor se encuentra en el 11.2. Selección del material de construcción.

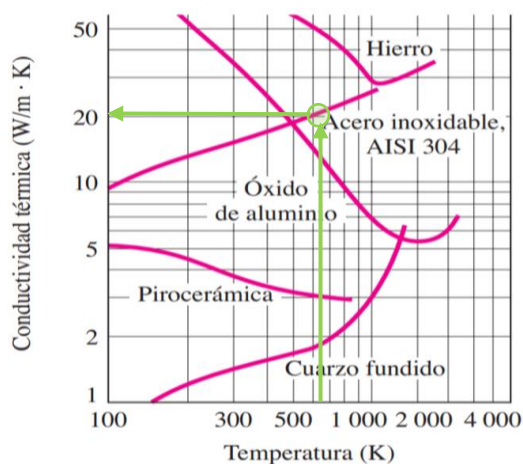


Figura 21. Variación de la conductividad térmica según la temperatura de algunos materiales (25).

El valor seleccionado de h_{od} y h_{id} es 5.000 [W/(m²·K)] y el de k_w es 20,5 [W/(m·K)]. Empleando estos valores en la Ecuación [75] se obtiene:

$$U = 105,41 \left(\frac{W}{m^2 K} \right)$$

Por lo tanto, la diferencia obtenida es:

$$diferencia \% = \frac{U_{propuesto} - U_{calculado}}{U_{propuesto}} \cdot 100 = 1,57\%$$

Se concluye que el valor propuesto es válido. Además, dado que el valor propuesto es mayor al calculado se puede garantizar que el equipo cuenta con el área suficiente para la correcta transferencia de calor.

Asimismo, se ha comprobado que la caída de presión y los coeficientes de convección están en los rangos permitidos, concluyéndose así que las dimensiones establecidas para el reactor son las apropiadas.

11. Diseño mecánico del reactor R-201

En el presente apartado se realizará el diseño mecánico del equipo, empleando las ecuación y explicaciones expuestas en el la *Parte A: Diseño Mecánico* del presente *Anexo II: Cálculos Justificativos*. Como ha sido mencionado en la *Parte A*, el diseño del reactor seguirá las reglas de construcción de *ASME Boiler & Pressure Vessel Code Section VIII Div.I*. Este código es aplicable para cualquier recipiente cerrado que se encuentre sometido a presión interna con un diámetro superior a los 150 mm. Por ende, cumpliendo el reactor con estos parámetros se prosigue con los cálculos pertinentes.

11.1. Presión y temperatura de diseño

Para el cálculo de la presión de diseño se emplearán las Ecuaciones [1] y [2] de la *Parte A: Diseño Mecánico*. Estos cálculos se realizan tanto con la presión a la que se somete la carcasa, como la presión en los tubos. Los resultados obtenidos con la Ecuación [1] son de 1,1 y 2,2 bar para la carcasa y tubos respectivamente. Sin embargo, al emplear la Ecuación [2], los resultados fueron de 2,72 y 3,72 bar, siendo estos superiores, se han seleccionado como presión de diseño.

Asimismo, se continúa calculando la temperatura de diseño, usando la Ecuación [3]. Nuevamente, se realiza el cálculo tanto para la carcasa, como para los tubos.

Todos los resultados obtenidos en este apartado se recogen en la Tabla 26.

Tabla 26. Presión y temperatura de diseño del reactor R-201.

	$P_{diseño}$ (bar)	$T_{diseño}$ (°C)
Carcasa	2,72	317,78
Tubos	3,72	377,78

11.2. Selección del material de construcción

La justificación de la selección del material se encuentra en la *Parte A: Diseño Mecánico*, siendo el material seleccionado, tanto para la carcasa del equipo, como para los tubos presentes en su interior, acero inoxidable 304. Para la selección se empleó la metodología Ashby, explicada con detalle en el apartado 4. *Selección de material de construcción*.

En conclusión, se ha empleado el criterio *leak-before-break* para la carcasa, debido que este ofrece un diseño más seguro, y para la selección de los tubos se empleó el índice nombrado como M_3 para maximizar el flujo de calor por unidad de área. Asimismo, entre los materiales que cumplieron los parámetros considerados, se seleccionó el acero inoxidable teniendo en cuenta los costes económicos y la compatibilidad química.

11.3. Cálculo de los espesores de la carcasa y tubos

Para determinar el mínimo espesor requerido para el equipo, primero se interpola el valor del esfuerzo máximo permitido, S en bar, de la Tabla 5, mostrada en la *Parte A: Diseño Mecánico* del presente Anexo II. Conociendo este dato, y empleando un grado de examen radiográfico puntual ($E=0,85$), y un factor de corrosión de 4 mm, se emplean las Ecuaciones [8] y [9] (correspondientes para el cálculo del espesor mínimo para la tensión radial y longitudinal).

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 27.

Tabla 27. Resultados del cálculo de espesores para el reactor R-201.

	S (bar)	t_r(mm)	t_l(mm)
Carcasa	846,39	8,81	6,40
Tubos	802,96	4,14	4,07

De los espesores calculados ha de seleccionarse el mayor, sin embargo, como se observa para el espesor de los tubos, si se quitan los 4 mm por corrosión, el espesor es inferior al mínimo establecido por el código ASME. Por lo tanto, como se expuso en la Parte A, se debe considerar un espesor mínimo de 1,5 mm, que corregido por la corrosión sería finalmente de 5,5 mm.

Por otro lado, siguiendo las recomendaciones de TEMA, se ha optado por seleccionar el espesor mínimo estándar de 9,53 mm (que se muestra en la Figura 16), dado que este es mayor al calculado.

En resumen, se muestran en la Tabla 28 los espesores seleccionados, con los diámetros correspondientes.

Tabla 28. Diámetros de la carcasa y los tubos con sus espesores.

	t (mm)	Diámetro interno (mm)	Diámetro externo (mm)
Carcasa	9,525	2.541,593	2.560,643
Tubos	5,500	52,500	63,500

11.4. Cabezales

Para cerrar los extremos del reactor R-201 se deben emplear dos cabezales. Siguiendo el código ASME BPV Sección VIII Div.1 parte UG-32, se han calculado los espesores para los distintos cabezales mostrados en la *Parte A: Diseño Mecánico* del presente Anexo II. Para ello, se han seguido las Ecuaciones [10], [11] y [12], los resultados se muestran en la Tabla 29.

Tabla 29. Espesores calculados para los distintos cabezales.

	Tipo de cabezal		
	Hemisférico	Elíptico	Toriesférico
t (mm)	7,46	10,93	16,27

Cabe destacar que, aunque el espesor sea mayor en los cabezales toriesféricos, estos son seleccionados dado que son más económicos, sencillos de fabricar e idóneos para recipientes que operan a una presión inferior a 15 bar, siendo este el caso.

Ahora bien, siguiendo la norma DIN 28011 para el diseño de estos cabezales, se emplean las Ecuaciones de [13], [14], [15], [16], [17] y [18], que se mostraron en la Parte A. Los cálculos obtenidos para los cabezales del reactor R-201 se recogen en la Tabla 30.

Tabla 30. Parámetros para el diseño de los cabezales.

Parámetro	Valor
$D_o = CR$ (mm)	2.574,13
KR (mm)	257,41
SF (mm)	56,93
DH (mm)	490,69
TH_i (mm)	547,62

11.5. Dimensionado del aislante

Como se muestra en la Tabla 17 la temperatura del fluido que circula por la carcasa del recipiente es extremadamente caliente, y teniendo en cuenta que es empleado con el propósito de retirar calor, se ha optado por emplear un aislante alrededor del reactor. Este aislante permite reducir las pérdidas de calor, y aumenta la seguridad del proceso para los operarios en planta que requieran estar en contacto con el equipo.

Para el dimensionado del aislante se siguen los pasos expuestos en el apartado 7. *Aislamiento térmico* de la Parte A: *Diseño Mecánico* del presente Anexo II. Como se ha mencionado, se ha seleccionado fibra de vidrio debido tanto por sus propiedades, como por el factor económico. Los parámetros de este material, y del aire, necesarios para los siguientes cálculos se recogen en la Tabla 8.

Lo primero que se calcula es el coeficiente de dilatación volumétrica del aire mediante la Ecuación [24] de la Parte A: *Diseño Mecánico* del presente Anexo II. Con este coeficiente calculado se calcula el número de Grashof mediante la Ecuación [23]. Con estos parámetros calculados es posible verificar si se cumple la correlación de la Ecuación [22] para aproximar el recipiente vertical como placas verticales.

Cabe destacar que, para la longitud del reactor que debe llevar aislante, se emplea el valor de la longitud total del cilindro menos dos veces el SF del cabezal, dado que se dejará un espaciado igual al SF del cabezal libre, tanto en cabezas como en colas del equipo, para facilitar la unión a los cabezales mediante pernos (lo cual puede observarse con mayor claridad en el plano del diseño mecánico del equipo presente en el Documento II: Planos). Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 31.

Tabla 31. Parámetros para verificar que se puede aproximar el sistema como placas verticales.

Parámetro	Valor
β (K ⁻¹)	$3,22 \cdot 10^{-3}$
Gr_L	$3,52 \cdot 10^{11}$
$35/(Gr_L^{1/4})$	$4,55 \cdot 10^{-2}$
Do/L	0,54

Por consiguiente, después de verificar que se puede estimar el sistema como placas verticales, se ha creado una representación del reactor siguiendo el esquema mostrado en la Figura 6. La representación se muestra en la Figura 22, señalando las temperaturas del fluido que circula por la carcasa, el aislante y el aire.

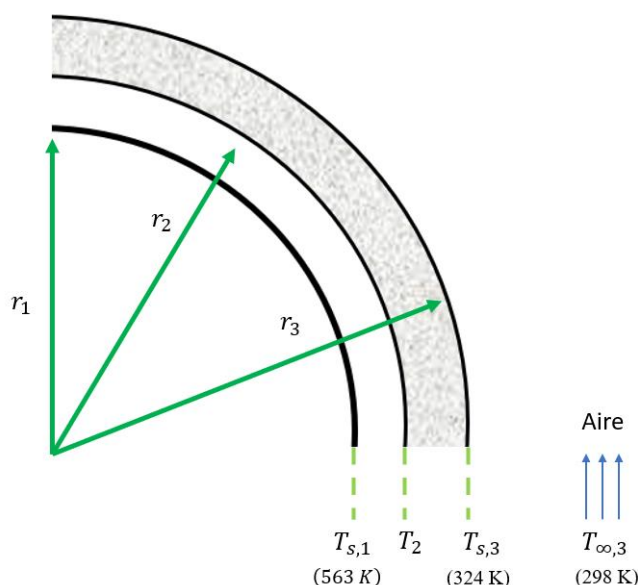


Figura 22. Representación del sistema de aislamiento en el reactor R-201. Elaboración propia.

El siguiente paso es calcular el número de Rayleigh, usando la Ecuación [26], y el módulo de Nusselt, mediante la correlación de Churchill y Chu mostrada en la Ecuación [25]. Posteriormente, con estos parámetros es posible calcular el coeficiente de convección del aire, usando la Ecuación [21].

Finalmente, con la herramienta *Solver* de Excel se resuelve el sistema de ecuaciones (Ecuaciones [19] y [20]), para determinar la única incógnita que falta, r_3 el radio con el aislante, siendo, por lo tanto, la resta de $r_3 - r_2$ el espesor del aislante requerido. Todos los resultados de estos pasos se muestran en la Tabla 32.

Tabla 32. Resultados para el espesor de aislante requerido.

Parámetro	Valor
Ra_L	$2,48 \cdot 10^{11}$
Nu_L	704,42
h_∞ W/(m ² ·K)	3,89
r_3 (mm)	1.362,83
$t_{aislante}$ (mm)	82,51

Los cálculos anteriores han sido realizados para distintas temperaturas de aislante, de forma que se seleccione un espesor óptimo. En la Figura 23 se puede observar el calor perdido frente a radio del equipo con el aislante (r_3), así como la temperatura del aislante según este diámetro.

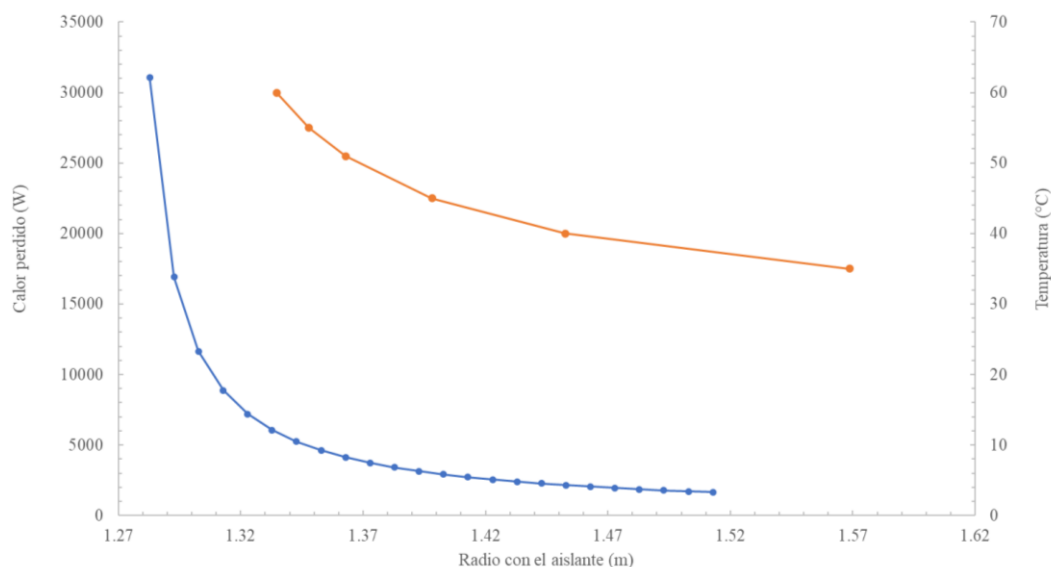


Figura 23. Calor perdido y temperatura frente al radio del equipo con aislante. Elaboración propia.

Como se puede observar a partir un radio r_3 de 1,35 m el calor perdido, al aumentar el radio, no disminuye mucho. Siendo prudente llegar a un compromiso entre el coste del espesor del aislante y el calor que se perderá a la atmósfera. Asimismo, el espesor del aislante aumenta notoriamente si se desea que la temperatura del aislante sea inferior a 50 °C.

Es por ello que, los cálculos mostrados anteriormente se han realizado para una temperatura de 51 °C, resultando en un espesor de 82,51 mm. Sin embargo, este valor ha de estandarizarse. Concretamente, siguiendo los espesores estándar de la compañía Owens Corning[®], se ha seleccionado un espesor de aislante de 89 mm (siendo este el valor superior más cercano al calculado). Con el espesor seleccionado finalmente de 89 mm la temperatura calculada del aislante es de 49,21 °C (26).

11.6. Aberturas y conexiones

Como todos los equipos en la industria, el presente equipo requiere boquillas. En concreto este reactor necesita cuatro aberturas para la entrada y salida de la corriente de procesos, y de las sales fundidas usadas como fluido refrigerante. La entrada gas de la corriente se encontrará en la parte inferior del equipo, entrando por el cabezal, situando la salida en el cabezal superior. Por otro lado, para las sales las aberturas se encontrarán a los laterales del equipo. Del mismo modo, ha de poseer boquillas para el sistema de control del equipo, siendo una de ellas para la válvula de alivio PSV-203, la cual será dimensionada más adelante, así como para venteo y drenaje del equipo. Además, para compensar el aumento de las tensiones debido a las aberturas, como se expuso en la *Parte A: Diseño Mecánico*, se puede contar con almohadillas soldadas.

11.7. Análisis de cargas

Como se ha mencionado en la *Parte A: Diseño Mecánico* del presente Anexo II, concretamente en el apartado 9. *Cargas*, los recipientes a presión se diseñan para que puedan soportar la peor combinación de cargas sin fallar. Las cargas a tener en cuenta para el diseño del reactor son: cargas por peso y por viento; siendo despreciadas las cargas por actividad sísmica debido a la zona de ubicación de la planta. Los cálculos realizados siguiendo las ecuaciones del apartado 9. *Cargas* se muestran a continuación.

11.7.1. Cargas por peso

Para el reactor R-201 se debe considerar el peso ejercido por el propio recipiente, así como el peso del aislante, catalizador y de los tubos. Asimismo, para la prueba hidráulica se calculará la carga por peso del líquido que llena el recipiente. Se empieza calculando el peso de la carcasa (W_v), que incluye el peso de los cabezales, pero no el peso de los accesorios internos, mediante la Ecuación [27] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Los parámetros empleados para este cálculo, así como el resultado, se recogen en la Tabla 33.

Tabla 33. Cargas por peso del recipiente.

Parámetro	Valor
C_W	1,15
ρ_m (kg/m ³)	7.900,00
D_m (m)	2,55
W_v (N)	54.538,71

Por otro lado, se emplea la Ecuación [28] para calcular la carga por peso debido al aislante, mostrando los parámetros y el resultado en la Tabla 34.

Tabla 34. Carga por peso del aislante.

Parámetro	Valor
r_2 (m)	1,28
r_3 (m)	1,37
$L_{Aislante}$ (m)	4,77
$V_{Aislante}$ (m ³)	3,53
$\rho_{Aislante}$ (kg/m ³)	105,00
$W_{Aislante}$ (N)	7.274,15

Posteriormente, siendo la Ecuación [33] es posible determinar el volumen ocupado por los tubos en el interior del reactor, y con este volumen y la Ecuación [34], se calcula la carga ejercida por estos tubos. Los resultados se muestran en la Tabla 35.

Tabla 35. Carga por peso de los tubos que contiene el reactor en su interior.

Parámetro	Valor
V_t (m ³)	3,99
W_t (N)	309.276,29

Asimismo, conociendo la masa de catalizador presente en el equipo (mostrada en *Diseño de los tubos*) se emplea la Ecuación [35] de la *Parte A: Diseño mecánico* para determinar su carga, W_{CF} . Finalmente, para la prueba hidráulica se debe considerar el peso máximo del recipiente cuando este se encuentra lleno de agua, para ello, se debe estimar el peso del agua contenida en el recipiente mediante la Ecuación [31].

Aunque para emplear la Ecuación [31] primero se calcula el volumen existente en el interior de la carcasa, V_{ti} (Ecuación [36]). Posteriormente, se calcula el volumen ocupado por el catalizador (usando la Ecuación [37]). Con todos estos parámetros calculados, es posible determinar el volumen ocupado

por el líquido usando la Ecuación [38], y con este ir a la Ecuación [31] y determinar la carga por su peso. En la Tabla 36 se muestran los parámetros empleados junto con los resultados obtenidos.

Tabla 36. Cargas por peso del catalizador y del líquido.

Parámetro	Valor
W_{CF} (N)	77.589,17
V_{ti} (m ³)	24,76
$V_{catalizador}$ (m ³)	2,93
$V_{liquido}$ (m ³)	17,84
W_{Agua} (N)	174.978,65

En conclusión, se puede observar en la Tabla 37 la carga total ejercida en el reactor R-201 al encontrarse vacío y cuando se encuentra lleno.

Tabla 37. Cargas por peso totales del reactor R-201.

Carga total (kN)	Valor
Vacío	448,68
Lleno	623,66

11.7.2. Cargas por viento

Como se explicó en el apartado 9.2. *Cargas por viento* de la Parte A: *Diseño mecánico*, el equipo actúa como vigas en voladizo. Para calcular la carga por el viento se determina, por lo tanto, el momento flector mediante la Ecuación [40]. Para ello, primero se debe calcular la presión del viento, P_w , (mediante la Ecuación [42]), y la carga por unidad de longitud, W , (con la Ecuación [41]).

Cabe destacar que, se considera una velocidad del viento de 160 km/h y una altura del soporte de 2,50 m. La altura del soporte es necesaria para determinar la altura del equipo desde el suelo, x . Asimismo, se emplea el diámetro equivalente que corresponde al diámetro externo del equipo, incluyendo los espesores de la carcasa y del aislante. Los resultados y parámetros se recogen en la Tabla 38.

Tabla 38. Cargas por viento.

Parámetro	Valor
P_w (N/m ²)	1.280,00
D_{eff} (m)	2,74
W (N/m)	3.505,46
x (m)	7,93
M_x (N·m)	110.154,32

11.8. Análisis de esfuerzos

Calculadas todas las cargas a las que se somete el reactor, se prosigue verificando que este recipiente sea capaz de soportarlas mediante el estudio de esfuerzos.

11.8.1. Esfuerzos primarios

Los primeros esfuerzos que se calculan son los longitudinales (σ_L) y radiales (σ_R) debido a la presión interna del equipo. Estos se calculan siguiendo la explicación y las Ecuaciones [43] y [44] expuestas en la Parte A: *Diseño Mecánico*.

Posteriormente, se calcula el esfuerzo debido al peso del recipiente (σ_w) mediante la Ecuación [45]. Por último, se calculan los esfuerzos de flexión se derivan de los momentos flectores (σ_b) mediante la Ecuación [46]. Cabe destacar que este último esfuerzo se considera positivo si se está en contra del viento, y negativo si se está a favor. Los resultados de estos esfuerzos, junto con los parámetros requeridos para calcularlos, se muestran en la Tabla 39.

Tabla 39. Esfuerzos primarios del reactor.

Parámetro	Valor
σ_L (kN/m ²)	18.144,71
σ_R (kN/m ²)	36.289,41
σ_w (kN/m ²)	5.877,46
I_v (m ⁴)	6,21·10 ⁻²
σ_b (kN/m ²)	± 2.270,89

Con estos esfuerzos calculados es posible determinar el esfuerzo longitudinal total (σ_z) siguiendo la Ecuación [48]. Teniendo este esfuerzo un valor de 9.996,35 kN/m² usando el valor negativo de σ_b , y 14.538,15 kN/m² empleando el valor positivo.

11.8.2. Esfuerzos principales

Como se ha explicado en la *Parte A: Diseño mecánico*, se calculan los esfuerzos primarios siguiendo las Ecuaciones [49], [50] y [51]. Los resultados obtenidos para este equipo se muestran en la Tabla 40.

Tabla 40. Esfuerzos primarios del reactor.

Parámetro	Con el viento en contra	Con el viento a favor
σ_1 (kN/m ²)	36.289,41	36.289,41
σ_2 (kN/m ²)	14.538,15	9.996,35
σ_3 (kN/m ²)	136	136

11.8.3. Esfuerzos máximo permisible

Para verificar que el espesor de la carcasa del reactor no exceda el esfuerzo establecido por el material de construcción, se calcula el esfuerzo máximo permisible, $S_{permisible}$, mediante las Ecuaciones [52], [53] y [54] (seleccionando el mayor valor resultante). Los resultados se muestran en la Tabla 41, como se puede observar el mayor valor corresponde a 36.153,41 kN/m², lo que equivale a 361,53 bar. Por consiguiente, como este valor es inferior al esfuerzo máximo permisible por el material seleccionado, se comprueba que los resultados son favorables y no se requiere cambiar de material.

Tabla 41. Resultados de los esfuerzos máximos permisibles del recipiente.

Parámetro	Con el viento en contra	Con el viento a favor
$(\sigma_1 - \sigma_2)$ (kN/m ²)	21.751,27	26.293,07
$(\sigma_1 - \sigma_3)$ (kN/m ²)	36.153,41	36.153,41
$(\sigma_2 - \sigma_3)$ (kN/m ²)	14.402,15	9.860,35

11.8.4. Esfuerzos de compresión y estabilidad elástica

Como ha sido explicado en el apartado 10.4 de la *Parte A: Diseño mecánico*, se debe verificar que el valor del esfuerzo máximo de compresión en la carcasa no exceda el valor del esfuerzo crítico de compresión. Para ello se emplean las Ecuaciones [55] y [56], cuyos resultados se muestran en la Tabla 42.

Tabla 42. Esfuerzo máximo y crítico de compresión.

Parámetro	Valor
σ_c (kN/m ²)	24.022,17
$\sigma_{c,crítico}$ (kN/m ²)	74.395,37

Se concluye, por lo tanto, que el diseño mecánico del reactor es adecuado, dado que el valor obtenido es inferior al esfuerzo de pandeo crítico.

11.9. Soporte del equipo

El equipo diseñado en el presente documento, el reactor R-201, se trata de un reactor multitubular por el que circula el fluido gaseoso entre las partículas catalizadoras. Es por ello que, su disposición es vertical, lo que permite a su vez una reducción de espacio ocupado en la planta por el equipo. Por ende, el soporte seleccionado es de tipo falda, el cual no imponen cargas concentradas, y es idóneo para los recipientes con orientación vertical.

Para el diseño del soporte, se ha seleccionado el mismo espesor que poseen los cabezales, y se emplean las Ecuaciones [57],[58],[59],[60],[61] y [62], mostradas en la *Parte A: Diseño mecánico*, para verificar que con este espesor el soporte sea capaz de resistir: las cargas por el peso muerto del recipiente y los momentos de flexión ejercidos. Por consiguiente, siguiendo la explicación expuesta en la Parte A, se obtienen los resultados mostrados en la Tabla 43.

Tabla 43. Parámetros para el diseño del soporte tipo falda del reactor.

Parámetro	Valor
σ_{bs}	2.270,96
σ_{ws}	8.169,59
$\hat{\sigma}_s$ máximo (tracción)	-3.606,50
$\hat{\sigma}_s$ máximo (compresión)	10.440,56
$0,125 \cdot E_y \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) \cdot \sen \theta$	87.835,53
$S \cdot E \cdot \sen \theta$	88.179,21

Como se puede observar se cumplen las restricciones expuestas en las Ecuaciones [63] y [64], dado que $10.440,56 < 87.835,53$, y $-3.606,50$ es menor a $88.179,21$. Por consiguiente, se concluye que el soporte tendrá una altura de 2,5 m y un espesor de 9,525mm.

12. Válvula de alivio PSV-203

Siguiendo lo expuesto en el apartado 12. *Válvulas de alivio* de la *Parte A: Diseño mecánico* del presente anexo, se calculan los parámetros requeridos para el dimensionamiento de la válvula de alivio. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 44.

Tabla 44. Parámetros para el dimensionado de la válvula de alivio del equipo.

Parámetro	Valor
Presión máxima acumulada (bar)	4,09
Presión de consigna (bar)	3,72
Sobrepresión permitida (bar)	0,37
Presión de alivio (bar)	91,88
Presión crítica de flujo (bar)	2,21
C	349,25
A (mm ²)	6.292,85

Por consiguiente, siguiendo el catálogo Crosby se selecciona la válvula de alivio con un orificio tipo Q, estilo JOS,/JBS con capó cerrado y un orificio de 7.129 mm².

13. Hoja de especificaciones del equipo

Planta de producción de 2-propenal a partir de propileno			
REACTOR CATALÍTICO HETEROGÉNEO DE LECHO FIJO			
Nombre del equipo		Reactor R-201	
Etiqueta del equipo		R-201	
Código de diseño		ASME BPV Sección VIII Div. 1	
Diámetro máximo (incluido aislante)		mm	2.738,64
Altura total (desde el suelo)		m	7,94
DATOS DEL PROCESO			
Número de tubos		816	
Cabezas	Caudal de vapor	kg/s	3,46
	Temperatura de operación	°C	350,00
	Presión de operación	bar	1,91
	Densidad del vapor	kg/m³	1,06
Colas	Caudal de vapor	kg/s	3,46
	Temperatura de operación	°C	350,00
	Presión de operación	bar	2,00
	Densidad del vapor	kg/m³	1,10
Tipo de refrigerante		Sales fundidas	
Tipo de catalizador		Molibdato de bismuto multicomponente	
Forma del catalizador		Esférica	
Diámetro del catalizador		mm	4,50
Masa de catalizador		kg	7.909,19
Altura del lecho		m	4,88
Volumen del lecho		m³	8,62
Densidad del lecho		kg/m³	920,00
Porosidad del lecho		0,66	
CONSTRUCCIÓN Y MATERIALES			
Material de la carcasa		Acero inoxidable 304	
Diámetro interno de carcasa		mm	2.541,59
Diámetro externo de carcasa		mm	2.560,64
Altura de la carcasa cilíndrica		m	4,88
Altura del equipo con cabezales incluidos		m	5,99
Temperatura de diseño de carcasa		°C	317,78
Presión de diseño de carcasa		bar	2,72
Caudal del refrigerante por carcasa		kg/s	134,40
Número de tubos		816,00	
Diámetro interno de los tubos		mm	52,50
Diámetro externo de los tubos		mm	63,50
Material de los tubos		Acero inoxidable 304	
Pitch		mm	80,00
Área de contacto		m²	794,39
Número de baffles		6,00	
Espaciado entre baffles		mm	619,00
Baffle cut		%	25,00
Caída de presión total		bar	0,09
NOTAS			
El reactor cuenta con dos cabezales toriesféricos, superior e inferior, que cubren sus extremos. La carcasa se encuentra recubierta por 89 mm de fibra de vidrio, empleada como material aislante. El soporte del equipo es de tipo falda recta, cuya altura es de 2,50 m.			

14. Bibliografía

1. **PERRY, R.** *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. Nueva York: McGraw-Hill, 1997. ISBN: 0-07-049841-5.
2. **VEDRINE, J.** *Metal Oxides in Heterogeneous Catalysis*. París: Elsevier, 2018. ISBN: 978-0-12-811631-9.
3. **GANZER, G. & FREUND, H.** Kinetic Modeling of the Partial Oxidation of Propylene to Acrolein: A Systematic Procedure for Parameter Estimation Based on Non-isothermal Data. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2019, 58, 5, 1857-1874. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b05583>.
4. **VAN VUUREN, P.** *Selective Oxidation of Propene to Acrolein on Bi₂Mo₃O₁₃ Nano-particles*. [En línea] Stellenbosch: University of Stellenbosch, 2005. [Consultado en marzo 2021]. Tesis Doctoral. Disponible en: <http://hdl.handle.net/10019.1/2972>
5. **SETYOWATI, S.** *Catalytic Partial Oxidation of Propylene for Acrolein Production*. [En línea] Perth: Department of Chemical Engineering of Curtin University, 2011. [Consultado en marzo 2021]. Tesis Doctoral. Disponible en: <http://hdl.handle.net/20.500.11937/584>
6. **CHILDRESS, D., HAYES, W. & POPPE, R.** United States Patent 4.129.600. *Method for Making Acrolein and Catalyst*. [En línea] 1978. [Consultado en abril 2021]. Disponible en: <https://patents.google.com/patent/US4129600A/en>.
7. **MICHIO, T. & HIDEOTO, H.** United States Patent 2002/013.6678A1. *Fixed-Bed Shell-and-Tube Reactor*. [En línea] Nippon Shokubai Co Ltd, 2002. [Consultado en abril 2021]. Disponible en: <https://patents.google.com/patent/US7850928B2/en>.
8. **TURTON, R., BAILIE, R., WHITING, W & SHAEIWITZ, J** *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes*. 3º ed. New Jersey: Prentice Hall, 2009. ISBN: 0-13-512966-4.
9. **HAYNES, W.** *Handbook of Chemistry and Physics 97th Edition*. Colorado: CRC Press, 2017. ISBN-10 : 1498754287.
10. **ERTL, H., SCHUTH F. & WEITKAMP J.** *Handbook Of Heterogeneous Catalysis*. Weinheim: WILEY, 2008. ISBN 978-3527312412.
11. **FOGLER, S.** *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. 4ª ed. Naucalpan de Juárez: PEARSON Prentice Hall, 2008. ISBN: 978-970-26-1198-1.
12. **DITTMER, A., YANG, F. & MUHLER, M.** *Synthesis and Characterization of Bismuth Tungstate-supported Molybdena Catalysts for the Selective Oxidation of Propene and 1-Butene*. 2016. Tesis Doctoral. Ruhr-Universität Bochum.
13. **MELZI, N., KHAOUANE, L., AMMI, Y., HANINI, S., LAIDI, M., & ZENTOU, H.** Comparative Study of Predicting the Molecular Diffusion Coefficient for Polar and Non-polar Binary Gas Using Neural Networks and Multiple Linear Regressions. *Kemija u industriji: Časopis kemičara i kemijskih inženjera Hrvatske*, 2019, 68, 573-582. DOI: 10.15255/KUI.2019.010.
14. **MCCABE, W., SMITH, J & HARRIOTT, P.** *Operaciones unitarias en ingeniería química*. 7º ed. Ciudad de México : Mc Graw Hill, 2007. ISBN-10: 970-10-6174-8.
15. **SMITH, R.** *Chemical Process Design and Integration*. West Sussex : John Wiley & Sons, 2005. ISBN 0-471-48680-9.
16. **LEI, M., LATIFI, F. & TRETJAK, S.** Optimization of an acrolein production process in a pilot-scale fixed-bed reactor. *Computer Aided Chemical Engineering*. Elsevier, 2016, 1261-1266. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-444-63428-3.50215-0>.
17. **ULLMAN, F.** *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*. 5º ed. . Michigan : VCH, 1988. ISBN: 3527201114.
18. **Evonik Corporation.** SEPURAN® Noble: Membrane Technology for Efficient Helium Recovery & Purification. [En línea] 2020. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://corporate.evonik.com/Downloads/membrane-separation/sepuran-noble-sellsheet.pdf>.
19. **TOWLER G. & SINNOTT R.** *Chemical Engineering Design*. Elsevier Inc., 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1.

20. **PREMLALL, K. & LOKHAT, D.** Reducing Energy Requirements in the Production of Acrylic Acid: Simulation and Design of a Multitubular Reactor Train. *Energies*, 2020, 8, 1971.
21. **SERRANO-LOPEZ, R., FRADERA, J. & CUESTA-LOPEZ, S.** Molten salts database for energy applications. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 2013, 73, 97-102. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2013.07.008>.
22. **Tubular Exchanger Manufacturers Association, Inc.** *TEMA Standards*, 2019.
23. **LOPEZ, A. & BODALO, A.** Simulación de un reactor-cambiador. Parte I. *Anales de la Universidad de Murcia (Ciencias)*, 1977, 207-218.
24. **MANSOORI, Z., SAFFAR-AVVAL, M., BASIRAT, H. & AHMADI, G.** Experimental study of turbulent gas–solid heat transfer at different particles temperature. *Experimental thermal and fluid science*, 2004, 28, 6, 655-665. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2003.10.003>
25. **ÇENGEL, Y. & CHAJAR, A.** *Transferencia de calor y masa*. 4º ed. México: McGraw Hill, 2011. ISBN: 978-607-15-0540-8.
26. **Owens Corning.** FIBERGLAS™ PIPE AND TANK INSULATION: FIBERGLASS INSULATION. [En línea] 2019. [consultado mayo de 2021]. Disponible en: <https://dcpd6wotaa0mb.cloudfront.net/mdms/dms/EIS/14728/14728-Fiberglas-Pipe-and-TankInsulation-Product-Data-Sheet.pdf?v=1576415262000>.

PARTE C:
COLUMNA DE
ABSORCIÓN T-302

ÍNDICE

1.	Introducción	1
2.	Selección del disolvente	2
3.	Selección del equipo de contacto	2
4.	Selección del relleno.....	3
5.	Diseño de la columna.....	4
5.1.	Balance de materia y equilibrio	4
5.2.	Número de unidades de transferencia	6
5.3.	Diámetro de columna y caída de presión	7
5.4.	Retención de líquido en la columna	9
5.5.	Altura de relleno.....	10
6.	Diseño de la columna de absorción T-302	14
6.1.	Balance de materia y datos equilibrio	15
6.2.	Número de unidades de transferencia	17
6.3.	Diámetro de columna y caída de presión	17
6.4.	Retención de líquido en la columna	19
6.5.	Altura de relleno.....	20
7.	Diseño mecánico.....	24
7.1.	Presión de diseño	24
7.2.	Temperatura de diseño	24
7.3.	Mínimo espesor de carcasa requerido	25
7.4.	Cabezales.....	25
7.5.	Aberturas y conexiones.....	26
7.6.	Cargas	26
7.6.1.	Cargas por peso.....	26
7.6.2.	Cargas por viento.....	26
7.7.	Esfuerzos	27
7.7.1.	Esfuerzos primarios	27
7.7.2.	Esfuerzos principales	27
7.7.3.	Esfuerzo máximo permisible.....	28
7.7.4.	Esfuerzos de compresión y estabilidad elástica	28
7.8.	Soportes.....	28
7.9.	Válvula de alivio PSV-320	29
8.	Hoja de especificaciones.....	30
9.	Bibliografía.....	30

1. Introducción

La absorción de gases se trata de la eliminación o recuperación de uno o más componentes de una mezcla de gases absorbiendo estos en un líquido apropiado. Es la segunda gran operación de ingeniería química basada en la transferencia de masa en una interfase controlada en gran medida por las tasas de difusión (1).

Es de suma importancia tener en cuenta el contacto íntimo de corrientes gaseosas y líquidas ya que de este contacto dependerá la eficacia del equipo. La teoría detrás del mecanismo de absorción es la siguiente:

La teoría de las dos películas (two-film theory): Es una teoría desarrollada por Whitman en la cual se explica que el material es transferido en su mayor parte por corrientes de convección, y las diferencias de concentración se consideran insignificantes excepto en las proximidades de la interfaz entre las fases. A ambos lados de esta interfaz se supone que las corrientes se extinguen y que existe una fina película de fluido a través de la cual la transferencia se efectúa únicamente por difusión molecular. Esta película será un poco más gruesa que la subcapa laminar, porque ofrece una resistencia equivalente a la de toda la capa límite. Dependiendo de la concentración del componente que se va a absorber se puede aplicar la ley de Fick (bajas concentraciones) o la ley de Stefan (altas concentraciones) (1).

La dirección de transferencia de materia a través de la interfaz no depende únicamente de la diferencia de concentración, sino también de la relación de equilibrio. El factor que controla la transferencia será la tasa de difusión a través de las dos películas donde se considera que reside toda la resistencia. El cambio en la concentración de un componente a través de las fases gaseosa y líquida se muestra en la Figura 1.

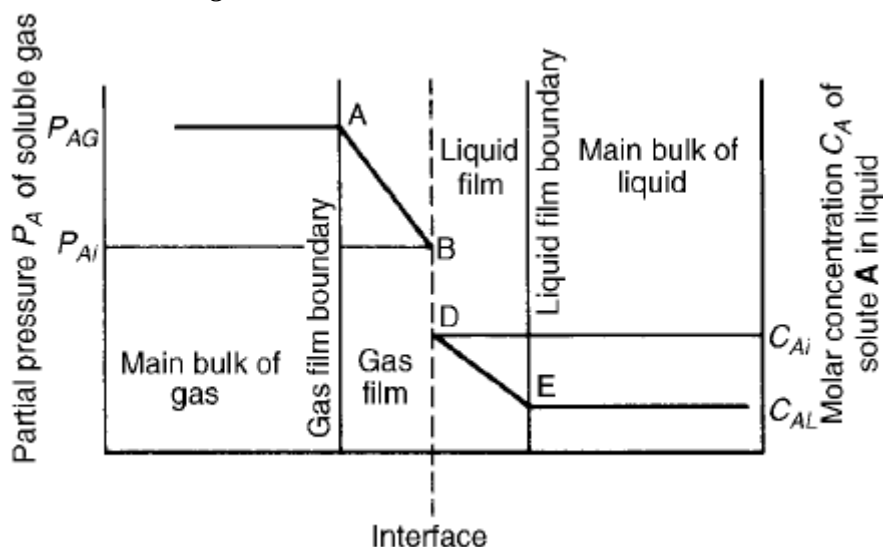


Figura 1. Perfil de concentración para la absorción del componente A (1).

Donde:

- P_{ag} es la presión parcial en la fase gaseosa.
- P_{ai} es la presión parcial en la interfase.
- C_{al} es la concentración en la fase líquida.
- C_{ai} es la concentración en la interfase.

2. Selección del disolvente

Para la selección del disolvente a utilizar se deben considerar diversos aspectos, como los siguientes (1):

- Afinidad con el soluto: esto quiere decir que la selectividad que presenta el solvente para absorber al soluto viene dada por la solubilidad. Mientras más soluble sea el soluto en el solvente, en comparación al resto de componentes de la corriente, será de mayor utilidad.
- Estabilidad: el disolvente debe ser químicamente estable para evitar reacciones no deseadas que puedan poner en peligro la integridad del equipo.
- Baja viscosidad: se desea que tenga una viscosidad baja para no ralentizar la velocidad de absorción, y mejorar los parámetros de inundación y tener un mejor intercambio de calor.
- Coste: que tenga un coste accesible y su forma de aplicar no presente costes a mayores.
- Corrosividad: que sea poco corrosivo para que el equipo aumente su vida útil.
- Baja toxicidad: para aumentar la seguridad en la zona de trabajo.

Para el presente proyecto se decidió utilizar agua como disolvente aprovechando su bajo coste y la solubilidad que presenta frente a la acroleína.

3. Selección del equipo de contacto

En el caso del equipo de contacto, se tienen dos opciones a elegir normalmente: platos o relleno. La elección entre alguno de estos dos dependerá de una serie de factores y siempre teniendo en cuenta el coste del diseño final. A continuación se presentará una lista de ventajas y desventajas para cada tipo de contacto: (1)

- Las columnas empaquetadas no son apropiadas para caudales líquidos pequeños.
- La retención de líquido es menor en una columna empaquetada que en una de platos, es una ventaja en la parte de seguridad del equipo ya que si se trabaja con componentes tóxicos o inflamables es importante que esta retención sea lo menor posible.
- Para líquidos corrosivos utilizar una columna empaquetada será más económico que una columna de platos.
- Es más fácil prever la retirada de corrientes laterales de las columnas de platos.
- La caída de presión por etapa de equilibrio (HETP) puede ser menor para una columna empaquetada que para una columna de platos.
- Las columnas de platos se pueden diseñar con más precisión que las columnas empaquetadas. En las columnas empaquetadas se tiene cierta incertidumbre de que se pueda mantener una buena distribución de líquido a lo largo de la columna en todas las condiciones de funcionamiento, particularmente en columnas grandes.

Para el diseño de la columna de absorción del presente proyecto se optó por una columna de relleno debido al gran caudal de líquido utilizado y, que al trabajar con sustancias de alta peligrosidad como la acroleína se busca una retención de líquido menor. En la Figura 2 se muestra un ejemplo de una columna de relleno convencional.

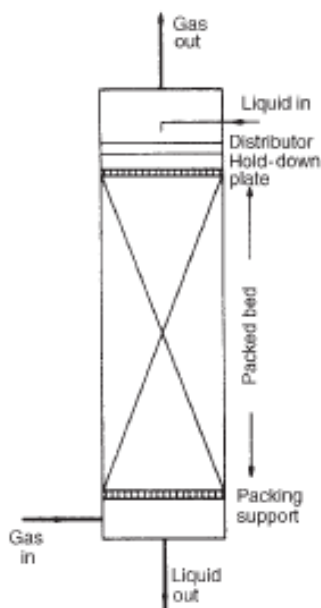


Figura 2. Columna de absorción de relleno (1).

4. Selección del relleno

El relleno debe cumplir una serie de requisitos, los cuales se presentan a continuación (1):

- Proporcionar un área superficial amplia, un área interfacial grande entre el gas y el líquido.
- Ser una estructura abierta con baja resistencia al flujo de gas.
- Proporcionar una distribución uniforme del líquido en la superficie del relleno.
- Proporcionar un flujo uniforme de gas a través de la sección transversal de la columna.

Los tipos de relleno pueden dividirse en dos grupos:

- Rellenos con geometría regular como pueden ser rellenos estructurados, rejillas y anillos apilados.
- Rellenos al azar, los cuales tienen formas peculiares y patentadas. Estos son introducidos en la columna y toman una disposición aleatoria dentro de esta.

En la Figura 3 se muestran ejemplos de tipos de rellenos al azar y estructurados.

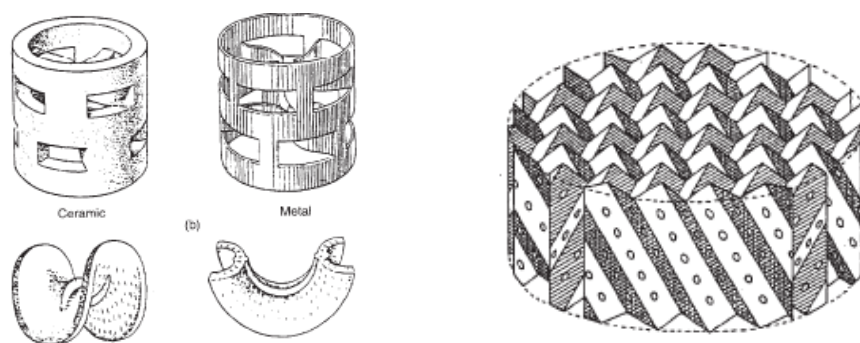


Figura 3. Ejemplos de rellenos estructurados y al azar (1).

Para la columna del presente diseño se ha decidido utilizar el relleno *Berl saddles* el cual puede ser traducido como monturas de Berl. Los datos del relleno escogido se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Características del relleno (2).

Relleno	Material	Diámetro (mm)	Fp (ft ² /ft ³)	a (m ² /m ³)	ε	Ch	Densidad (kg/m ³)
Monturas de Berl	Cerámica	25	110	260	0,68	0,62	720

Se ha verificado que el tamaño del relleno no exceda 1/30 del diámetro de la columna, para de esta manera evitar posibles problemas de distribución del líquido.

5. Diseño de la columna

Para el diseño de la columna de absorción, una vez decidido el equipo de contacto y el relleno a utilizar, se procede de la siguiente manera:

1. Desarrollar el balance de materia de la columna y obtener el equilibrio de los componentes a tomar en cuenta.
2. Calcular el número de unidades de transferencia.
3. Calcular la retención del líquido.
4. Calcular el diámetro de la columna y la caída de presión.
5. Calcular la altura de unidades de transferencia y la altura total del relleno.

5.1. Balance de materia y equilibrio

En la torre de absorción T-302 se trabajará con flujos en contracorriente, el gas asciende por la torre poniéndose en contacto con el líquido que desciende. Para efectos del diseño solo se tomarán en consideración los caudales de acroleína y agua, tomando el resto de los componentes de la corriente como inertes. Por lo general, se suele referir los flujos a los componentes inertes. De esta manera, las composiciones y caudales vienen determinadas por las ecuaciones [1], [2], [3] y [4] (1).

$$Y = \frac{y}{1-y} \quad [1]$$

$$X = \frac{x}{1-x} \quad [2]$$

$$G' = G \cdot (1 - y) \quad [3]$$

$$L' = L \cdot (1 - x) \quad [4]$$

Donde:

- X e Y son las relaciones molares de líquido y gas, respectivamente en relación al inerte.
- X e y son las fracciones molares de líquido y gas, respectivamente.
- G' y L' son los flujos molares en relación al inerte, en kmol/h.
- G y L son los flujos molares de gas y líquido, en kmol/h.

Como la concentración de soluto es menor a un 10%, los caudales de gas y líquido se consideran constantes a través del relleno. En la Figura 4 se muestra una representación de la columna de absorción y la interacción de los caudales.

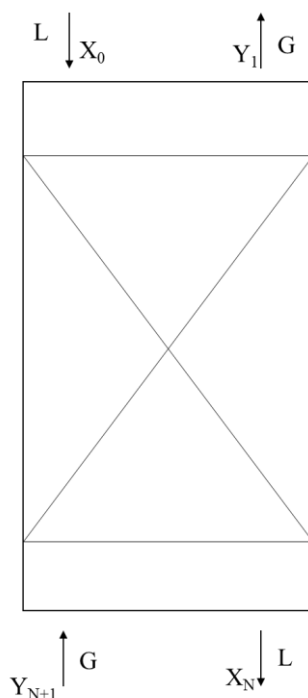


Figura 4. Representación de la columna de absorción. Elaboración propia.

Donde:

- Y_{N+1} es la concentración en relación al inerte a la entrada del gas.
- Y_1 es la concentración en relación al inerte a la salida del gas.
- X_N es la concentración en relación al inerte a la salida del líquido.
- X_0 es la concentración en relación al inerte a la entrada del líquido.

Realizando un balance de materia al componente a separar, en este caso acroleína, entre la entrada y salida de la torre se obtiene la Ecuación [5], a partir de esta Ecuación se puede obtener la Ecuación [6], la cual representa la recta de operación (1).

$$G' \cdot (Y_{n+1} - Y) = L' \cdot (X_N - X) \quad [5]$$

$$Y = \frac{L'}{G'} \cdot (X - X_N) + Y_{N+1} \quad [6]$$

Luego de tener la recta de operación, se deben determinar las condiciones de equilibrio del sistema líquido-gas. Para el presente diseño se considera que se cumple la ley de Henry, la cual relaciona la presión parcial del soluto en la fase gas con su concentración en el líquido. En la Ecuación [7] se presenta la expresión de la ley de Henry (1).

$$P_A = H \cdot C_A \quad [7]$$

Donde:

- P_A es la presión parcial del componente A en la fase gas.
- C_A es la concentración del líquido.
- H es la constante de Henry.

Como ya se tienen los valores de composición y el valor de la constante de Henry para la temperatura de operación (20 °C), se obtienen los datos de equilibrio referidos a las presiones

parciales obtenidas. Asumiéndose que se cumple la ley de Raoult, mostrada en la Ecuación [8], se puede sustituir llegando a la Ecuación [9], la cual sirve para representar el equilibrio en función de la presión total del sistema (1).

$$P_A = y \cdot P \quad [8]$$

$$y = \frac{H}{P} \cdot x \quad [9]$$

Donde:

- P es la presión del sistema, en atm.
- H es la constante de Henry, en atm/fracción molar.

5.2. Número de unidades de transferencia

Primeramente, es necesario definir la Ecuación general de la altura de relleno, la cual se puede representar tanto en función del gas como del líquido. Esta puede observarse en la Ecuación [10] (1).

$$Z = \frac{G_m}{K_G a P} \int_{y_2}^{y_1} \frac{dy}{y - y_e} \quad [10]$$

Donde:

- G_m es el caudal de gas por la sección.
- a es la área superficial interfacial por unidad de volumen.
- P es la presión total.
- y_1 e y_2 son las fracciones molares del soluto en el gas en colas y cabezas de la columna, respectivamente.
- y_e es la concentración del soluto en el gas que estaría en equilibrio con la concentración del líquido en cualquier punto.

Para efectos del diseño la Ecuación [10] puede ser representada como se muestra en la Ecuación [11].

$$Z = H_{OG} N_{OG} \quad [11]$$

Donde:

- H_{OG} es la altura de unidades de transferencia, en m.
- N_{OG} es el número de unidades de transferencia, en m.

Estos términos se pueden separar de la Ecuación [10] obteniendo las ecuaciones [12] y [13].

$$N_{OG} = \int_{y_2}^{y_1} \frac{dy}{y - y_e} \quad [12]$$

$$H_{OG} = \frac{G_m}{K_G a P} \quad [13]$$

En el caso de que tanto la curva de equilibrio como la recta de operación sean líneas rectas y el solvente esté libre de soluto, el número de unidades de transferencia se puede obtener empleando la Ecuación [14].

$$N_{OG} = \frac{1}{1 - \left(\frac{mG_m}{L_m}\right)} \ln \left[\left(1 - \frac{mG_m}{L_m}\right) \frac{y_1}{y_2} + \frac{mG_m}{L_m} \right] \quad [14]$$

Donde:

- L_m es el caudal de líquido por la sección.
- G_m es el caudal de gas por la sección.
- m es la pendiente de la recta de equilibrio.

5.3. Diámetro de columna y caída de presión

La mayoría de las columnas empaquetadas constan de recipientes verticales cilíndricos. El diámetro de la columna se determina para evitar inundaciones de forma segura y poder operar en la región de precarga con una caída de presión de no más de 1,2 kPa/m de altura de relleno (equivalente a 1,5 pulgadas de altura de agua por pie de altura de relleno) (2).

Primeramente, es necesario obtener los datos de inundación para la columna a diseñar. Para esto se obtienen los parámetros expuestos en las ecuaciones [15] y [16] (2).

$$C_s = v_G \left[\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G} \right]^{1/2} \quad [15]$$

$$X = \left(\frac{L'}{G'} \right) \cdot \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} \quad [16]$$

Con la Ecuación [16] es posible obtener los valores de la Y de inundación, la cual es calculada con la regresión polinómica mostrada en la Ecuación [17] (2).

$$\ln Y_{flood} = -[3,5021 + 1,028 \ln X + 0,11093 (\ln X)^2] \quad [17]$$

Se conoce que la caída de presión cuando la columna se encuentra en condiciones de inundación está fuertemente relacionada con el factor de empaquetamiento del relleno utilizado. De esta manera Kister y Gill desarrollaron la Ecuación empírica mostrada en la Ecuación [18].

$$\Delta P_{flood} = 93,9 \cdot F_p^{0,7} \quad [18]$$

Donde:

- F_p es el factor de empaquetamiento, en ft^2/ft^3 .
- ΔP_{flood} es la caída de presión en inundación, en Pa.

Generalmente, las columnas de relleno se diseñan en función de dos criterios: aproximándose a la velocidad del gas en inundación o a una caída de presión máxima permitida en el gas. Para los caudales y propiedades del fluido, y un material de relleno elegido, la Ecuación [15] es utilizada para calcular la velocidad superficial del gas en el momento de la inundación, v_{GF} . Entonces, de acuerdo con el primer criterio de dimensionamiento, una fracción de la inundación denominada como f , se selecciona (generalmente de 0,5 a 0,7). En el caso del presente proyecto se eligió un valor de f de 0,7. En las ecuaciones [19] y [20] se puede observar una forma de calcular el parámetro C_s para la inundación y la velocidad de inundación, siendo una versión de la Ecuación [15], respectivamente (2).

$$C_{s,flood} = \left[\frac{Y_{flood}}{F_p \cdot \mu_L^{0,1}} \right]^{1/2} \quad [19]$$

$$v_{GF} = \frac{C_{s,flood}}{\left[\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G} \right]^{1/2}} \quad [20]$$

Una vez obtenidos estos valores, es posible obtener el diámetro de la columna haciendo uso de la Ecuación [21].

$$D = \left[\frac{4 \cdot Q_G}{f \cdot v_{GF} \cdot \pi} \right]^{0,5} \quad [21]$$

Donde:

- D es el diámetro, en m.
- Q_G es el caudal de gas, en m³/s.

Modelos basados en la teoría para predecir la caída de presión en lechos empaquetados con flujos a contracorriente de gas y líquido han sido presentados por Stichlmair et al. (1989), que utilizan un modelo de partículas, y Billet y Schultes (1991), que utilizan un canal modelo. Ambos modelos extienden ecuaciones bien aceptadas para la caída de presión en lecho seco a tener en cuenta el efecto de la retención de líquido. Basado en extensos estudios experimentales usando 54 materiales de relleno diferentes, incluidos rellenos estructurados, Billet y Schultes (1991) desarrollaron una correlación para la caída de presión del gas seco, ΔP_O . En la Ecuación [22] se observa la correlación necesaria para el cálculo de la caída de presión del gas seco (2).

$$\frac{\Delta P_O}{Z} = \psi_O \frac{a}{\varepsilon^3} \cdot \frac{P_G \cdot v_G^2}{2} \cdot \frac{1}{k_W} \quad [22]$$

Donde:

- ΔP_O es la caída de presión del gas seco, Pa.
- Z es la altura de relleno, en m.
- ψ_O es el coeficiente de resistencia del relleno seco.
- ε es la fracción hueca.
- v_G es la velocidad del gas, en m/s.
- k_W es el factor de las paredes.

Para el cálculo del factor de las paredes, k_W , es utilizada la Ecuación [23].

$$\frac{1}{k_W} = 1 + \frac{2}{3} \cdot \left(\frac{1}{1 - \varepsilon} \right) \cdot \frac{d_p}{D} \quad [23]$$

Donde:

- d_p es el diámetro efectivo de la partícula.

Para determinar el diámetro efectivo de la partícula se utiliza la Ecuación [24].

$$d_p = 6 \left(\frac{1 - \varepsilon}{a} \right) \quad [24]$$

En el caso del coeficiente de resistencia del relleno seco, ψ_o , se determina mediante la Ecuación empírica [25].

$$\psi_o = C_p \left(\frac{64}{Re_G} + \frac{1,8}{Re_G^{0,08}} \right) \quad [25]$$

Donde:

- C_p es una constante del relleno la cual para efecto de cálculo del presente proyecto será tomada como la unidad.
- Re_G es el módulo de Reynolds del caudal de gas.

Para determinar el módulo de Reynolds del caudal de gas se utiliza la Ecuación [26].

$$Re_G = \frac{v_G \cdot d_p \cdot P_G \cdot k_W}{(1 - \varepsilon) \cdot \mu_G} \quad [26]$$

Donde:

- μ_G es la viscosidad del gas, en kg/m·s.

Cuando se le aplica el caudal líquido al lecho empaquetado, la retención de líquido provoca que la caída de presión aumente. Los datos experimentales están razonablemente bien correlacionados por (Billet y Schultes. 1991) como se muestra en la Ecuación [27].

$$\frac{\Delta P}{\Delta P_o} = \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon - h_L} \right)^{1,5} \exp \left(\frac{Re_L}{200} \right) \quad [27]$$

Donde:

- ΔP es la caída de presión, en Pa.

5.4. Retención de líquido en la columna

Para la mayoría de los rellenos, la caída de presión sufrida en la columna se ve influenciada tanto por el caudal de gas como por el de líquido. A una velocidad de gas fija, la caída de presión del gas aumenta con el incremento de la tasa de líquido, principalmente debido a la sección transversal libre reducida (2). Disponible para el flujo de gas resultante de la presencia del líquido.

Por debajo de un cierto límite la velocidad del gas, la retención de líquido (es decir, la cantidad de líquido contenida en el lecho empaquetado) es razonablemente constante con el cambio de la velocidad del gas, aunque aumenta con la tasa de líquido. Para una velocidad de líquido dada, el límite superior de la velocidad del gas, para una retención de líquido constante, se denomina punto de carga. Por debajo de este punto, la fase gas es la fase continua. Por encima de este punto, el líquido comienza a acumularse en el lecho, reemplazando la retención de gas y provocando un fuerte aumento en la caída de presión. Finalmente, se alcanza una velocidad de gas en la que la superficie del líquido es continua a través de la parte superior del relleno y la columna se encuentra inundada. En el punto de inundación, la caída de presión aumenta infinitamente al aumentar la velocidad del gas (2).

La retención específica de líquido para una gran variedad de rellenos puede obtenerse con la Ecuación [28].

$$h_L = \left[12 \frac{Fr_L}{Re_L} \right]^{1/3} \left[\frac{a_h}{a} \right]^{2/3} \quad [28]$$

Donde:

- h_L es la retención específica de líquido, en m³ retenido/m³ lecho empaquetado.
- Re_L es el módulo de Reynolds del caudal líquido.
- Fr_L es el módulo de Froude del caudal líquido.
- a es el área superficial específica del relleno, en m²/m³.
- a_h es el área hidráulica específica, en m²/m³.

En la ecuaciones [29] y [30] se muestra cómo obtener el módulo de Reynolds y Froude, respectivamente.

$$Re_L = \frac{v_L \rho_L}{a \mu_L} \quad [29]$$

$$Fr_L = \frac{v_L^2 a}{g} \quad [30]$$

Donde:

- v_L es la velocidad superficial del líquido, en m/s.
- ρ_L es la densidad del líquido, en kg/ m³.
- μ_L es viscosidad del líquido, en kg/m·s.
- g es la aceleración de la gravedad, m/s².

Para la obtención del área hidráulica específica se utilizan las ecuaciones [31] y [32]. Se utilizará una u otra dependiendo del valor obtenido del módulo de Reynolds.

Para módulo de Reynolds menores de 5:

$$\frac{a_h}{a} = C_h \cdot Re_L^{0,5} \cdot Fr_L^{0,1} \quad [31]$$

Para módulo de Reynolds mayores de 5:

$$\frac{a_h}{a} = 0,85 C_h \cdot Re_L^{0,25} \cdot Fr_L^{0,1} \quad [32]$$

5.5. Altura de relleno

Como fue mencionado anteriormente en el apartado 5.6. *Número de unidades de transferencia*, para obtener la altura de relleno son necesarios tanto el número de unidades de transferencia como la altura de unidades de transferencia. Con la Ecuación [11] se obtiene la altura de relleno, pero antes es necesario utilizar las ecuaciones [14] y [33] (1).

$$H_{OG} = H_G + m \frac{G_m}{L_m} H_L \quad [33]$$

Donde:

- H_G es la altura de unidades de transferencia de la fase gaseosa, en m.
- H_L es la altura de unidades de transferencia de la fase líquida, en m.

Para el cálculo de dichas alturas se utiliza el método de Cornell (1960). En las correlaciones planteadas en dicho método se tiene en cuenta las propiedades físicas del sistema, los caudales de

gas y líquido; y el diámetro y altura de la columna. Se proporcionan ecuaciones y cifras para una variedad de tamaños de anillos de Raschig y monturas de Berl. Para el presente proyecto se utilizarán las gráficas para las monturas de Berl. El método se puede utilizar para realizar estimaciones conservadoras para diversos rellenos.

En las ecuaciones [34] y [35] se presentan las correlaciones para la altura de unidades de transferencia de la fase gaseosa y líquida, respectivamente (1).

$$H_G = \frac{0,011\psi_h(SC)_G^{0,5} \left(\frac{D}{3,05}\right)^{1,11} \left(\frac{Z}{3,05}\right)^{0,33}}{(L_w^* f_1 f_2 f_3)^{0,5}} \quad [34]$$

$$H_L = 0,305\phi_h(SC)_L^{0,5} K_3 \left(\frac{Z}{3,05}\right)^{0,15} \quad [35]$$

Donde:

- ψ_h es un factor relacionado con H_G .
- $(SC)_G$ es el número de Schmidt del gas.
- D es el diámetro de la columna, en m.
- Z es la altura de relleno, en m.
- L_w^* es el caudal de líquido por la sección de la columna, en kg/m²s.
- f_1 es el factor de corrección de la viscosidad del líquido.
- f_2 es el factor de corrección de la densidad del líquido.
- f_3 es el factor de corrección de la tensión superficial.
- ϕ_h es un factor relacionado con H_L .
- $(SC)_L$ es el número de Schmidt del líquido.
- K_3 es el factor de corrección del porcentaje de inundación.

Para el cálculo del caudal de líquido por la sección de la columna se utiliza la Ecuación [36]

$$L_w^* = \frac{L}{\pi \cdot \frac{D^2}{4}} \quad [36]$$

Donde:

- L es el caudal de líquido, en kg/s.
- D es el diámetro de la columna, en m.

En el caso de los factores relacionados a H_G y H_L se utilizan la Figura 5 y la Figura 6, respectivamente.

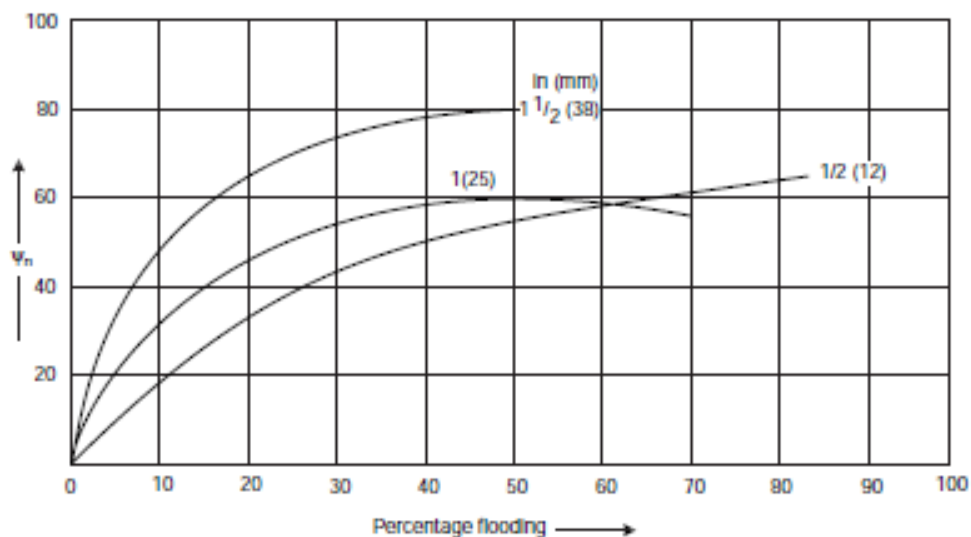


Figura 5. Factor relacionado con H_G para monturas de Berl (1).

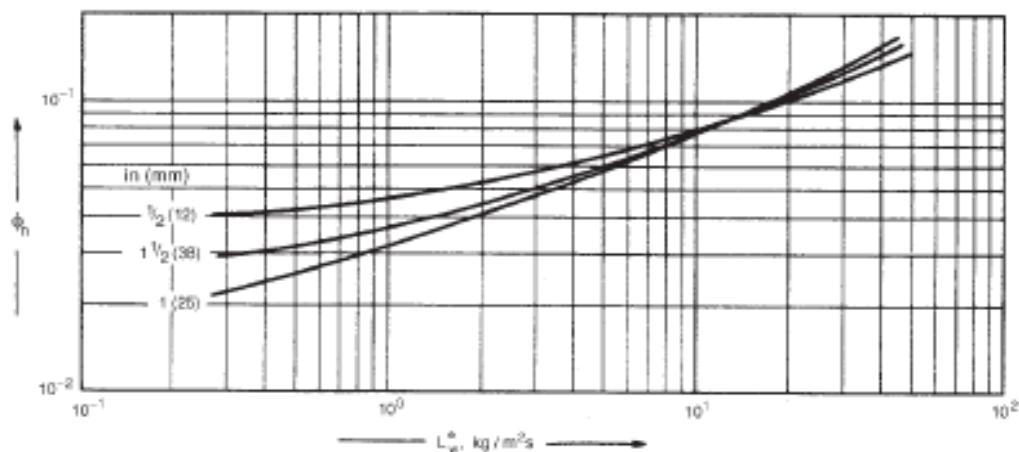


Figura 6. Factor relacionado con H_L para las monturas de Berl (1).

En el caso del factor de corrección del porcentaje de inundación es necesario utilizar la Figura 7.

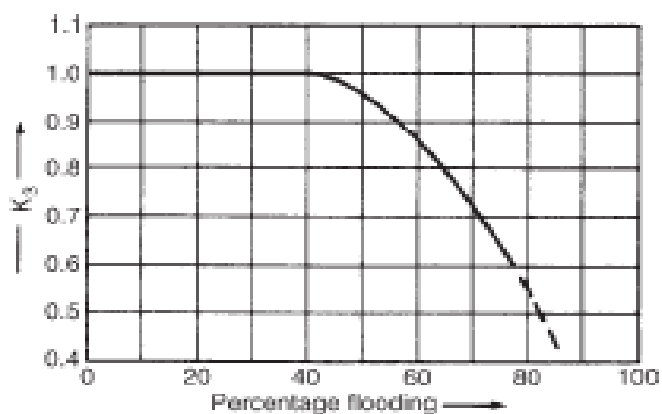


Figura 7. Factor de corrección del porcentaje de inundación (1).

Para el cálculo de los números de Schmidt tanto del gas como del líquido se emplean las ecuaciones [37] y [38], respectivamente.

$$(Sc)_G = \frac{\mu_G}{\rho_G D_G} \quad [37]$$

$$(Sc)_L = \frac{\mu_L}{\rho_L D_L} \quad [38]$$

Donde:

- D_G es la difusividad del gas, en m²/s.
- D_L es la difusividad del líquido, en m²/s.

Para calcular las difusividades del gas y del líquido se utilizan las ecuaciones [39] y [40].

$$D_G = \frac{1,013 \times 10^{-7} T^{1,75} \left(\frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_b} \right)^{1/2}}{P[(\sum_a v_i)^{1/3} + (\sum_b v_i)^{1/3}]^2} \quad [39]$$

$$D_L = \frac{1,173 \times 10^{-13} (\phi M)^{0,5} T}{\mu V_m^{0,6}} \quad [40]$$

Donde:

- T es la temperatura, en K.
- M_a y M_b son las masas moleculares de los componentes a y b, en g/mol.
- P es la presión, en bar.
- $\sum_a v_i$ y $\sum_b v_i$ son el sumatorio de los coeficientes de volumen de difusión especial para los componentes a y b.
- ϕ es un factor relacionado al solvente, siendo 2,6 para el agua.
- M es la masa molecular del solvente, en g/mol.
- μ es la viscosidad del solvente, en mN·s/m².
- V_m es el volumen molar del soluto en su punto de ebullición, en m³/kmol.

Para los coeficientes de volumen de difusión especial se utiliza la Tabla 2.

Tabla 2. Coeficientes de volumen de difusión especial (1).

Elemento	Valor
C	16,5
H	1,98
O	5,48

En el caso del volumen molar del soluto en su punto de ebullición se utiliza la Tabla 3.

Tabla 3. Contribuciones estructurales a los volúmenes molares, en m³/kmol. (1)

Elemento	Valor
C	0,0148
H	0,0037
O	0,0074

Por último, para los factores de corrección utilizados en la Ecuación [34] se utilizan las ecuaciones [41], [42] y [43].

$$f_1 = \left(\frac{\mu_L}{\mu_w} \right)^{0,16} \quad [41]$$

$$f_2 = \left(\frac{\rho_w}{\rho_L} \right)^{1,25} \quad [42]$$

$$f_3 = \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_L} \right)^{0,8} \quad [43]$$

Donde:

- μ_w es la viscosidad del agua, en kg/m·s
- ρ_w es la densidad del agua, en kg/m³.
- σ_w es la tensión superficial del agua, en din/cm.
- σ_L es la tensión superficial del líquido, en din/cm.

6. Diseño de la columna de absorción T-302

En la Figura 8 se muestra la columna de absorción T-302. Esta columna se encuentra justo después de la salida del intercambiador de calor E-301, y su función principal es absorber la acroleína formada en el reactor R-201 en un caudal de agua, para que continúe el proceso eliminando diferentes gases de la corriente de proceso. Por la parte inferior de la columna se da entrada a la corriente de proceso. Esta se pone en contacto en la columna con una corriente líquida de agua fría que se introduce por la parte superior de la columna. Los resultados obtenidos para el diseño de la columna siguen el procedimiento descrito anteriormente. Estos se muestran a continuación.

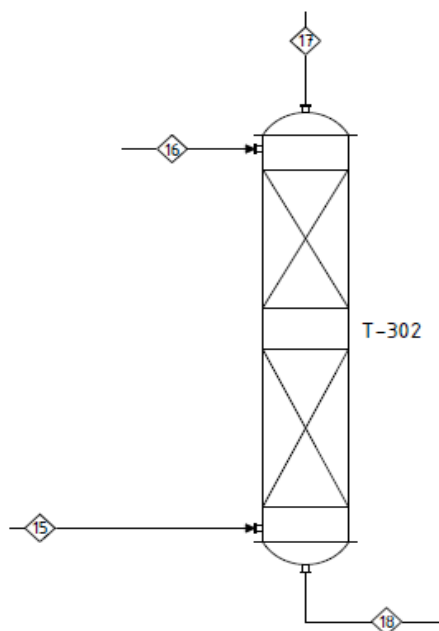


Figura 8. Columna de absorción T-302 con la enumeración de corrientes utilizada.

6.1. Balance de materia y datos equilibrio

Conocido el caudal gaseoso de entrada a la columna, las condiciones de operación y que se desea obtener una recuperación del 88,82% de acroleína, se determinan los flujos de componente de cada una de las corrientes en kmol/h, estos se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4. Flujos molares.

Elemento	Corriente 15 (kmol/h)	Corriente 16 (kmol/h)	Corriente 17 (kmol/h)	Corriente 18 (kmol/h)
Propileno	1,22	-	1,22	-
Helio	155,00	-	155,00	-
Acroleína	27,47	-	3,07	24,40
Ácido acrílico	0,12	-	-	0,12
Ácido acético	0,01	-	-	0,01
Agua	51,45	2.150,00	5,73	2.195,72
Dióxido de carbono	16,10	-	16,07	0,03
Monóxido de carbono	2,73	-	2,73	-
Oxígeno	11,51	-	11,51	-
Nitrógeno	276,79	-	276,79	-
Acetaldehído	0,31	-	-	0,31
Total	542,70	2.150,00	472,11	2.220,59

Conociendo las corrientes de entrada y salida del equipo se pueden calcular los caudales en relación al inerte, como fueron mostrados en las ecuaciones [3] y [4]. Cabe destacar que para los cálculos se asume que los caudales de entrada se mantienen constantes. Posteriormente, se puede determinar las composiciones de entrada y salida de acroleína utilizando la Ecuación [6], con las cuales se obtiene la pendiente de la recta de operación. En la Tabla 5 se muestran los caudales utilizados para los cálculos y en la Tabla 6 se muestran las composiciones calculadas.

Tabla 5. Datos de los caudales utilizados.

Parámetro	Valor (kmol/h)
L	2.150,00
G	542,70
L'	2.150,00
G'	521,27

Tabla 6. Composiciones de los extremos.

Parámetro	Valor
Xo	0,00
Xn	$1,16 \cdot 10^{-2}$
Y1	$5,66 \cdot 10^{-3}$
Yn+1	$5,33 \cdot 10^{-2}$

Posteriormente, utilizando la Ecuación [9] y conociendo la constante de Henry de la acroleína se pueden determinar los datos de equilibrio de la Tabla 7. En la Tabla 8 se observan los datos utilizados.

Tabla 7. Datos de equilibrio.

X	Y	X	Y
0,00	0,00	$8,27 \cdot 10^{-3}$	$2,55 \cdot 10^{-2}$
$1,00 \cdot 10^{-4}$	$3,04 \cdot 10^{-4}$	$8,47 \cdot 10^{-3}$	$2,62 \cdot 10^{-2}$
$4,00 \cdot 10^{-4}$	$1,22 \cdot 10^{-3}$	$8,67 \cdot 10^{-3}$	$2,68 \cdot 10^{-2}$
$6,00 \cdot 10^{-4}$	$1,83 \cdot 10^{-3}$	$8,88 \cdot 10^{-3}$	$2,75 \cdot 10^{-2}$
$8,01 \cdot 10^{-4}$	$2,44 \cdot 10^{-3}$	$9,08 \cdot 10^{-3}$	$2,81 \cdot 10^{-2}$
$1,00 \cdot 10^{-3}$	$3,05 \cdot 10^{-3}$	$9,29 \cdot 10^{-3}$	$2,88 \cdot 10^{-2}$
$1,20 \cdot 10^{-3}$	$3,66 \cdot 10^{-3}$	$9,49 \cdot 10^{-3}$	$2,94 \cdot 10^{-2}$
$1,40 \cdot 10^{-3}$	$4,27 \cdot 10^{-3}$	$9,69 \cdot 10^{-3}$	$3,00 \cdot 10^{-2}$
$1,60 \cdot 10^{-3}$	$4,88 \cdot 10^{-3}$	$9,90 \cdot 10^{-3}$	$3,07 \cdot 10^{-2}$
$1,80 \cdot 10^{-3}$	$5,50 \cdot 10^{-3}$	$1,01 \cdot 10^{-2}$	$3,13 \cdot 10^{-2}$
$2,00 \cdot 10^{-3}$	$6,11 \cdot 10^{-3}$	$1,03 \cdot 10^{-2}$	$3,20 \cdot 10^{-2}$
$2,20 \cdot 10^{-3}$	$6,73 \cdot 10^{-3}$	$1,05 \cdot 10^{-2}$	$3,26 \cdot 10^{-2}$
$2,41 \cdot 10^{-3}$	$7,34 \cdot 10^{-3}$	$1,07 \cdot 10^{-2}$	$3,33 \cdot 10^{-2}$
$2,61 \cdot 10^{-3}$	$7,96 \cdot 10^{-3}$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$3,39 \cdot 10^{-2}$
$2,81 \cdot 10^{-3}$	$8,58 \cdot 10^{-3}$	$1,11 \cdot 10^{-2}$	$3,46 \cdot 10^{-2}$
$3,01 \cdot 10^{-3}$	$9,20 \cdot 10^{-3}$	$1,13 \cdot 10^{-2}$	$3,52 \cdot 10^{-2}$
$3,21 \cdot 10^{-3}$	$9,82 \cdot 10^{-3}$	$1,15 \cdot 10^{-2}$	$3,59 \cdot 10^{-2}$
$3,41 \cdot 10^{-3}$	$1,04 \cdot 10^{-2}$	$1,17 \cdot 10^{-2}$	$3,65 \cdot 10^{-2}$
$3,61 \cdot 10^{-3}$	$1,11 \cdot 10^{-2}$	$1,19 \cdot 10^{-2}$	$3,72 \cdot 10^{-2}$
$3,81 \cdot 10^{-3}$	$1,17 \cdot 10^{-2}$	$1,21 \cdot 10^{-2}$	$3,78 \cdot 10^{-2}$
$4,02 \cdot 10^{-3}$	$1,23 \cdot 10^{-2}$	$1,24 \cdot 10^{-2}$	$3,85 \cdot 10^{-2}$
$4,22 \cdot 10^{-3}$	$1,29 \cdot 10^{-2}$	$1,26 \cdot 10^{-2}$	$3,91 \cdot 10^{-2}$
$4,42 \cdot 10^{-3}$	$1,35 \cdot 10^{-2}$	$1,28 \cdot 10^{-2}$	$3,98 \cdot 10^{-2}$
$4,62 \cdot 10^{-3}$	$1,42 \cdot 10^{-2}$	$1,30 \cdot 10^{-2}$	$4,05 \cdot 10^{-2}$
$4,82 \cdot 10^{-3}$	$1,48 \cdot 10^{-2}$	$1,32 \cdot 10^{-2}$	$4,11 \cdot 10^{-2}$
$5,03 \cdot 10^{-3}$	$1,54 \cdot 10^{-2}$	$1,34 \cdot 10^{-2}$	$4,18 \cdot 10^{-2}$
$5,23 \cdot 10^{-3}$	$1,61 \cdot 10^{-2}$	$1,36 \cdot 10^{-2}$	$4,24 \cdot 10^{-2}$
$5,43 \cdot 10^{-3}$	$1,67 \cdot 10^{-2}$	$1,38 \cdot 10^{-2}$	$4,31 \cdot 10^{-2}$
$5,63 \cdot 10^{-3}$	$1,73 \cdot 10^{-2}$	$1,40 \cdot 10^{-2}$	$4,38 \cdot 10^{-2}$
$5,83 \cdot 10^{-3}$	$1,79 \cdot 10^{-2}$	$1,42 \cdot 10^{-2}$	$4,44 \cdot 10^{-2}$
$6,04 \cdot 10^{-3}$	$1,86 \cdot 10^{-2}$	$1,44 \cdot 10^{-2}$	$4,51 \cdot 10^{-2}$
$6,24 \cdot 10^{-3}$	$1,92 \cdot 10^{-2}$	$1,46 \cdot 10^{-2}$	$4,57 \cdot 10^{-2}$
$6,44 \cdot 10^{-3}$	$1,98 \cdot 10^{-2}$	$1,48 \cdot 10^{-2}$	$4,64 \cdot 10^{-2}$
$6,64 \cdot 10^{-3}$	$2,05 \cdot 10^{-2}$	$1,50 \cdot 10^{-2}$	$4,71 \cdot 10^{-2}$
$6,85 \cdot 10^{-3}$	$2,11 \cdot 10^{-2}$	$1,52 \cdot 10^{-2}$	$4,77 \cdot 10^{-2}$
$7,05 \cdot 10^{-3}$	$2,17 \cdot 10^{-2}$	$1,54 \cdot 10^{-2}$	$4,84 \cdot 10^{-2}$
$7,25 \cdot 10^{-3}$	$2,24 \cdot 10^{-2}$	$1,56 \cdot 10^{-2}$	$4,91 \cdot 10^{-2}$
$7,46 \cdot 10^{-3}$	$2,30 \cdot 10^{-2}$	$1,58 \cdot 10^{-2}$	$4,98 \cdot 10^{-2}$
$7,66 \cdot 10^{-3}$	$2,36 \cdot 10^{-2}$	$1,61 \cdot 10^{-2}$	$5,04 \cdot 10^{-2}$
$7,86 \cdot 10^{-3}$	$2,43 \cdot 10^{-2}$	$1,63 \cdot 10^{-2}$	$5,11 \cdot 10^{-2}$
$8,06 \cdot 10^{-3}$	$2,49 \cdot 10^{-2}$	$1,65 \cdot 10^{-2}$	$5,18 \cdot 10^{-2}$

Tabla 8. Datos del equilibrio.

Parámetro	Valor
H (atm/fracción molar)	4,56
m	3,04

Los datos expuestos tablas 6 y 7 se muestran graficados en la Figura 9.

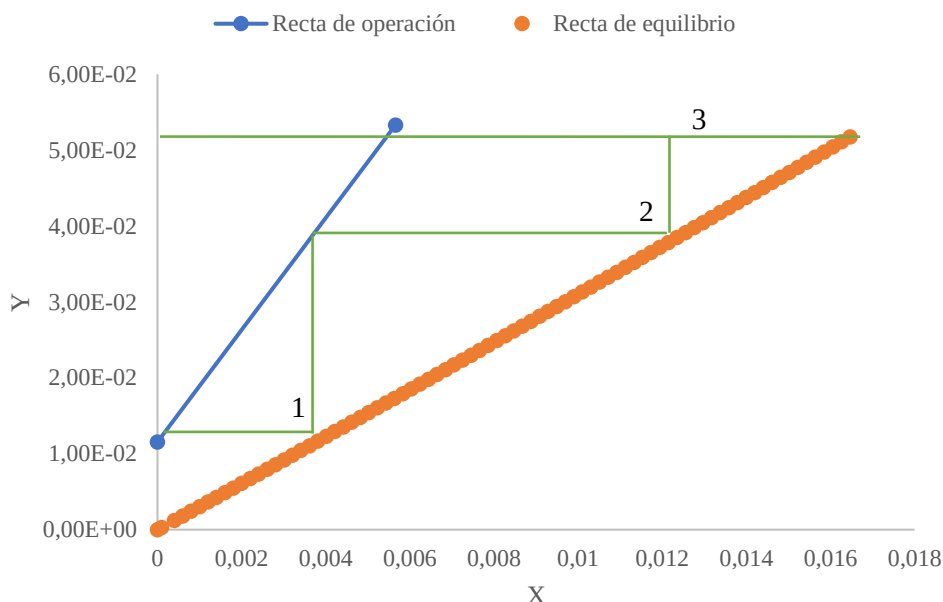


Figura 9. Composiciones de operación y de equilibrio.

6.2. Número de unidades de transferencia

Como se observa en la Figura 9, tanto la recta de operación como la curva de equilibrio son líneas rectas, por lo cual es posible la utilización de la Ecuación [14]. En la Tabla 9 se muestran los datos utilizados y el resultado obtenido.

Tabla 9. Datos y resultado del número de unidades de transferencia.

Parámetro	Valor
y1	$5,33 \cdot 10^{-2}$
y2	$5,66 \cdot 10^{-3}$
y1/y2	9,42
m	3,04
mG/L	0,74
Nog (m)	4,44

6.3. Diámetro de columna y caída de presión

Primeramente es necesario conocer los parámetros de inundación planteados en las ecuaciones [16], [17], [19] y [20], y de esta forma se puede proceder al cálculo del diámetro utilizando la Ecuación [21]. En la Tabla 10 se muestran los datos utilizados para el cálculo de los parámetros junto con sus resultados.

Tabla 10. Datos y resultados para las ecuaciones [16], [17], [19] y [20].

Parámetro	Valor
ρ_G (kg/m ³)	2,02
ρ_L (kg/m ³)	1.018,51
μ_l (kg/m·s)	$1,3 \cdot 10^{-3}$
X	$1,43 \cdot 10^{-1}$
Y_{flood}	$1,46 \cdot 10^{-1}$
Cs_{flood} (m/s)	$5,08 \cdot 10^{-2}$
V_{gf} (m/s)	1,14

Una vez obtenida la velocidad de inundación y teniendo como dato el caudal de gas se procede a calcular el diámetro de la columna utilizando la Ecuación [21]. En la Tabla 11 se muestran los datos y los resultados obtenidos.

Tabla 11. Datos y resultados para la Ecuación [21].

Parámetro	Valor
Q_G (m ³ /s)	1,68
f	0,70
V_{gf} (m/s)	1,14
D (m)	1,64

Para la obtención de la caída de presión seca de la columna primero es necesario determinar los valores expuestos en las ecuaciones [23], [24], [25] y [26]. Para la obtención de V_g se multiplica la velocidad de inundación (V_{gf}) por el porcentaje de inundación (f), el cual se supone de 70% como se puede ver en Tabla 11. En la Tabla 12 se muestran los datos utilizados y los resultados obtenidos.

Tabla 12. Datos y resultados para las ecuaciones [23], [24], [25] y [26].

Parámetro	Valor
ϵ	0,68
α	260
V_g (m/s)	$7,97 \cdot 10^{-1}$
μ_g (kg/m·s)	$1,7 \cdot 10^{-5}$
ρ_G (kg/m ³)	2,02
D (m)	1,64
dp	$7,38 \cdot 10^{-3}$
Kw	0,99
ψ_o	1,00
Reg	2.174,95

Una vez obtenidos los valores del módulo de Reynolds, el factor de las paredes, el diámetro efectivo del relleno y el coeficiente de resistencia del relleno seco se procede a obtener la caída de presión en seco y en inundación como presentan las ecuaciones [22] y [18], respectivamente. En la Tabla 13 se presentan los datos utilizados y los resultados obtenidos.

Tabla 13. Datos y resultados para las ecuaciones [18] y [22].

Parámetro	Valor
Kw	0,99
ψ_o	1
V_g (m/s)	$7,97 \cdot 10^{-1}$
F_p (ft ² /ft ³)	110

Tabla 13 (continuación). Datos y resultados para las ecuaciones [18] y [22].

Parámetro	Valor
ΔP_{flood} (bar)	$2,52 \cdot 10^{-2}$
$\Delta p_o/Z$ (Pa/m)	$1,1 \cdot 10^3$

La caída de presión en seco depende de la altura de la columna, es por esto por lo que luego de determinar la altura se calculará la caída de presión en seco final. Por último, se debe obtener la caída de presión cuando se cuenta con un caudal de líquido, es por esto que es necesario antes de su cálculo saber la retención de líquido que presenta la columna. La caída de presión total será presentada en el apartado 6.4. *Retención de líquido en la columna.*

6.4. Retención de líquido en la columna

Para la determinación de la retención de líquido primeramente es necesario obtener el valor de los módulos Reynolds y Froude, para esto se utilizaron las ecuaciones [29] y [30]. En la Tabla 14 se presentan los datos necesarios y los valores obtenidos.

Tabla 14. Datos y resultados para las ecuaciones [29] y [30].

Parámetro	Valor
ρ_L (kg/m ³)	1.018,51
μ_L (kg/m·s)	$1,3 \cdot 10^{-3}$
V_L (kg/m ² ·s)	5,10
G (m/s ²)	9,81
α	260
Re_L	15,10
Fr_L	$1,3 \cdot 10^{-4}$

Posteriormente, es necesario obtener el área hidráulica específica entre el área superficial específica del relleno, a_h/a . Para esto, como el valor del módulo de Reynolds fue superior a 5 se debe utilizar la Ecuación [32]. En la Tabla 15 se presentan los datos utilizados y los resultados obtenidos.

Tabla 15. Datos y resultados para la Ecuación [32].

Parámetro	Valor
Ch	0,62
Re_L	15,10
Fr_L	$1,3 \cdot 10^{-4}$
a_h/a	$8,37 \cdot 10^{-1}$

Una vez obtenido el área hidráulica específica entre el área superficial específica del relleno, se procede a calcular la retención de líquido utilizando la Ecuación [28]. En la Tabla 16 se presentan los datos y resultados obtenidos.

Tabla 16. Datos y resultados para la Ecuación [28].

Parámetro	Valor
a_h/a	$8,37 \cdot 10^{-1}$
Re_L	15,10
Fr_L	$1,3 \cdot 10^{-4}$
h_L (m ³ /m ³)	$4,17 \cdot 10^{-2}$

Como se comentó en el apartado anterior, una vez obtenida la retención de líquido en la columna, se utiliza la Ecuación [27] para determinar la caída de presión tomando en cuenta la retención de líquido. En la Tabla 17 se exponen los datos utilizados y el resultado obtenido.

Tabla 17. Datos y resultados para la Ecuación [27].

Parámetro	Valor
ε	0,68
Re_L	15,10
$h_L (m^3/m^3)$	$4,17 \cdot 10^{-2}$
$\Delta P / \Delta P_o$	1,19

6.5. Altura de relleno

Para poder aplicar el método de Cornell, ecuaciones [34] y [35]. Se empieza obteniendo los valores difusividad para el gas y el líquido con las ecuaciones [39] y [40], respectivamente. Así posteriormente, se calculan los valores de los números de Schmidt tanto del gas como del líquido utilizando las ecuaciones [37] y [38], respectivamente. En la Tabla 18 se presentan los datos utilizados y los resultados obtenidos de las difusividad del gas.

Tabla 18. Datos y resultados para la Ecuación [39].

Parámetro	Valor
T (K)	293
Ma (g/mol)	18
Mb (g/mol)	56,06
P (bar)	1,59
coeficiente de volumen de difusión especial- acroleína	62,9
coeficiente de volumen de difusión especial -agua	9,44
$D_G (m^2/s)$	$9,66 \cdot 10^{-6}$

Para los sumatorios se utilizó los valores expuestos en la Tabla 2. En la Tabla 19 y en la Tabla 20 se presenta el cálculo de dichos sumatorios.

Tabla 19. Cálculo del coeficiente de volumen de difusión especial de la acroleína.

Compuesto	Elemento	Vi	Número de átomos	Producto
C_3H_4O	C	16,5	3	49,5
	H	1,98	4	7,92
	O	5,48	1	5,48
Sumatorio				62,9

Tabla 20. Cálculo del coeficiente de volumen de difusión especial del agua.

Compuesto	Elemento	Vi	Número de átomos	Producto
H_2O	H	1,98	2	3,96
	O	5,48	1	5,48
Sumatorio				9,44

Una vez obtenida la difusividad del gas se procede a determinar la difusividad del líquido utilizando la Ecuación [40]. En la Tabla 21 se presentan los datos utilizados y los resultados obtenidos de la difusividad del líquido.

Tabla 21. Datos y resultados para la Ecuación [40].

Parámetro	Valor
T (K)	283
M (g/mol)	18
Φ	2,6
μ (mN·s/m ²)	1,59
V _m (m ³ /kmol)	62,9
D _L (m ² /s)	$8,88 \cdot 10^{-10}$

Para el cálculo del volumen molar del soluto (V_m) se utilizaron los datos representados en la Tabla 3. En la Tabla 22 se muestra el cálculo del volumen molar del soluto.

Tabla 22. Cálculo del volumen molar de la acroleína.

Compuesto	Elemento	V _i	Número de átomos	Producto
C ₃ H ₄ O	C	$1,48 \cdot 10^{-2}$	3	$4,44 \cdot 10^{-2}$
	H	$3,70 \cdot 10^{-3}$	4	$1,48 \cdot 10^{-2}$
	O	$7,40 \cdot 10^{-3}$	1	$7,40 \cdot 10^{-3}$
Sumatorio				$6,66 \cdot 10^{-2}$

Luego de tener las difusividades, se procede a determinar los números de Schmidt como se mencionó anteriormente. En la Tabla 23 se muestran los datos utilizados y los resultados de los módulos de Schmidt.

Tabla 23. Datos y resultados para la ecuaciones [37] y [38].

Parámetro	Valor
ρ_L (kg/m ³)	1.018,51
μ_l (kg/m·s)	$1,3 \cdot 10^{-3}$
D _L (m ² /s)	$8,88 \cdot 10^{-10}$
μ_g (kg/m·s)	$1,7 \cdot 10^{-5}$
ρ_G (kg/m ³)	2,02
D _G (m ² /s)	$9,66 \cdot 10^{-6}$
(Sc) _G	$8,68 \cdot 10^{-1}$
(Sc) _L	$1,44 \cdot 10^3$

Una vez obtenidos los módulos de Schmidt se procede a obtener el resto de los parámetros utilizando las figuras presentadas en el apartado 5.5. *Altura de relleno*. En la Figura 10 se observa la gráfica mostrada en la Figura 7 resaltando el valor obtenido sabiendo que el porcentaje de inundación es del 70%.

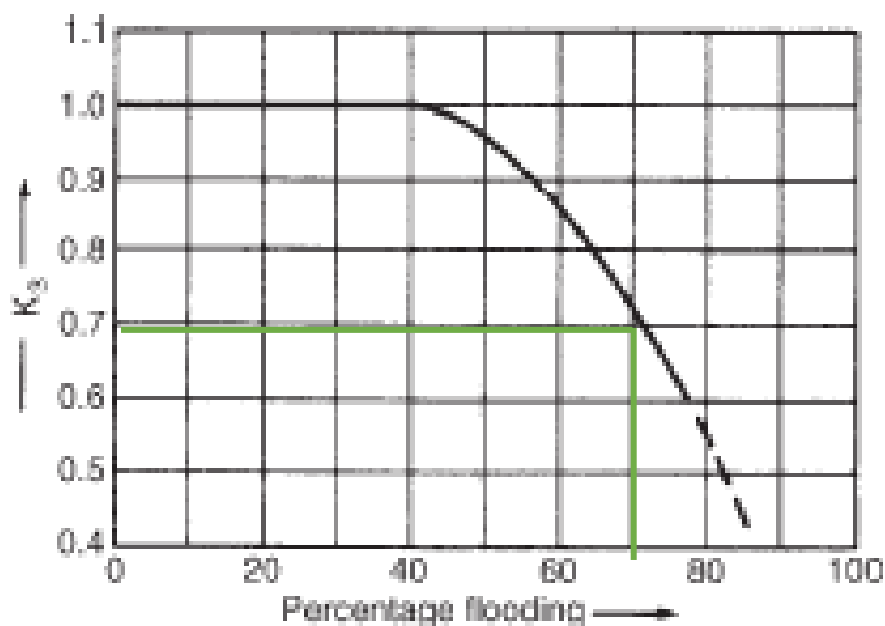


Figura 10. Factor de corrección para un 70% de inundación.

Como se observa en la Figura 10 se obtiene un valor de K_3 de 0,7.

A continuación, se procede al cálculo de los factores de corrección f_1 , f_2 y f_3 utilizando las ecuaciones [41], [42] y [43]. En la Tabla 24 se presentan los datos para el cálculo de los tres factores con sus correspondientes resultados.

Tabla 24. Datos y resultados para la ecuaciones [41], [42] y [43].

Parámetro	Valor
ρ_L (kg/m ³)	1.018,51
μ_l (kg/m·s)	$1,3 \cdot 10^{-3}$
σ_L (din/cm)	74,68
μ_w (kg/m·s)	1,01
ρ_w (kg/m ³)	1011,08
σ_w (din/cm)	72,96
f_1	0,35
f_2	0,99
f_3	0,98

Por último, se procede a determinar los factores relacionados con H_G y H_L . Para el primero de estos se utiliza nuevamente el porcentaje de inundación y para el segundo se utiliza el caudal de líquido por la sección de la columna, ese caudal es de $6,61 \cdot 10^7$ kg/m²·s. En la Figura 11 se muestra el valor obtenido para H_G .

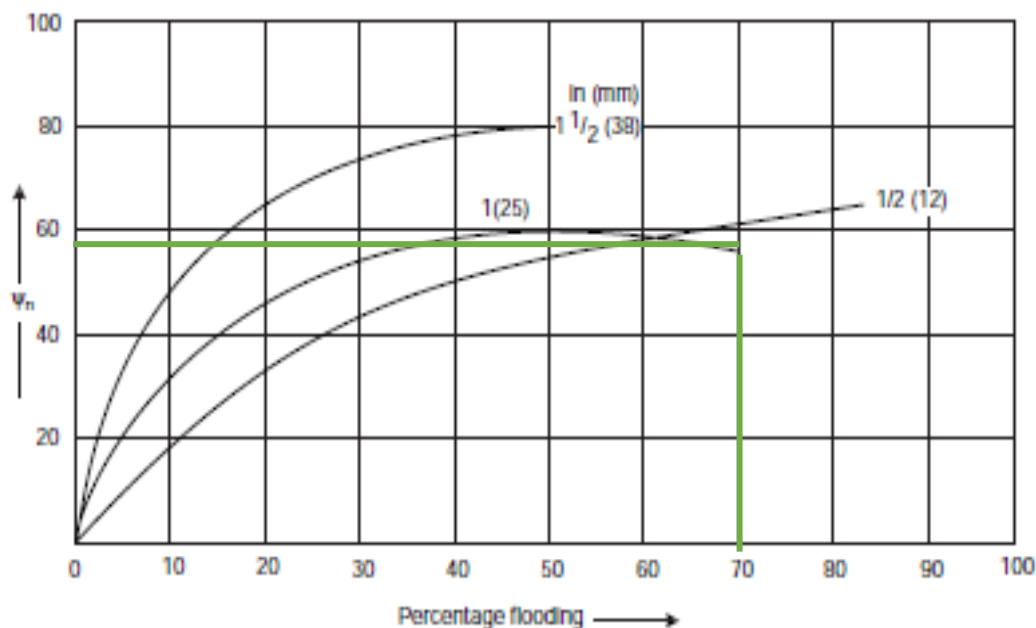


Figura 11. Factor relacionado con H_G para un porcentaje de inundación de 70%.

Se observa un valor de aproximadamente 57 en la Figura 11.

En el caso del factor de H_L se decidió tomar un valor medio de 0,06 para la realización del método ya que el caudal calculado no se encontraba dentro del rango de la gráfica mostrada en la Figura 6. Al contar con todos los parámetros y cálculos necesarios es posible aplicar el método de Cornell expuesto en las ecuaciones [34] y [35]. En la Tabla 25 se muestran los datos y resultados obtenidos.

Tabla 25. Datos y resultados para la ecuaciones [34] y [35].

Parámetro	Valor
f_1	0,35
f_2	0,99
f_3	0,98
D (m)	1,64
Z (m)	1,42
K_3	0,7
ψ_h	57
ϕ_h	0,06
L_w^* (kg/m ² ·s)	$6,61 \cdot 10^7$
$(Sc)_G$	$8,68 \cdot 10^{-1}$
$(Sc)_L$	$1,44 \cdot 10^3$
H_G (m)	$6,22 \cdot 10^{-4}$
H_L (m)	$4,33 \cdot 10^{-1}$

Como se observa en la Tabla 25 ya se trabaja con la altura final alcanzada pero esta se obtuvo con un proceso iterativo utilizando el método de Cornell, la Ecuación [33] y la Ecuación [11] hasta alcanzar el valor mostrado anteriormente.

Por último, utilizando la Ecuación [33] y la Ecuación [11] se obtienen los valores de la altura de unidades de transferencia y la altura de relleno. En la Tabla 26 se muestran los datos utilizados y los resultados obtenidos.

Tabla 26. Datos y resultados para la ecuaciones [11] y [33].

Parámetro	Valor
H_G (m)	$6,22 \cdot 10^{-4}$
H_L (m)	$4,33 \cdot 10^{-1}$
m	3,04
mG/L	0,74
Nog (m)	4,44
Hog (m)	0,32
Z (m)	1,42

7. Diseño mecánico

En el siguiente apartado se expondrán los resultados obtenidos utilizando las ecuaciones planteadas en el Anexo II: Cálculos justificativos. Parte A: Diseño mecánico.

7.1. Presión de diseño

La presión es uno de los aspectos más importantes a tener en cuenta en los diseños de recipientes a presión como se mencionó anteriormente, utilizando la ecuaciones [1] y [2] de la Parte A: Diseño mecánico se obtiene la presión de diseño con ambos criterios para elegir el valor más elevado. En la Tabla 27 se exponen los datos utilizados y los valores obtenidos.

Tabla 27. Datos y resultados de la presión de diseño.

Parámetro	Valor
P (bar)	1,59
ΔP (bar)	$1,85 \cdot 10^{-2}$
Pmax (bar)	1,61
P (ec 1) (bar)	1,77
P (ec 2) (bar)	3,33

Como se puede observar en la Tabla 27 se escoge la presión de diseño de 3,33 bar ya que es la mayor.

7.2. Temperatura de diseño

Al igual que ocurre con la presión, los equipos deben ser diseñados para soportar la mayor temperatura que puedan alcanzar. Empleando la Ecuación [3] de la Parte A: Diseño mecánico se calcula la temperatura máxima para la columna. En la Tabla 28 se presentan los datos y resultados obtenidos.

Tabla 28. Datos y resultados de la temperatura de diseño.

Parámetro	Valor
T (°F)	68,00
Tmax (°F)	118,00

Como se observa en la Tabla 28 se obtiene una temperatura de diseño de 47,48 °C.

7.3. Mínimo espesor de carcasa requerido

En lo que respecta al mínimo espesor de carcasa requerido se sigue el código ASME BPV Sección VIII Div.1 parte UG-27 como se especifica en la *Parte A: Diseño mecánico*. Se debe calcular el espesor mínimo de carcasa para tensión radial y el espesor mínimo de carcasa para tensión longitudinal, y escogerse el mayor valor obtenido. Las ecuaciones [8] y [9] de dicho apartado son utilizadas para conocer el espesor requerido, en la Tabla 29 se muestran los datos utilizados y los resultados obtenidos.

Tabla 29. Datos y resultados de los espesores para tensión radial y longitudinal.

Parámetro	Valor
Di (m)	1,64
Pi (bar)	3,33
E	0,85
f_c (m)	$4 \cdot 10^{-3}$
S (bar)	1165,97
t_r (m)	$6,76 \cdot 10^{-3}$
t_l (m)	$5,38 \cdot 10^{-3}$

Se escoge el mayor valor calculado, es decir el espesor mínimo de carcasa para tensión radial.

7.4. Cabezales

Para determinar las medidas de los cabezales se utilizan el código ASME BPV Sección VIII Div.1 parte UG-32 para el cálculo de los espesores y la norma DIN 28011 para los parámetros necesarios del cabezal. Por razones económicas y por su facilidad de fabricación se opta por la utilización de cabezales toriesféricos. En la Tabla 30 se muestran los datos utilizados y los resultados obtenidos para el espesor del cabezal.

Tabla 30. Datos y resultados del espesor del cabezal toriesférico.

Parámetro	Valor
Di (m)	1,64
Pi (bar)	3,33
E	0,85
f_c (m)	$4 \cdot 10^{-3}$
S (bar)	1165,97
t (m)	$4,88 \cdot 10^{-3}$

Al ser un espesor menor al obtenido para la carcasa se utilizará el espesor de carcasa. En la siguiente tabla (Tabla 31) se muestran los datos utilizados y los resultados obtenidos para los parámetros del cabezal.

Tabla 31. Datos y resultados de los parámetros del cabezal toriesférico.

Parámetro	Valor
Di (m)	1,64
t (m)	$6,76 \cdot 10^{-3}$
Do (m)	1,65
Cr (m)	1,65

Tabla 31 (continuación). Datos y resultados de los parámetros del cabezal toriesférico.

Parámetro	Valor
Kr (m)	$1,65 \cdot 10^{-1}$
SF (m)	$2,35 \cdot 10^{-2}$
DH (m)	$3,17 \cdot 10^{-1}$
TH (m)	$3,4 \cdot 10^{-1}$

7.5. Aberturas y conexiones

En el caso de las aberturas, la columna cuenta con 4 tubuladuras las cuales permiten la entrada y salida de las corrientes. En la Tabla 32 se muestran los diámetros de dichas tubuladuras.

Tabla 32. Diámetros de las tubuladuras utilizadas.

Tubuladura	Diámetro, m
Entrada de la corriente 15	$4,48 \cdot 10^{-1}$
Entrada de la corriente 16	$1,28 \cdot 10^{-1}$
Salida de la corriente 17	$3,37 \cdot 10^{-1}$
Salida de la corriente 18	$1,28 \cdot 10^{-1}$

7.6. Cargas

Como se observa en el apartado 9. *Cargas* de la Parte A: *Diseño mecánico*, las cargas que deben ser tomadas en cuenta en el diseño mecánico de cualquier recipiente a presión, las cargas tomadas en cuenta en el presente diseño incluyen: cargas por peso, por viento y cargas por actividad sísmica. Ya que la planta de producción de acroleína del presente proyecto se ubica en una zona de baja peligrosidad sísmica, por lo tanto las cargas por actividad sísmica no serán analizadas.

7.6.1. Cargas por peso

En las cargas por peso para la presente columna hay que tener en consideración tanto el peso del recipiente como el peso del relleno utilizado. Empelando la Ecuación [27] de la Parte A: *Diseño mecánico* se obtiene el peso del recipiente y conociendo el área del recipiente y la altura del relleno se puede obtener el volumen de relleno el cual sabiendo la densidad del mismo (Tabla 1) se puede obtener la masa del relleno para así, determinar su peso. En la Tabla 33 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 33. Resultado de las cargas por peso.

Parámetro	Valor
C_W	1,15
ρ_m (kg/m ³)	7.900,00
D_m (mm)	1.643
W_v (N)	8.639,53
$W_{Relleno}$ (N)	21.109,98
W_z (N)	29.749,51

7.6.2. Cargas por viento

Aunque la columna no presente una altura pronunciada como otros equipos, se calculan las cargas por viento ya que serán necesarias más adelante para determinar los esfuerzos a los que se puede ver sometida la columna. Haciendo uso de las ecuaciones [40], [41] y [42] del apartado 9.2. *Cargas por viento* de la Parte A: *Diseño mecánico*. En la Tabla 34 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 34. Resultado de las cargas por viento.

Parámetro	Valor
u_w (km/h)	160,00
P_w (N/m ²)	1.280,00
D_{eff} (m)	$1,52 \cdot 10^{-1}$
W (N/m)	$1,94 \cdot 10^4$
M_x (N·m)	170.953,29

7.7. Esfuerzos

Tal y como se expone en el apartado 10. *Esfuerzos de la Parte A: Diseño mecánico* se deben analizar los esfuerzos a los que puede verse sometido el equipo. Se deben determinar los esfuerzos primarios, esfuerzos principales, esfuerzo máximo permisible y esfuerzos de compresión y estabilidad elástica.

7.7.1. Esfuerzos primarios

Los esfuerzos primarios se calculan utilizando las ecuaciones [43], [44], [45] y [48] del apartado 10. *Esfuerzos de la Parte A: Diseño mecánico*. En la Tabla 35 se muestran los resultados obtenidos para los esfuerzos primarios.

Tabla 35. Resultados obtenidos de los esfuerzos primarios.

Parámetro	Valor
σ_L (N/m ²)	$2,48 \cdot 10^7$
σ_R (N/m ²)	$4,96 \cdot 10^7$
σ_W (N/m ²)	$1,05 \cdot 10^6$
σ_b (N/m ²)	$\pm 1,20 \cdot 10^7$

En el caso del esfuerzo longitudinal total se debe calcular tanto para el viento en contra como para el viento a favor. En la Tabla 36 se muestra los resultados de ambos.

Tabla 36. Resultados obtenidos de los esfuerzos longitudinales totales.

Parámetro	Valor
$-\sigma_z$ (N/m ²)	$1,17 \cdot 10^7$
$+\sigma_z$ (N/m ²)	$3,58 \cdot 10^7$

En la Tabla 36 el primer valor encontrado hace referencia al esfuerzo con el viento a favor y el segundo hace referencia al viento en contra.

7.7.2. Esfuerzos principales

Se emplean las ecuaciones [49], [50] y [51] para el cálculo de los esfuerzos principales, mostradas en el apartado 10. *Esfuerzos de la Parte A: Diseño mecánico*. En la Tabla 37 se muestran los resultados obtenidos con el viento a favor y en la Tabla 38 se muestran los resultados obtenidos para el viento en contra.

Tabla 37. Resultados de los esfuerzos principales con el viento a favor.

Parámetro	Valor
σ_1 (N/m ²)	$4,96 \cdot 10^7$
σ_2 (N/m ²)	$1,17 \cdot 10^7$
σ_3 (N/m ²)	$1,67 \cdot 10^5$

Tabla 38. Resultados de los esfuerzos principales con el viento en contra.

Parámetro	Valor
σ_1 (N/m ²)	$4,96 \cdot 10^7$
σ_2 (N/m ²)	$3,58 \cdot 10^7$
σ_3 (N/m ²)	$1,67 \cdot 10^5$

7.7.3. Esfuerzo máximo permisible

Para el esfuerzo máximo permisible tal y como se explica en el apartado 10. Esfuerzos de la Parte A: Diseño mecánico se realizan las comprobaciones empleando las ecuaciones [52], [53] y [54] del apartado 10. Esfuerzos de la Parte A: Diseño mecánico. En la Tabla 39 se exponen los resultados obtenidos con el viento a favor y en la Tabla 40 los resultados con el viento en contra.

Tabla 39. Resultados del esfuerzo máximo permisible con el viento a favor.

Parámetro	Valor
$\sigma_1 - \sigma_2$	$3,79 \cdot 10^7$
$\sigma_1 - \sigma_3$	$4,95 \cdot 10^7$
$\sigma_2 - \sigma_3$	$1,16 \cdot 10^7$

Tabla 40. Resultados del esfuerzo máximo permisible con el viento en contra.

Parámetro	Valor
$\sigma_1 - \sigma_2$	$1,38 \cdot 10^7$
$\sigma_1 - \sigma_3$	$4,95 \cdot 10^7$
$\sigma_2 - \sigma_3$	$3,56 \cdot 10^7$

En ambos casos se obtienen valores inferiores al esfuerzo máximo permisible del material el cual es de $1,17 \cdot 10^8$ N/m².

7.7.4. Esfuerzos de compresión y estabilidad elástica

Por último, se emplean la ecuaciones [55] y [56] del apartado 10. Esfuerzos de la Parte A: Diseño mecánico para determinar el esfuerzo máximo de compresión en la carcasa y verificar que no sea mayor al esfuerzo crítico de compresión. En la Tabla 41 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 41. Resultados del esfuerzo de compresión.

Parámetro	Valor
σ_C (N/m ²)	$1,31 \cdot 10^7$
$\sigma_{C,critico}$ (N/m ²)	$8,19 \cdot 10^7$

De esta manera se verifica que el esfuerzo máximo de compresión en la carcasa no sobrepasa al esfuerzo crítico de compresión.

7.8. Soportes

Tal y como se explica en el apartado 11. Soportes de la Parte A: Diseño mecánico, el soporte utilizado dependerá del tamaño, peso y forma del recipiente. Para la columna de absorción se decide utilizar un soporte de tipo falda. Ahora bien, es necesario garantizar que el espesor del soporte sea capaz de resistir las cargas a las que se verá afectado. Es por esto por lo que utilizando las ecuaciones [57], [58], [59], [60], [61] y [62] del apartado 11. Soportes de la Parte A: Diseño

mecánico se verificará que el soporte cumpla adecuadamente. En la Tabla 42 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 42. Resultados de los esfuerzos del soporte.

Parámetro	Valor
t (mm)	5,5
h (m)	2,1
$\sigma_{BS}(\text{N/m}^2)$	$1,47 \cdot 10^7$
$\sigma_{ws}(\text{N/m}^2)$	$1,05 \cdot 10^6$
$\sigma_{s,\text{compresivo}}(\text{N/m}^2)$	$1,57 \cdot 10^7$
$\sigma_{s,\text{tracción}}(\text{N/m}^2)$	$1,36 \cdot 10^7$

Una vez obtenidos estos resultados se verifica que se cumplan los criterios de diseño mostrados en las ecuaciones [63] y [64] del apartado 11. *Soportes* de la Parte A: *Diseño mecánico*. En la Tabla 43 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 43. Verificación de los criterios de diseño.

Verificación de la Ecuación [63] (N/m ²)		
$1,36 \cdot 10^7$	<	$8,82 \cdot 10^7$
Verificación de la Ecuación [64] (N/m ²)		
$1,57 \cdot 10^7$	<	$7,87 \cdot 10^7$

De esta manera se puede concluir que el espesor elegido para el soporte es el adecuado ya que cumple con los requisitos planteados.

7.9. Válvula de alivio PSV-320

Como está descrito en el apartado 12. *Válvulas de alivio* de la Parte A: *Diseño mecánico*, se verifica si el flujo es subcrítico o crítico con la Ecuación [65] y posteriormente se calcula el área efectiva de descarga de la válvula utilizando la Ecuación [66]. En la Tabla 44 se muestran los resultados de ambos cálculos.

Tabla 44. Resultados del el área efectiva de descarga.

Parámetro	Valor
Pcf (bar)	1,93
A (mm ²)	$3,44 \cdot 10^{-1}$

Por la presión obtenida se puede concluir que la corriente gaseosa es un fluido subcrítico, así como el área efectiva de descarga calculada es mucho menor que la válvula de menor área del Catálogo de Crosby mostrado en el apartado 12. *Válvulas de alivio* de la Parte A: *Diseño mecánico*, por esto se elegiría la válvula *Series BP Fixed Blowdown Balanced Pressure Relief Valve* que tiene un área efectiva de descarga de 47,7 mm².

8. Hoja de especificaciones

<i>Planta de producción de 2-propenal a partir de propileno</i>		
COLUMNA DE CONTACTO LÍQUIDO-VAPOR		
Nombre del equipo	Columna de absorción T-302	
Etiqueta del equipo	T-302	
Código de diseño	ASME BPV Sección VIII Div. 1	
Altura total (desde el suelo)	m	7,28
DATOS DEL PROCESO		
Caudal de vapor máximo	kg/s	3,35
Caudal de líquido máximo	kg/s	10,76
Temperatura de operación	°C	20,00
Presión de operación	bar	1,59
Densidad del vapor	kg/m ³	2,02
Densidad del líquido	kg/m ³	1018,51
Tensión superficial del líquido	N/m	74,68
Viscosidad del vapor	kg/m·s	$1,70 \cdot 10^{-5}$
Viscosidad del líquido	kg/m·s	$1,30 \cdot 10^{-3}$
Difusividad del vapor	m ² /s	$9,66 \cdot 10^{-6}$
Difusividad del líquido	m ² /s	$8,88 \cdot 10^{-10}$
CONSTRUCCIÓN Y MATERIALES		
Material de la carcasa	Acero inoxidable 304	
Diámetro interno de carcasa	mm	1638,00
Diámetro externo de carcasa	mm	1651,34
Altura de la carcasa cilíndrica	mm	3418
Temperatura de diseño	°C	47,78
Presión de diseño	bar	3,33
Tipo de columna	De relleno	
Distribución del relleno	Al azar	
Material del relleno	Cerámica	
Tipo de relleno	Monturas de Berl	
Diámetro del relleno	mm	25
Factor de empaquetamiento	Ft ² /ft ³	110
Altura total de relleno	mm	1418
Caída de presión columna seca	bar	$1,56 \cdot 10^{-2}$
Caída de presión columna inundada	bar	$2,52 \cdot 10^{-2}$
Caída de presión total	bar	$1,85 \cdot 10^{-2}$
NOTAS		
La columna de absorción T-302 cuenta con dos cabezales toriesféricos, superior e inferior, que cubren los extremos de la carcasa cilíndrica. El soporte del equipo es de tipo falda recta, cuya altura es de 2,50 m.		

9. Bibliografía

1. **TOWLER, G. & SINNOTT, R.** *Chemical Engineering Design.*: Elsevier, Inc., 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1.
2. **BENÍTEZ, J.** *Principles and modern applications of mass transfer operations.* 2º ed : Wiley, 2009. ISBN:978-0-470-18178-2.

PARTE D:
COLUMNA DE
DESTILACIÓN T-304

ÍNDICE

1.	Introducción	1
2.	Especificaciones iniciales	1
2.1.	Corriente de alimentación	1
2.2.	Grado de separación requerido	2
2.3.	Condiciones de operación	3
2.4.	Tipo de dispositivo de contacto	3
2.5.	Requerimientos de reflujo	4
3.	Determinación del número de etapas de equilibrio en la columna de destilación T-304	5
3.1.	Balance de materia	5
3.2.	Balance de energía	6
3.3.	Equilibrio líquido-vapor	7
3.3.1.	Cálculo de la presión de vapor	9
3.3.2.	Cálculo de los coeficientes de actividad	9
3.3.3.	Cálculo de las temperaturas de burbuja y de rocío	12
3.3.4.	Cálculo de los datos de equilibrio líquido-vapor	14
3.4.	Método aproximado de diseño: Método McCabe-Thiele	16
3.4.1.	Resultados obtenidos del método aproximado de diseño	18
3.5.	Método riguroso de diseño: Ecuaciones MESH	21
3.5.1.	Cálculo de entalpías específicas	22
3.5.2.	Cálculos por etapas de equilibrio	24
3.5.3.	Resumen de los resultados del método riguroso de diseño	34
3.6.	Resumen de la determinación del número de etapas de equilibrio	36
4.	Diseño hidráulico de la columna de destilación T-304	36
4.1.	Eficiencia de la columna	37
4.2.	Propiedades del sistema	38
4.3.	Espaciado entre platos	39
4.4.	Tipo de plato	39
4.5.	Diámetro de la columna	40
4.6.	Patrón de flujo	43
4.7.	Estructura del plato	44
4.8.	Comprobación de la velocidad de goteo	46
4.9.	Comprobación de la caída de presión	47
4.10.	Comprobación del retorno de la bajante	49
4.11.	Comprobación del tiempo de residencia	51
4.12.	Detalles del plato	51
4.13.	Comprobación del porcentaje de inundación	54
4.14.	Comprobación del arrastre	54
5.	Diseño mecánico de la columna de destilación T-304	56
5.1.	Presión de diseño	56
5.2.	Temperatura de diseño	56
5.3.	Selección del material de construcción	56

5.4.	Mínimo espesor de carcasa requerido	57
5.5.	Cabezales.....	57
5.6.	Altura de la columna.....	58
5.7.	Aislamiento térmico	59
5.8.	Aberturas y conexiones.....	61
5.9.	Cargas	61
5.9.1.	Cargas por peso.....	61
5.9.2.	Cargas por viento.....	62
5.10.	Esfuerzos	63
5.10.1.	Esfuerzos primarios	63
5.10.2.	Esfuerzos principales y esfuerzo máximo permisible	63
5.10.3.	Esfuerzos de compresión y estabilidad elástica	64
5.11.	Soporte	64
6.	Válvula de alivio PSV-323.....	65
7.	Hoja de especificaciones del equipo	66
8.	Bibliografía.....	67

1. Introducción

En la mayoría de los casos, los compuestos producidos en los reactores no cumplen con las especificaciones necesarias para su venta o usos posteriores. Es por ello que, estos productos deben someterse a operaciones de separación, de modo que se alcance la composición necesaria para dichos fines (1).

En la industria química, hay muchas operaciones de separación basadas en la diferencia de las composiciones de las fases coexistentes, de manera que al ponerlas en contacto reiteradamente es posible separar uno o más componentes de la mezcla inicial (2). Entre estas operaciones, la destilación es la técnica más utilizada, representando entre el 90 y 95% de las separaciones (1).

La destilación depende de la diferencia de volatilidades de los compuestos a separar, facilitándose mientras mayor sea dicha diferencia. Este tipo de separación se lleva a cabo en columnas de destilación, en las cuales se consigue el contacto entre fases mediante sucesivas etapas interconectadas. Se diferencian dos secciones en la columna, la de enriquecimiento y la de agotamiento, ubicadas por encima y por debajo de la entrada de la alimentación, respectivamente (3).

Se utiliza un condensador en la parte superior de la columna para proporcionar el líquido que retorna a la columna y desciende, y una caldera en la parte inferior para generar el vapor que asciende a lo largo de la columna. La corriente de destilado que sale por cabezas estará enriquecida de los componentes más volátiles, mientras que la corriente que sale por colas contendrá los menos volátiles (2).

En el presente proyecto, la columna de destilación T-304 se utiliza para obtener la acroleína con las especificaciones requeridas para su venta. Para lo cual, se diseñará la columna siguiendo una serie de pasos (3):

1. Establecer las especificaciones de partida, sobre la corriente de alimentación, la selección del grado de separación requerido, de las condiciones de operación de la columna, el tipo de dispositivo de contacto a utilizar y los requerimientos de reflujo.
2. Determinar el número de etapas de equilibrio. Se tendrá una primera estimación mediante un método aproximado, y posteriormente se realizará el diseño riguroso empleando las ecuaciones MESH. Asimismo, se obtendrán los perfiles de temperatura y de composición a lo largo de la columna.
3. Realizar el diseño hidráulico, con el cuál se obtendrá el número real de etapas de equilibrio requeridas, el diámetro interno de la columna de destilación y la caída de presión existente. Aquí también se detallarán los accesorios internos de la columna y se obtendrán sus especificaciones.
4. Realizar el diseño mecánico, relacionado con el exterior de la columna. Se obtendrán las condiciones de diseño, se seleccionará el material de construcción, los cabezales de la columna y su soporte. Además, se tendrá en cuenta el recubrimiento del equipo con un material aislante.
5. Por último, se dimensionará la válvula de alivio que poseerá la columna de destilación.

2. Especificaciones iniciales

2.1. Corriente de alimentación

La corriente de entrada a la columna de destilación T-304 corresponde a un líquido saturado, que se compone de acroleína, agua, acetaldehído y dióxido de carbono, tal como se especifica en la

Tabla 1. Debido a que se trata de un líquido saturado, esta corriente se alimenta a la columna a su temperatura de burbuja.

Tabla 1. Especificaciones iniciales de la corriente de alimentación de la columna de destilación T-304.

Componente	Caudal molar de entrada (kmol/h)	Fracción molar, z_i
Acroleína	24,004	0,3070
Agua	53,964	0,6900
Acetaldehído	0,207	0,0026
Dióxido de carbono	0,030	0,0004
Total	78,205	1,0000

Como se puede notar, la mezcla cuaternaria de esta corriente de alimentación se compone en más de un 99% de acroleína y agua. Es por ello que se asumirá el sistema como pseudo-binario, considerando el acetaldehído y dióxido de carbono como impurezas, y no se tendrán en cuenta para efectos del diseño de esta columna de destilación. Debido a que el dióxido de carbono y el acetaldehído son los componentes más volátiles de esas cuatro sustancias, se asumirá que todo lo que se alimenta a la columna de dichos compuestos saldrá por cabezas de la misma. Por consiguiente, las especificaciones de la corriente de alimentación que se tomarán para el diseño de la columna de destilación T-304 se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2. Especificaciones finales de la corriente de alimentación de la columna de destilación T-304.

Componente	Caudal molar de entrada (kmol/h)	Fracción molar, z_i
Acroleína	24,004	0,308
Agua	53,964	0,692
Total	77,968	1,000

De estos dos compuestos, el más volátil es la acroleína, por lo que, a priori, se espera que se recupere prácticamente en su totalidad por cabezas de la columna, mientras que el agua, al ser el compuesto menos volátil, saldrá por colas de la columna.

2.2. Grado de separación requerido

Como se comentó anteriormente, esta columna de destilación tiene como finalidad enriquecer la corriente de producto en acroleína, para que cumpla las especificaciones necesarias para su venta. Por esta razón, el grado de separación se debe seleccionar en función a ello. En la Tabla 3 se resumen los requerimientos de pureza, siguiendo lo establecido en las referencias (4-5), los cuales se fijarán como objetivo a conseguir.

Tabla 3. Requerimientos de pureza. Adaptado de (4-5).

Componente	Límite (% en peso)
Impurezas de bajo punto de ebullición	2
Acroleína	95-97
Agua	4

Siguiendo esta línea, teniendo en cuenta el azeótropo existente en la mezcla binaria acroleína-agua para una composición molar de 92% de acroleína, luego de realizar varias simulaciones de esta separación en *Aspen Hysys*, se ha fijado que la corriente de destilado deberá tener un 90% molar de acroleína en su composición. De esta manera, se consigue obtener el producto deseado

cumpliendo con los requerimientos de pureza especificados: 95,83% de acroleína, 3,42% de agua, 0,65% de acetaldehído, 0,09% de dióxido de carbono, todos los % en peso.

2.3. Condiciones de operación

Resulta importante seleccionar el tipo de destilación con el que se va a trabajar. Por un lado, está la destilación continua, que se prefiere al operar con grandes cantidades de producto, siempre y cuando las composiciones en la alimentación permanezcan constantes. Mientras que la destilación discontinua resulta ventajosa si la situación es la contraria, es decir, al operar con pequeñas cantidades y cuando la composición de la alimentación de la columna cambia frecuentemente (1).

En el caso de la planta de producción de acroleína, el modo de operación es continuo, y la composición de la corriente de alimentación a la columna de destilación T-304 no variará. Por estas razones, se decide que el tipo de destilación a emplear sea destilación continua.

La presión de operación de la columna es otro aspecto muy importante que se debe seleccionar al principio del diseño. Para ello, se tendrán en cuenta las heurísticas presentadas en la bibliografía (1):

- Las columnas de destilación que operan a vacío son más costosas, por lo que es recomendable que la presión de operación sea igual o mayor a 1 bar. Para presiones entre 1 y 7 bar, suele haber poco aumento en los costos de la columna.
- La presión de operación debe seleccionarse de modo que se pueda emplear agua de refrigeración en el condensador, por ser la opción menos costosa. Para ello, la temperatura de rocío de la corriente a destilar debe ser mayor a 30 °C, debido a que esa es la máxima temperatura del agua de refrigeración.
- La presión de operación debe ajustarse para que se pueda utilizar vapor u otra utilidad caliente en la caldera. La temperatura de burbuja del líquido en el fondo de la columna debe ser alrededor de 5 °C menor a la temperatura del vapor.

En aquellos casos donde las heurísticas no concuerden, la que predomina es la segunda, debido a que el uso de otro refrigerante suele ser muy costoso. Por otro lado, operar con altas presiones disminuye la volatilidad relativa de los componentes, complicando su separación (1).

Considerando lo anteriormente expuesto, se decide que la presión de operación de la columna de destilación T-304 sea de 1,013 bar, es decir presión atmosférica, y debido a que no se puede calcular la caída de presión en la columna sin tener el número de etapas, esta presión se considerará constante para la determinación del número de etapas de equilibrio necesaria para alcanzar la separación deseada. Luego, en el diseño hidráulico se calculará la caída de presión existente en la columna de destilación.

Por otra parte, la temperatura en la columna de destilación estará entre la temperatura de la corriente de destilado y la temperatura de la corriente de salida por colas. Como se sabe que en el destilado saldrá mayoritariamente el compuesto más volátil, y en colas el menos volátil, se puede estimar desde un principio, que la temperatura de estas corrientes, estará en torno a la temperatura de ebullición de la acroleína y del agua, respectivamente. Como ya se comentó, la corriente que se alimenta a la columna es un líquido saturado que, a presión atmosférica, su temperatura de burbuja es de 53,30 °C.

2.4. Tipo de dispositivo de contacto

Para poner en contacto las fases en la columna de destilación, se pueden emplear dos tipos de dispositivo de contacto: platos o relleno. Para su elección, se estudiarán las ventajas y desventajas

que tiene cada uno de ellos, las cuales se resumen en la Tabla 4 mostrada a continuación. Asimismo, para esta selección se tendrá en cuenta también el dispositivo de contacto más empleado industrialmente para la separación en cuestión.

Tabla 4. Comparación de columnas de platos y de relleno (3).

Columnas de platos	Columnas de relleno
Pueden operar con un extenso rango de caudales de líquido y gas.	No son recomendadas al operar con bajos caudales de líquido.
La eficiencia de un plato se puede determinar con precisión.	La eficiencia del relleno vendrá dada por el término equivalente: HETP o HUT.
Se asegura una buena distribución del líquido en toda la columna.	No hay seguridad de que exista una buena distribución del líquido en la columna, menos si la columna es grande.
Facilidad de equipar la columna con medios de refrigeración.	Resulta difícil equipar la columna con medios de refrigeración.
Posibilidad de tener una corriente de salida lateral en la columna.	Se dificulta tener extracciones laterales.
La limpieza de los platos no es complicada.	Por lo general, cuando el relleno se ensucia es más conveniente reemplazarlo.
No son recomendadas si se opera con líquidos corrosivos.	Se prefiere al operar con líquidos corrosivos, debido que hay una menor retención de líquido.
No se recomiendan si se trabaja con sistemas que generan espuma.	Pueden operar con sistemas que generan espuma.
No se suelen emplear al trabajar en vacío.	Se recomiendan al trabajar con vacío porque la caída de presión por etapa de equilibrio es menor.
Resulta costosa su instalación cuando la columna tiene un diámetro menor a 0,6 metros.	Se prefieren cuando el diámetro de la columna es pequeño.

Teniendo en cuenta que no se trabaja a vacío, que el sistema no genera espuma, y que los caudales con los que se operan son relativamente bajos, se decide que el contacto entre las fases sea por medio de platos. Además, se ha encontrado en la bibliografía que industrialmente se emplean columnas de destilación de platos para la separación del sistema acroleína-agua (5).

2.5. Requerimientos de reflujo

La relación de reflujo es otro parámetro importante que determinar. Generalmente, se obtiene la relación de reflujo mínima al emplear los métodos aproximados de diseño en las columnas de destilación, y según lo indicado en la bibliografía, se encuentra un valor óptimo de reflujo, multiplicando la relación de reflujo mínima por un valor seleccionado entre 1,05 - 1,50 (3).

No obstante, multiplicando por 1,50 la relación de reflujo mínima obtenida con el diagrama McCabe-Thiele en el apartado 3.4.1. *Resultados obtenidos del método aproximado de diseño*, conduce a una relación de reflujo muy baja. Luego de simular en Aspen Hysys la columna de destilación, y haber probado diferentes valores de relación de reflujo, se decide establecer el valor de 0,62 como relación de reflujo óptima, con la que se consigue la separación deseada.

3. Determinación del número de etapas de equilibrio en la columna de destilación T-304

En este apartado se realizarán los balances de materia y de energía de la columna de destilación T-304. Los resultados mostrados en el *Anexo I: Balances de materia y energía* incluyen los cuatro componentes existentes en la alimentación de la columna, no obstante, a continuación, se detallan los balances de materia y energía para el sistema pseudo-binario con el cual se diseña esta columna de destilación. Asimismo, se presentarán los datos de equilibrio líquido-vapor del sistema binario acroleína-agua, y se calculará el número de etapas de equilibrio necesarias para conseguir la separación deseada, empleando un método aproximado y posteriormente un método riguroso.

3.1. Balance de materia

Como se especificó anteriormente, en el apartado 2.2. *Grado de separación requerido*, se ha fijado la composición de acroleína en la corriente de destilado para cumplir con el grado de separación requerido. Para conseguir esta separación, se recuperará en la corriente de destilado un 99,36% del total de acroleína a la entrada, permitiendo en esta corriente solo un 4,91% del total de agua a la entrada. Conociendo este dato y la composición de la corriente de alimentación de la columna de destilación, detallada en la Tabla 2, es posible calcular los flujos de cada componente en las corrientes de salida, por cabezas y colas, de la columna. Para ello, se aplicarán las Ecuaciones [1] y [2].

$$D \cdot x_{D,i} = F \cdot z_i \cdot \%_{recuperación,i} \quad [1]$$

$$B \cdot x_{B,i} = F \cdot z_i \cdot (1 - \%_{recuperación,i}) \quad [2]$$

Donde:

- F es el caudal de la corriente de alimentación, en kmol/h.
- D es el caudal de la corriente de destilado, en kmol/h.
- B es el caudal de la corriente de colas, en kmol/h.
- z_i es la composición molar del componente i en la corriente de alimentación.
- $x_{D,i}$ es la composición molar del componente i en la corriente de destilado.
- $x_{B,i}$ es la composición molar del componente i en la corriente de colas.
- $\%_{recuperación,i}$ es la fracción de recuperación del componente i en la corriente de destilado, con respecto a lo alimentado de dicho componente.

Teniendo los flujos molares de cada componente en ambas corrientes de salida, con las Ecuaciones [3] y [4] se obtienen los flujos de destilado y de colas, respectivamente. Posteriormente, se comprobará el cierre del balance, aplicando un balance global a la columna, Ecuación [5], y un balance por componente, Ecuación [6].

$$D = \sum D \cdot x_{D,i} \quad [3]$$

$$B = \sum B \cdot x_{B,i} \quad [4]$$

$$F = D + B \quad [5]$$

$$F \cdot z_i = D \cdot x_{D,i} + B \cdot x_{B,i} \quad [6]$$

Los resultados del balance de materia se muestran en la Tabla 5 y el cierre del balance en la Tabla 6.

Tabla 5. Resultados del balance de materia a la columna de destilación T-304.

Componente	Caudal molar en destilado (kmol/h)	Fracción molar, $x_{D,i}$	Caudal molar en colas (kmol/h)	Fracción molar, $x_{B,i}$
Acroleína	23,85	0,900	0,15	0,003
Agua	2,65	0,100	51,32	0,997
Total	26,50	1,000	51,47	1,000

Tabla 6. Comprobación del cierre del balance de materia.

Componente	Caudal de entrada (kmol/h)	Caudal de salida (kmol/h)	Cierre
Acroleína	24,00	24,00	0,00
Agua	53,97	53,97	0,00
Total	77,97	77,97	0,00

Con los datos conocidos hasta este punto, también se puede realizar un balance de materia en el condensador E-304. Cabe destacar que se trata de un condensador total, debido a que se quiere que el producto de salida por cabezas sea líquido. Para ello, se determinará el flujo de vapor que se dirige al condensador utilizando el valor de relación de reflujo especificado en el apartado 2.5. *Requerimientos de reflujo*, empleando la Ecuación [7]. Luego, despejando de la Ecuación [8] se calculará el caudal de líquido que retorna a la columna como reflujo.

$$V_1 = \frac{L_o}{D} \cdot D \quad [7]$$

$$V_1 = L_o + D \quad [8]$$

Donde:

- V_1 es el caudal de vapor que sale de la sección de enriquecimiento de la columna y entra al condensador, en kmol/h.
- L_o es el caudal de líquido saturado que sale del condensador y retorna a la columna como reflujo, en kmol/h.

Los resultados obtenidos del balance global en el condensador total se recogen en la Tabla 7.

Tabla 7. Resultados del balance de materia en el condensador total E-304.

Corriente	Caudal molar (kmol/h)
V_1	42,97
L_o	16,47

3.2. Balance de energía

Para realizar el balance de energía a la columna de destilación T-304, será necesario conocer previamente las temperaturas de las corrientes de destilado y de colas, de modo que se puedan conocer las entalpías de estas corrientes. El cálculo de estas temperaturas y de las entalpías específicas de las corrientes, se explica en los apartados 3.3.3. *Cálculo de las temperaturas de burbuja y de rocío* y 3.5.1. *Cálculo de entalpías específicas*, respectivamente.

Una vez conocidas las entalpías de las corrientes, se realizará un balance de energía en el condensador, aplicando la Ecuación [9], para determinar el calor retirado en el condensador, Q_C .

Posteriormente, se aplicará un balance de energía global a la columna, siguiendo la expresión de la Ecuación [10], con el cual se determina el calor aportado en la caldera, Q_R .

$$V_1 \cdot H_1 + Q_C = D \cdot h_D + L_o \cdot h_o \quad [9]$$

$$F \cdot h_F + Q_C + Q_R = B \cdot h_B + D \cdot h_D \quad [10]$$

Donde:

- H_1 es la entalpía de la corriente de vapor V_1 , en kJ/kmol.
- h_D es la entalpía de la corriente de destilado D , en kJ/kmol.
- h_o es la entalpía de la corriente de reflujo L_o , en kJ/kmol.
- h_F es la entalpía de la corriente de alimentación F , en kJ/kmol.
- h_B es la entalpía de la corriente de colas B , en kJ/kmol.
- Q_C es el calor retirado en el condensador, en kW.
- Q_R es el calor aportado en la caldera, en kW.

Las entalpías calculadas, resumidas en la Tabla 8, se tomarán como dato para realizar el balance de energía, cuyos resultados se muestran en la Tabla 9.

Tabla 8. Datos para realizar el balance de energía en la columna de destilación T-304.

Corriente	Caudal molar (kmol/h)	Entalpía (kJ/kmol)
F	77,97	6.155,18
D	26,50	6.486,98
B	51,47	7.173,14
V_1	42,97	35.468,31
L_o	16,47	6.486,98

Tabla 9. Resultados del balance de energía en la columna de destilación T-304.

Parámetro	Resultado (kW)
Q_C	-345,91
Q_R	362,91

3.3. Equilibrio líquido-vapor

Para llevar a cabo los cálculos del diseño de la columna, se requiere conocer los datos de equilibrio líquido-vapor de la mezcla binaria con la que se trabaja. En la Tabla 10 a continuación se muestran estos datos, tomados de la bibliografía (6). Cabe aclarar que x e y se refieren a la fracción molar de la acroleína en la fase líquida y vapor, respectivamente.

Tabla 10. Datos de equilibrio líquido-vapor del sistema acroleína-agua a 1 atm (6).

Temperatura (°C)	x	y
52,5	0,9910	0,9840
52,4	0,9780	0,9650
52,4	0,9650	0,9530
52,3	0,9460	0,9370
52,3	0,9270	0,9270
52,4	0,8920	0,9060

Tabla 10 (Continuación). Datos de equilibrio líquido-vapor del sistema acroleína-agua a 1 atm (6).

Temperatura (°C)	x	y
52,8	0,8340	0,8870
53,3	0,7590	0,8710
53,7	0,7000	0,8660
53,7	0,1020	0,8660
54,8	0,0890	0,8600
58,2	0,0620	0,8220
62,4	0,0480	0,7900
71,0	0,0300	0,7130
76,5	0,0210	0,6460
85,5	0,0095	0,4580
92,1	0,0059	0,3480

Cuando en la mezcla de componentes, la fase vapor está en equilibrio con la fase líquida, la fugacidad de cada componente es igual en ambas fases, esto es:

$$f_i^V = f_i^L \quad [11]$$

Cuando la fase vapor obedece la ley de gases ideales, la fugacidad del componente i en dicha fase se puede determinar mediante la expresión de la Ecuación [12]. De manera similar, si la fase líquida se considera una disolución ideal, se cumple lo establecido en la Ecuación [13]. Sustituyendo entonces las Ecuaciones [12] y [13] en la Ecuación [11], se obtiene la expresión de la ley de Raoult, Ecuación [14] (7).

$$f_i^V = P \cdot y_i \quad [12]$$

$$f_i^L = P_i^o \cdot x_i \quad [13]$$

$$P \cdot y_i = P_i^o \cdot x_i \quad [14]$$

Donde:

- f_i es la fugacidad del componente i de la mezcla.
- V y L hacen referencia a la fase vapor y fase líquida, respectivamente.
- P es la presión total del sistema, bar.
- P_i^o es la presión de vapor del componente i de la mezcla, bar.
- x_i es la fracción molar del componente i de la mezcla en fase líquida.
- y_i es la fracción molar del componente i de la mezcla en fase vapor.

Generalmente, cuando se trabaja a presión atmosférica o vacío, la fase vapor obedece la ley de gases ideales (7). Debido a esto se considerará idealidad en la fase vapor. Sin embargo, no se puede tomar la misma consideración para la fase líquida, pues la mezcla líquida acroleína-agua se aleja de la idealidad. Por lo tanto, la expresión de la Ecuación [13] para la fugacidad de los componentes en la fase líquida queda reemplazada por la Ecuación [15], en la cual se incluyen los coeficientes de actividad de los componentes de la mezcla, γ_i .

$$f_i^L = P_i^o \cdot \gamma_i \cdot x_i \quad [15]$$

Ahora, sustituyendo nuevamente las Ecuaciones [12] y [15] en la Ecuación [11], se obtiene la expresión de la ley de Raoult modificada, mostrada a continuación:

$$P \cdot y_i = P_i^o \cdot \gamma_i \cdot x_i \quad [16]$$

En este caso, se vuelve necesario determinar los coeficientes de actividad de los componentes de la mezcla para poder calcular la relación de equilibrio líquido-vapor (7). Para ello, se han desarrollado diversas ecuaciones, que se presentarán más adelante, en cuyas expresiones se utilizan unas constantes que son propias para el sistema con el que se trabaja.

Cabe acotar que, tal como se observa en las especificaciones iniciales de la corriente de alimentación de la columna, Tabla 1, se tiene una mezcla cuaternaria. Se buscaron los coeficientes necesarios para el cálculo de los coeficientes de actividad para dicha mezcla, pero a falta de esa información, sumado al hecho de que la cantidad de acetaldehído y dióxido de carbono es minúscula con respecto a los otros componentes, se decidió considerar la mezcla de entrada como pseudo-binaria, tal como se especificó anteriormente.

3.3.1. Cálculo de la presión de vapor

Para poder emplear la ley de Raoult modificada, Ecuación [16], es necesario conocer también la presión de vapor de cada componente de la mezcla binaria. Para ello, se hará uso de la ecuación de Antoine, cuya expresión se muestra en la Ecuación [17].

$$\log_{10} P^o = A - \frac{B}{T + C} \quad [17]$$

Esta expresión utiliza tres coeficientes, A, B y C, que son propios para cada sustancia y están dados para un cierto rango de temperaturas. En la Tabla 11, expuesta a continuación, se muestran los valores utilizados de estos coeficientes para los compuestos con las que trabaja la columna de destilación.

Tabla 11. Datos para el uso de la Ecuación de Antoine (8-9).

Sustancia	A	B	C	T _{mínima} (°C)	T _{máxima} (°C)	Unidades de P ^o y T
Acroleína	7,38041	1343,54	245,902	-87,7	232,85	mmHg y °C
Agua	4,6543	1435,264	-64,848	-17,1	100	bar y K

Cabe aclarar que se utilizará la expresión de la Ecuación [17] utilizando diferentes unidades de presión de vapor y temperatura debido a que no se ha encontrado en una misma bibliografía los coeficientes de la ecuación de Antoine para los compuestos acroleína y agua, en el rango de temperaturas en el que se opera en esta columna de destilación. Y, se quiso priorizar el hecho de que la temperatura de operación estuviera dentro de los rangos de temperaturas para los que vienen dados los coeficientes, a pesar de tener que utilizar la expresión en diferentes unidades para el cálculo de las presiones de vapor de los compuestos en cuestión.

3.3.2. Cálculo de los coeficientes de actividad

Con el propósito de describir el comportamiento no ideal de las soluciones, se definen las propiedades en exceso, las cuales miden sus desviaciones del comportamiento de una solución ideal. Cualquier propiedad termodinámica extensiva en exceso de una disolución, se determinará como la diferencia entre su valor real y el valor que tendría si la disolución fuera ideal, a las mismas condiciones de temperatura, presión y composición (10).

De esta manera, se determina una propiedad que corresponde a la energía de Gibbs en exceso, tal como se muestra en la Ecuación [18]. Esta propiedad es de interés debido a que está relacionada

con los coeficientes de actividad de los componentes de las soluciones, como se indica en la Ecuación [19] (10).

$$\Delta G^E = \Delta G - \Delta G^{id} \quad [18]$$

$$\Delta G^E = R \cdot T \cdot \sum x_i \cdot \ln \gamma_i \quad [19]$$

Existe una serie de ecuaciones, entre las que se encuentran las ecuaciones de Margules, van Laar, Wilson, NRTL y UNIQUAC, que se utilizan para la representación de la energía de Gibbs en exceso, en función de la composición y a una temperatura constante. Por lo tanto, los coeficientes de actividad se pueden determinar por medio de ellas (6).

Según lo expuesto en la bibliografía (7), la ecuación de Wilson resalta entre las tres primeras mencionadas por tener una mayor precisión. No obstante, se calcularán los datos de equilibrio de la mezcla binaria acroleína-agua con cada una de las ecuaciones antes mencionadas, y se determinará cuál de ellas se ajusta más a los datos bibliográficos de la Tabla 10. Aquella que se ajuste más, será empleada para el cálculo de los coeficientes de actividad en el diseño riguroso, más adelante. Cabe acotar que el subíndice 1 hace referencia a la acroleína, y el 2 al agua.

Tabla 12. Ecuaciones para el cálculo de coeficientes de actividad para mezclas binarias (6).

Ecuación	Parámetros ajustables	$\ln \gamma_1 =$ $\ln \gamma_2 =$	
Margules	A_{12}	$[A_{12} + 2 \cdot (A_{21} - A_{12}) \cdot x_1] \cdot x_2^2$	[20]
	A_{21}	$[A_{21} + 2 \cdot (A_{12} - A_{21}) \cdot x_2] \cdot x_1^2$	[21]
van Laar	A_{12}	$A_{12} \cdot \left(\frac{A_{21} \cdot x_2}{A_{12} \cdot x_1 + A_{21} \cdot x_2} \right)^2$	[22]
	A_{21}	$A_{21} \cdot \left(\frac{A_{12} \cdot x_1}{A_{12} \cdot x_1 + A_{21} \cdot x_2} \right)^2$	[23]
Wilson	Λ_{12}	$-\ln(x_1 + \Lambda_{12} \cdot x_2) + x_2 \cdot \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12} \cdot x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21} \cdot x_1 + x_2} \right)$	[24]
	Λ_{21}	$-\ln(x_2 + \Lambda_{21} \cdot x_1) - x_1 \cdot \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12} \cdot x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21} \cdot x_1 + x_2} \right)$	[25]
NRTL	τ_{12}	$x_2^2 \cdot \left[\tau_{21} \cdot \left(\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 \cdot G_{21}} \right)^2 + \left(\frac{\tau_{12} \cdot G_{12}}{(x_2 + x_1 \cdot G_{12})^2} \right) \right]$	[26]
	τ_{21}	$x_1^2 \cdot \left[\tau_{12} \cdot \left(\frac{G_{12}}{x_2 + x_1 \cdot G_{12}} \right)^2 + \left(\frac{\tau_{21} \cdot G_{21}}{(x_1 + x_2 \cdot G_{21})^2} \right) \right]$	[27]
UNIQUAC	τ_{12}	$\ln \gamma_1^C + \ln \gamma_1^R$	[28]
	τ_{21}	$\ln \gamma_2^C + \ln \gamma_2^R$	[29]

Para el caso de las ecuaciones de Margules y van Laar, los parámetros ajustables corresponden a los parámetros de interacción entre componentes, y son datos tomados de la bibliografía. No obstante, para aplicar las ecuaciones de Wilson, NRTL y UNIQUAC, los parámetros ajustables han de ser calculados como se muestra a continuación en la Tabla 13 (6).

Tabla 13. Ecuaciones para el cálculo de parámetros ajustables (6).

Ecuación	Expresión	
Wilson	$A_{ij} = \frac{V_j^L}{V_i^L} \cdot e^{\left(-\frac{A_{ij}}{R \cdot T}\right)}$	[30]
NRTL	$\tau_{ij} = \frac{A_{ij}}{R \cdot T}$	[31]
	$G_{ij} = e^{(-\alpha_{ij} \cdot \tau_{ij})}$	[32]
UNIQUAC	$\tau_{ij} = e^{\left(-\frac{A_{ij}}{R \cdot T}\right)}$	[33]

Donde:

- A_{ij} corresponde al parámetro de interacción entre los componentes i y j .
- V_i^L hace referencia a los volúmenes molares del líquido puro del componente i , ml/mol, mostrados en la Tabla 15.
- T es la temperatura de la mezcla, K.
- R es la constante universal de los gases, cal/(mol·K).
- α_{ij} es un parámetro de no aleatoriedad, propio para el sistema binario acroleína-agua; $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$.

Los parámetros de interacción entre los componentes de la mezcla binaria se muestran en la siguiente tabla, junto al parámetro de no aleatoriedad necesario para aplicar el modelo NRTL.

Tabla 14. Datos para el empleo de las ecuaciones de Margules, van Laar, Wilson, NRTL y UNIQUAC (6).

Ecuación	A_{12} (cal/mol)	A_{21} (cal/mol)	α_{ij}
Margules	2,7825	2,3541	-
van Laar	2,8021	2,3494	-
Wilson	702,4877	1969,3910	-
NRTL	1136,3015	1527,8247	0,4461
UNIQUAC	838,8771	86,3055	-

Además, para aplicar el modelo de UNIQUAC, es necesario calcular cada término de las Ecuaciones [28] y [29]. Para ello, se tienen que aplicar las siguientes ecuaciones, utilizando los datos de la Tabla 15.

$$\ln \gamma_i^C = \ln \left(\frac{\varphi_i}{x_i} \right) + \frac{z}{2} \cdot q_i \cdot \ln \left(\frac{\vartheta_i}{\varphi_i} \right) + \varphi_j \cdot \left(I_i - \frac{r_i}{r_j} \cdot I_j \right) \quad [34]$$

$$\ln \gamma_i^R = -q_i \cdot \ln(\vartheta_i + \vartheta_j \cdot \tau_{ji}) + \vartheta_j \cdot q_i \cdot \left(\frac{\tau_{ji}}{\vartheta_i + \vartheta_j \cdot \tau_{ji}} - \frac{\tau_{ij}}{\vartheta_i \cdot \tau_{ij} + \vartheta_j} \right) \quad [35]$$

$$I_i = \frac{z}{2} \cdot (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad [36]$$

$$\vartheta_i = \frac{q_i \cdot x_i}{\sum q_j \cdot x_j} \quad [37]$$

$$\varphi_i = \frac{r_i \cdot x_i}{\sum r_j \cdot x_j} \quad [38]$$

Donde:

- q_i es un parámetro de área del componente i .

- r_i es un parámetro de volumen del componente i .
- z es un número de coordinación, que toma un valor de 10.
- ϑ_i es la fracción de área del componente i .
- φ_i es la fracción de volumen del componente i .
- γ_i^C es la parte combinatoria del coeficiente de actividad del componente i .
- γ_i^R es la parte residual del coeficiente de actividad del componente i .

Tabla 15. Parámetros de componentes puros (6).

Componente	V_i^L (ml/mol)	r_i	q_i
Acroleína	66,83	2,3434	2,1240
Agua	18,07	0,9200	1,4000

3.3.3. Cálculo de las temperaturas de burbuja y de rocío

La temperatura de burbuja de una mezcla líquida corresponde a la temperatura en la que se forma la primera burbuja de vapor. Mientras que, la temperatura de rocío de un vapor es aquella a la cual dicho vapor empieza a condensar (10). Para estimarlas, debido a que se trata de cálculos iterativos, se siguen los pasos mostrados en los siguientes algoritmos. Con estos algoritmos, Figura 1 y Figura 2, es posible visualizar el procedimiento y facilitar su entendimiento.

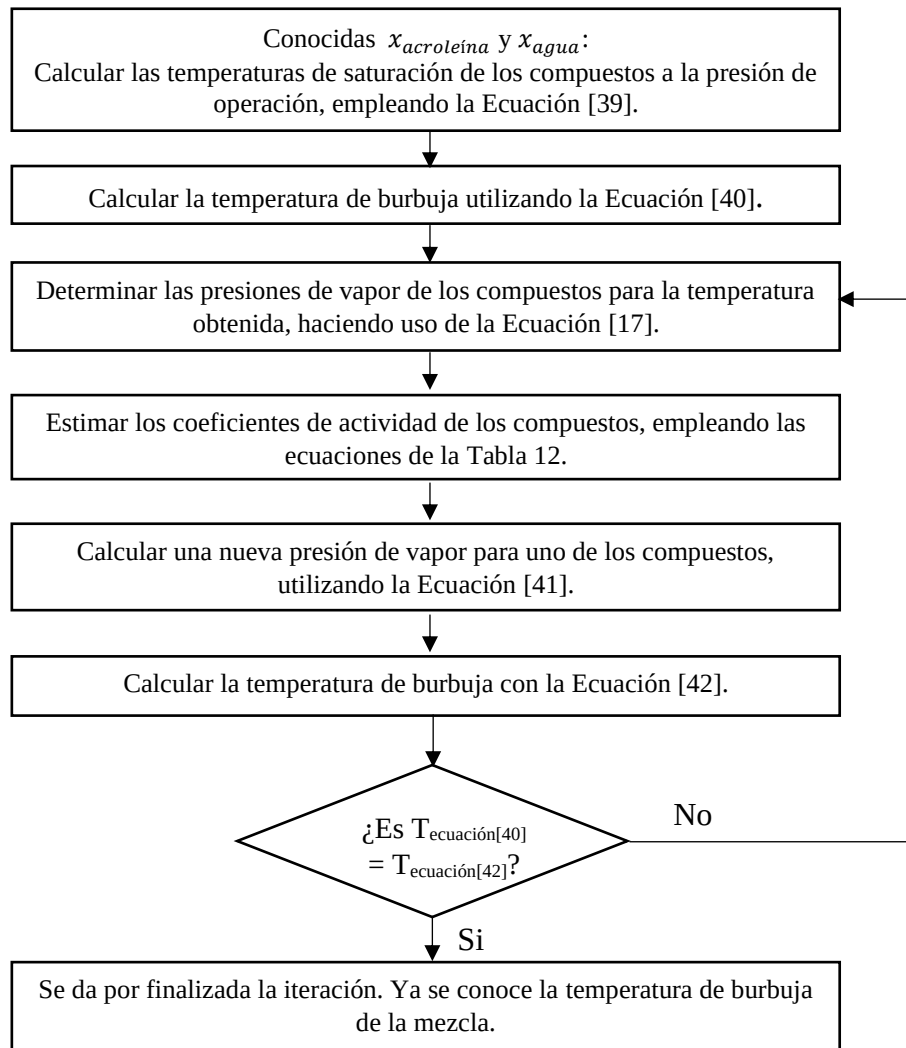


Figura 1. Algoritmo para el cálculo de temperaturas de burbuja. Elaboración propia, adaptado de (10).

Para el uso de este algoritmo, se necesitan las ecuaciones que se exponen a continuación. Para el uso de la Ecuación [39] se necesitan los coeficientes de Antoine mostrados en la Tabla 11. En las Ecuaciones [41] y [42], el subíndice j hace referencia a la acroleína.

$$T^o = \frac{B}{A - \log_{10} P} - C \quad [39]$$

$$T = \sum x_i \cdot T_i^o \quad [40]$$

$$P_j^o = \frac{P}{\sum x_i \cdot \gamma_i \cdot \left(\frac{P_i^o}{P_j^o}\right)} \quad [41]$$

$$T = \frac{B_j}{A_j - \log_{10} P_j^o} - C_j \quad [42]$$

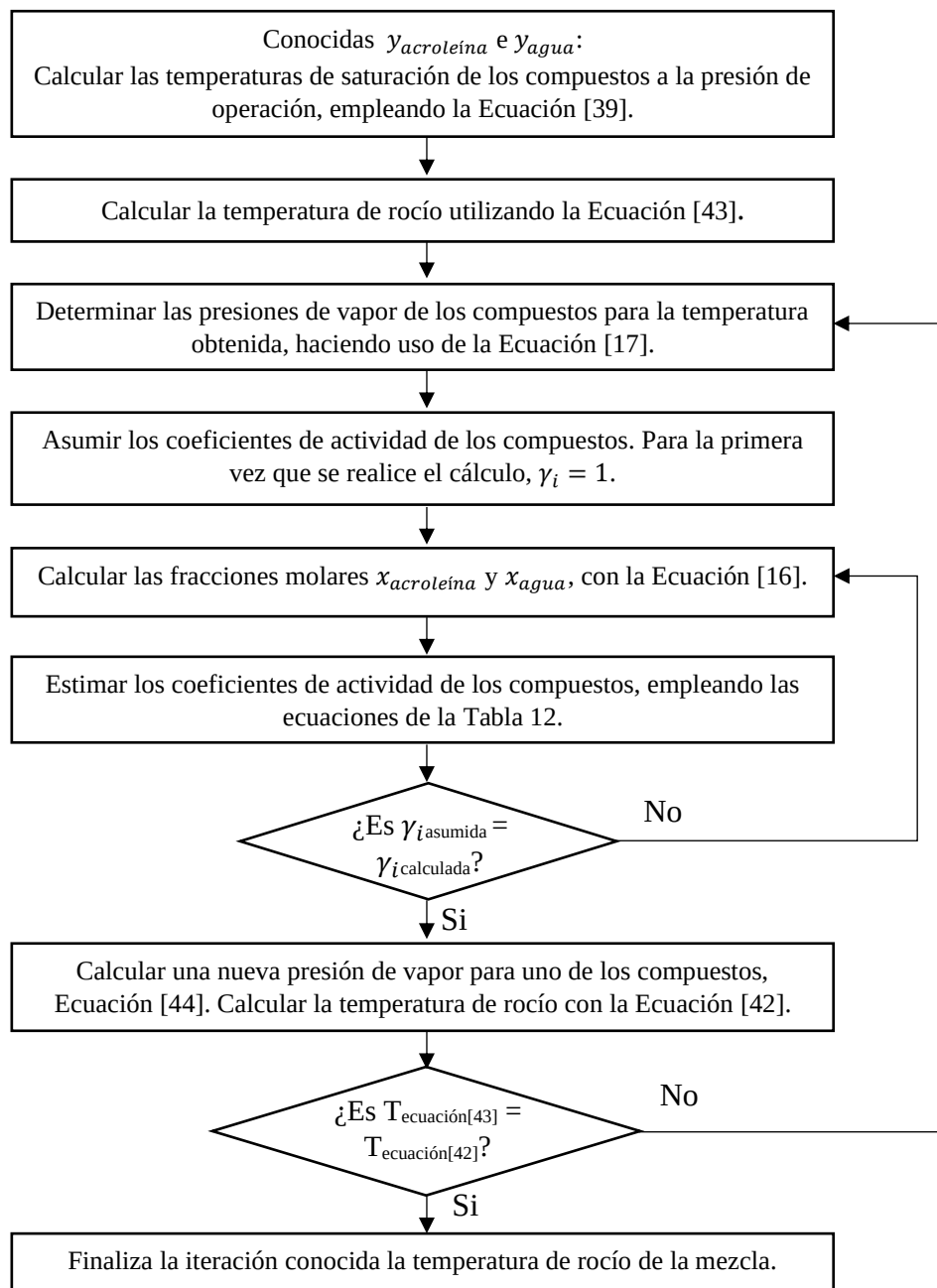


Figura 2. Algoritmos para el cálculo de temperaturas de rocío. Elaboración propia, adaptado de (10).

Asimismo, para el cálculo de la temperatura de rocío, será necesario emplear las siguientes ecuaciones.

$$T = \sum y_i \cdot T_i^o \quad [43]$$

$$P_j^o = P \cdot \sum \frac{y_i}{\gamma_i} \cdot \left(\frac{P_j^o}{P_i^o} \right) \quad [44]$$

3.3.4. Cálculo de los datos de equilibrio líquido-vapor

Para calcular los datos de equilibrio líquido-vapor del sistema acroleína-agua, con cada una de las ecuaciones de la Tabla 12, se debe empezar fijando una composición molar de acroleína en fase líquida, y determinar la temperatura a la cual las fases líquida y vapor están en equilibrio. Para el cálculo de dicha temperatura, como corresponde a la de burbuja, se seguirá el algoritmo de la Figura 1.

El procedimiento es muy repetitivo, y como se comentó anteriormente, se estimarán los datos de equilibrio con cada una de las ecuaciones mostradas en la Tabla 12. Para ejemplificar el procedimiento, se presentarán los resultados obtenidos con uno de los puntos de la curva de equilibrio, empleando para la estimación de los coeficientes de actividad las ecuaciones del modelo NRTL.

Para una composición molar de acroleína $x_1 = 0,98$, se conoce que la composición molar del agua será $x_2 = 0,02$, pues se cumple que en el equilibrio la suma de las composiciones molares es igual a la unidad, tal como se expresa en la Ecuación [45]. Cabe destacar que el subíndice 1 hace referencia a la acroleína y el 2 al agua.

$$\sum x_i = x_1 + x_2 = x_{acroleína} + x_{agua} = 1 \quad [45]$$

Una vez aplicadas las ecuaciones mencionadas en el algoritmo de la Figura 1, se obtienen los siguientes resultados, operando a presión atmosférica: $T_1^o = 52,69^\circ\text{C}$, $T_2^o = 100,44^\circ\text{C}$, y a partir que aquí se itera para encontrar la temperatura de burbuja de la mezcla, como se muestra en la Tabla 16.

Tabla 16. Resultado del cálculo de la temperatura de burbuja para $x_{acroleína} = 0,98$.

$T_{burbuja}$ (°C)	P_1^o (bar)	P_2^o (bar)	τ_{12}	τ_{21}	G_{12}	G_{21}	γ_1	γ_2	P_j^o (bar)	$T_{burbuja}$ (°C)
53,64	1,05	0,15	1,75	2,35	0,46	0,35	1	11,20	0,99	52,30
52,30	0,99	0,14	1,78	2,36	0,46	0,35	1	11,27	1	52,31
52,31	1	0,14	1,78	2,36	0,46	0,35	1	11,27	1	52,31

Conocidos los coeficientes de actividad de los componentes de la mezcla, se procede a estimar las fracciones molares en la fase vapor, empleando la ley de Raoult modificada, Ecuación [16]. Para este caso, se obtiene: $y_1 = 0,97$ e $y_2 = 0,03$. Para la fase vapor también se debe cumplir que la suma de las fracciones molares de cada componente de la mezcla sea igual a la unidad, como se muestra en la Ecuación [46].

$$\sum y_i = y_1 + y_2 = y_{acroleína} + y_{agua} = 1 \quad [46]$$

Estos cálculos son realizados para todos los demás puntos de la curva de equilibrio. Además, todos los cálculos se repiten para el resto de las ecuaciones: Margules, van Laar, Wilson y UNIQUAC. Los resultados obtenidos se han graficado y se pueden observar en la Figura 3.

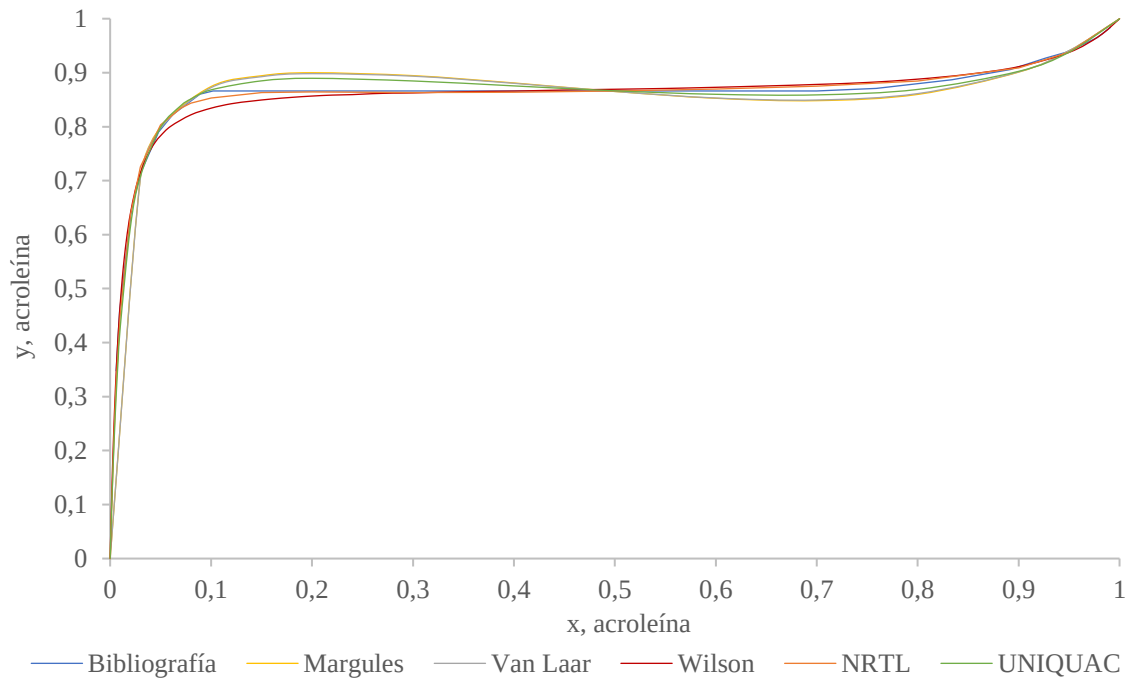


Figura 3. Comparación de las curvas de equilibrio del sistema acroleína-agua. Elaboración propia, datos bibliográficos tomados de (6).

Se puede observar que las curvas de equilibrio estimadas con las ecuaciones de Margules y van Laar son las que más se distancian de la curva de equilibrio graficada con los datos bibliográficos de la Tabla 10. Y, entre las curvas de equilibrio estimadas con las ecuaciones de Wilson, NRTL y UNIQUAC, se puede decir que la obtenida por el modelo NRTL es la que más se ajusta a los datos de la bibliografía.

En la Figura 4 se puede apreciar con mayor claridad que los datos de equilibrio estimados con el modelo NRTL se ajustan muy bien a los datos bibliográficos. Es por ello que, este será el modelo utilizado para el cálculo de los coeficientes de actividad de los componentes del sistema estudiado.

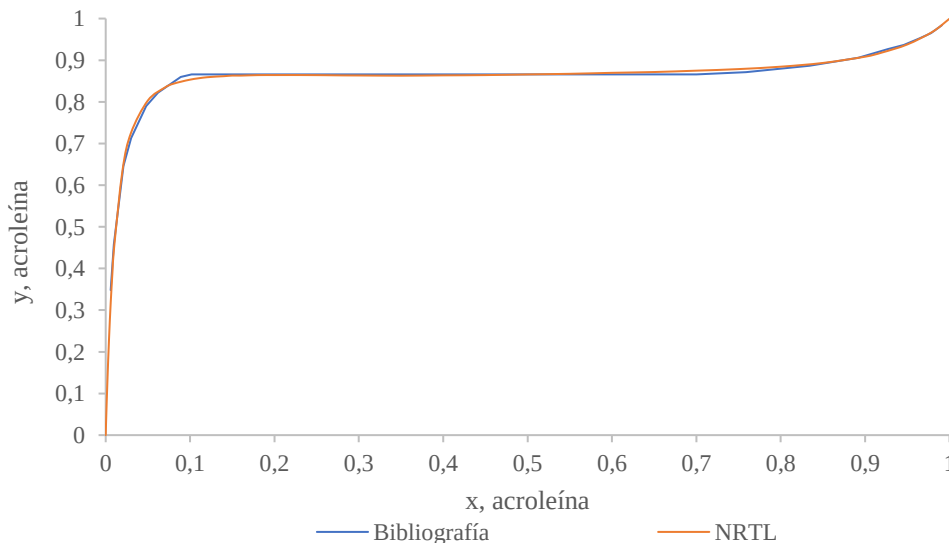


Figura 4. Curva de equilibrio del sistema acroleína-agua. Elaboración propia, datos bibliográficos tomados de (6).

A continuación, en la Figura 5, se muestra el diagrama de equilibrio T-x-y que se ha obtenido utilizando los datos estimados con el modelo NRTL. Como se puede observar, se representa la temperatura frente a las composiciones molares de la acroleína, tanto en la fase líquida como vapor. Por lo tanto, en la línea de líquido saturado se puede leer la temperatura de burbuja de la mezcla para una determinada composición. De manera similar, se puede leer la temperatura de rocío de la mezcla para una determinada composición en la línea de vapor saturado.

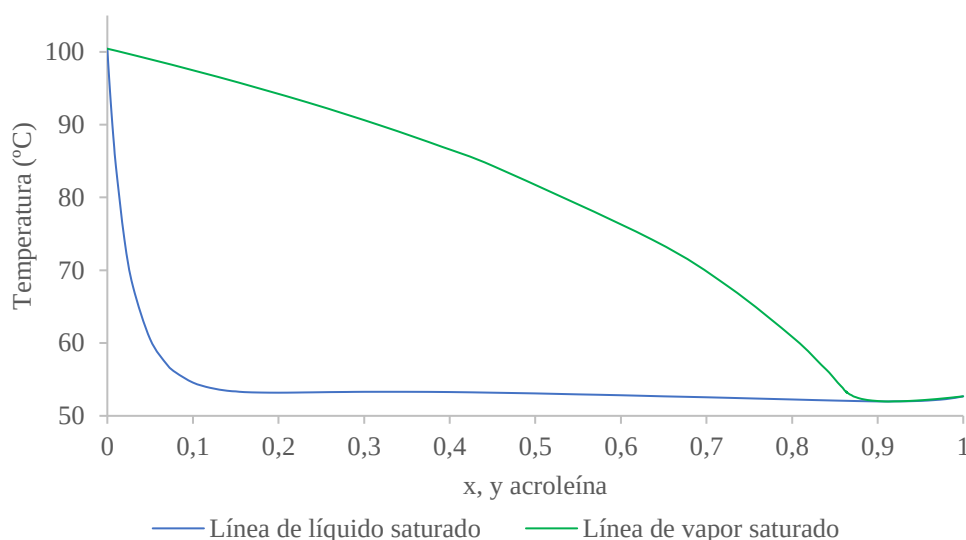


Figura 5. Diagrama T-x-y del sistema acroleína-agua. Elaboración propia.

3.4. Método aproximado de diseño: Método McCabe-Thiele

Las columnas de destilación pueden diseñarse de forma aproximada empleando diferentes métodos de acuerdo a si operan con sistemas binarios o multicomponentes. Debido a que, como para la columna de destilación T-304 del presente proyecto se asume un sistema binario acroleína-agua para su diseño, se procede a explicar un método gráfico ampliamente utilizado para sistemas binarios: método McCabe-Thiele.

Para plantear el método desarrollado por McCabe y Thiele, se hace uso de una suposición propuesta por primera vez por el método Lewis-Sorel, que se basa en considerar constantes los caudales molares de líquido y vapor en las secciones de enriquecimiento y agotamiento de la columna de destilación. De esta manera, se simplifica la resolución de los balances por etapas, debido a que no resulta necesario considerar los balances de energía. Esta simplificación se conoce como *Constant Molal Overflow*, CMO (3).

Esta suposición será verdadera cuando los calores latentes de vaporización por mol, λ , de los componentes permanezcan constantes, y los calores específicos se mantengan prácticamente invariables en el rango de temperatura de operación de la columna. Es decir, se cumple cuando la columna sea adiabática, en la cual se necesita la misma energía para condensar o vaporizar un mol de la mezcla tratada, y no existen calores considerables de mezcla ni pérdidas de calor significativas (1).

Cuando se opera con sistemas cuyo comportamiento es cercano al ideal, estas condiciones resultan acertadas. No obstante, aun cuando este no sea el caso, y exista diferencias en los calores latentes molares de vaporización, el error asumido por considerar CMO para obtener un diseño preliminar y aproximado de la columna es aceptable (3).

Siguiendo esta línea, asumiendo la suposición de CMO como válida, es posible emplear las expresiones de las Ecuaciones [47] y [48] para graficar las rectas de operación de la sección de enriquecimiento y de agotamiento, respectivamente.

$$y_{n+1} = \frac{L}{V} \cdot x_n + \left(1 - \frac{L}{V}\right) \cdot x_D \quad [47]$$

$$y_n = \frac{\bar{L}}{\bar{V}} \cdot x_{n-1} - \left(\frac{\bar{L}}{\bar{V}} - 1 \right) \cdot x_B \quad [48]$$

Donde:

- L y V hacen referencia a los caudales molares de líquido y vapor, respectivamente, en la sección de enriquecimiento de la columna de destilación.
- $\bar{L}$ y $\bar{V}$ hacen referencia a los caudales molares de líquido y vapor, respectivamente, en la sección de agotamiento de la columna de destilación.
- n hace referencia a las etapas de la columna de destilación.

También, será necesario graficar una tercera recta, haciendo uso de la expresión de la Ecuación [49], la cual corresponde a la ecuación de la recta de la alimentación a la columna. Para ello, se introducirá el concepto de calidad de la alimentación, *feed quality* q , que corresponde a la fracción molar de la alimentación que es líquida. El valor que toma q será de 1 o 0 si la alimentación corresponde a un líquido o vapor saturado, respectivamente, estará entre 1 y 0 si es una mezcla de líquido y vapor, será menor que 0 si se trata de un vapor sobrecalentado o mayor que 1 si se trata de un líquido subenfriado (2).

$$y = \frac{q}{q-1} \cdot x + \left(\frac{1}{1-q} \right) \cdot z \quad [49]$$

Sabiendo esto, el procedimiento que se debe seguir para elaborar el diagrama McCabe-Thiele se explica a continuación (3):

1. Graficar la curva de equilibrio líquido-vapor, a la presión de operación de la columna.
2. Realizar balances de materia para determinar las fracciones molares en las corrientes de cabezas y de colas, x_D y x_B .
3. Marcar los puntos x_D y x_B en la línea auxiliar diagonal $x = y$. Por esos puntos pasan las líneas de operación de la sección de enriquecimiento y de agotamiento, respectivamente.
4. Graficar la línea de la alimentación. Esta línea pasará por el punto de intersección de las líneas de operación de la sección de enriquecimiento y de agotamiento.
5. Determinar la relación de reflujo mínimo.
6. Graficar las líneas de operación de la sección de enriquecimiento y agotamiento.
7. Determinar el número de etapas teóricas. Comenzando de x_D y x_B se dibujan las etapas teóricas en forma de escalera, entre las líneas de operación y la curva de equilibrio, tal como se ilustra en la Figura 6.

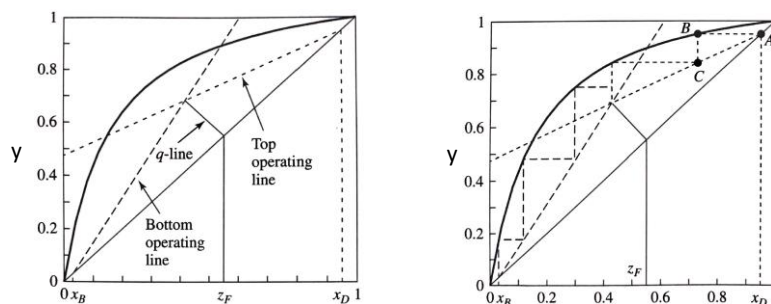


Figura 6. Ilustración de las líneas graficadas y determinación de número de etapas teóricas (2).

8. Determinar la etapa a la cual debe ser introducida la alimentación en la columna. Esta será la más próxima a la intersección de las líneas de operación.

Con respecto al punto 5, la relación de reflujo mínima se determina localizando el punto *pinch*, Figura 7, que corresponde al punto en el cual la línea de operación es tangente a la curva de equilibrio. Con esta relación de reflujo, harían falta infinitas etapas de equilibrio para alcanzar la separación deseada. El punto *pinch* puede coincidir o no en la recta de la alimentación a la columna (1).

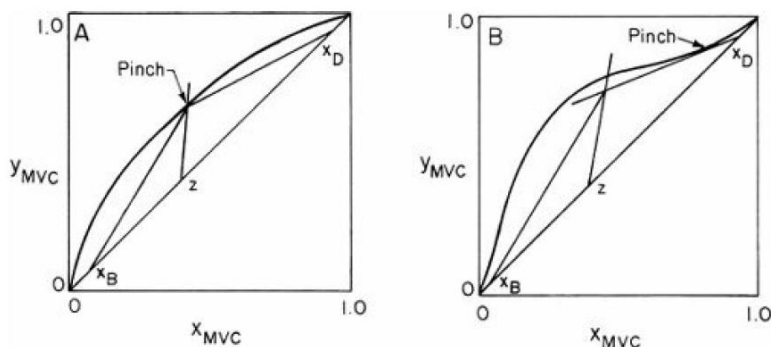


Figura 7. Obtención del punto *pinch* para determinar la relación de reflujo mínima (1).

Por otro lado, existe otra condición limitante, que corresponde a la condición de reflujo total, para la cual todo el condensado sería devuelto a la columna como reflujo. En este caso, las líneas de operación coinciden con la línea auxiliar diagonal $x = y$, y las etapas teóricas determinadas corresponden con las mínimas necesarias para alcanzar la separación deseada (1).

3.4.1. Resultados obtenidos del método aproximado de diseño

Una vez explicadas las condiciones que se deben asumir y siguiendo el procedimiento anteriormente expuesto, a continuación, se procede a resumir los resultados obtenidos al aplicar el método de McCabe-Thiele.

Para la columna de destilación T-304 del presente proyecto, ya se conoce las condiciones de entrada de la alimentación. Retomando lo comentado en apartados anteriores, la alimentación entra como líquido saturado, a su temperatura de burbuja, que a presión atmosférica corresponde a 53,30 °C. Por lo tanto, se conoce el valor de la calidad, $q = 1$. A este punto, se puede determinar la relación de reflujo mínima, R_{min} . Para ello, se localiza el punto *pinch* gráficamente, tal como se muestra en la Figura 8, se obtiene la pendiente de la recta, $\left(\frac{L}{V}\right)_{min}$, y aplicando la Ecuación [50] se determina R_{min} .

$$R_{min} = \left(\frac{L}{D}\right)_{min} = \frac{\left(\frac{L}{V}\right)_{min}}{1 - \left(\frac{L}{V}\right)_{min}} \quad [50]$$

Por otra parte, también es posible determinar las etapas teóricas mínimas, N_{min} , necesarias para llevar a cabo la separación deseada del sistema acroleína-agua, para ello se realiza el diagrama ilustrado en la Figura 9. Los resultados se resumen en la Tabla 17.

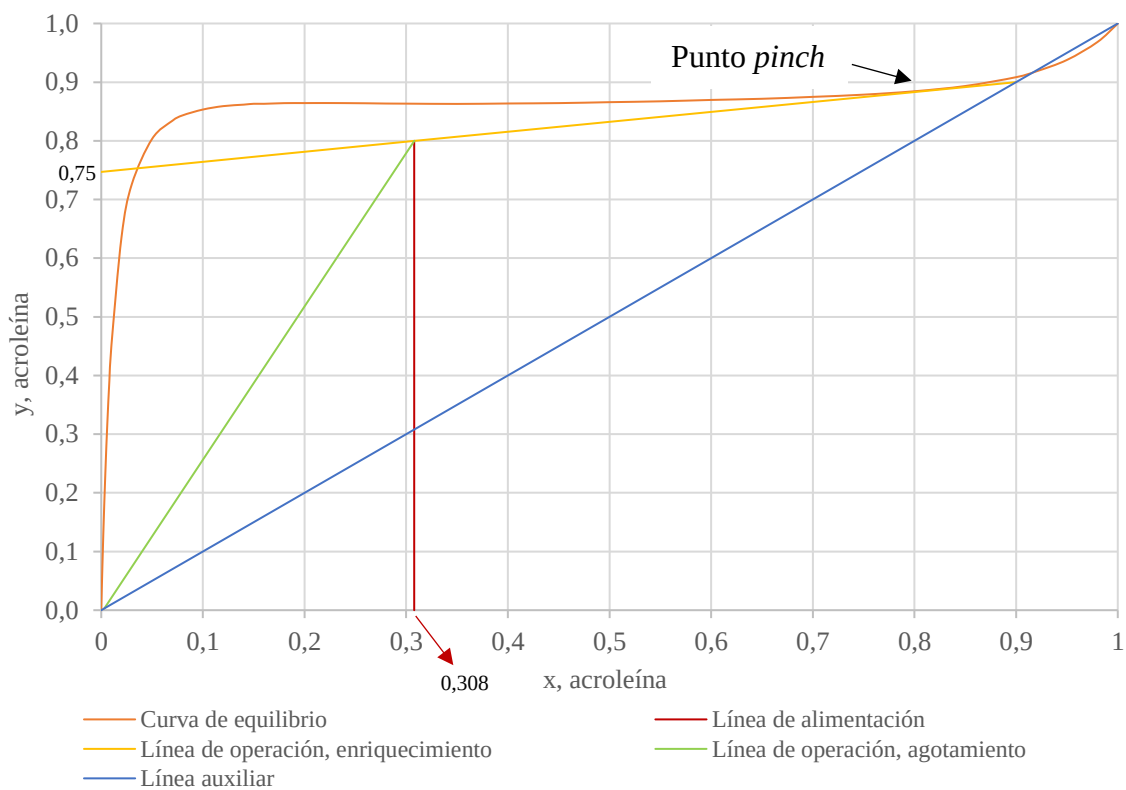


Figura 8. Diagrama McCabe-Thiele, para la condición de reflujo mínimo.

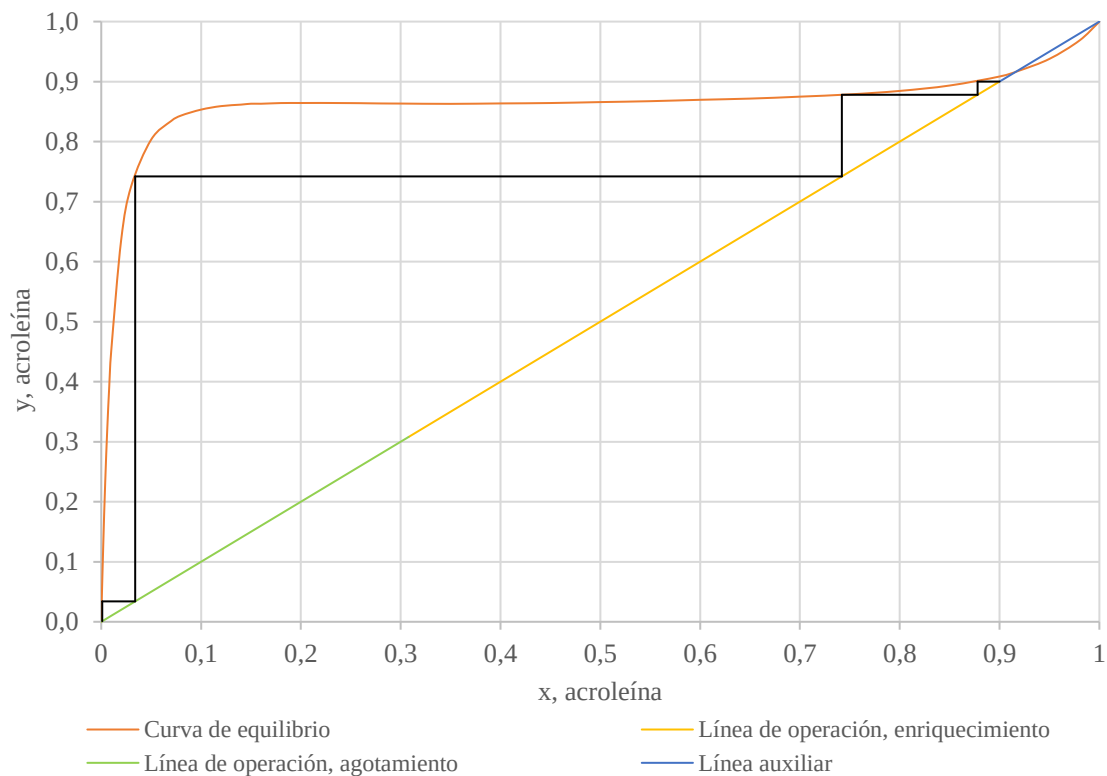


Figura 9. Diagrama McCabe-Thiele, para la condición de reflujo total.

Tabla 17. Relación de reflujo y etapas teóricas mínimas para la separación deseada.

Parámetro	Valor
$\left(\frac{L}{V}\right)_{min}$	0,170
R_{min}	0,205
N_{min}	4

Siguiendo lo establecido en la bibliografía para obtener la relación de reflujo óptima, se multiplica la relación de reflujo mínima por 1,05 – 1,50 (3). No obstante, como se había comentado anteriormente, en el apartado 2.5. *Requerimientos de reflujo*, se establece como relación de reflujo óptima el valor de $R = 0,62$.

En el apartado 3.1. *Balance de materia* se realizó un balance al condensador, utilizando la relación de reflujo óptima. Por lo tanto, al asumir CMO, también son conocidos los valores de L y V . Aplicando la Ecuación [51], se puede conocer el valor de $\bar{L}$, y realizando un balance de materia en la caldera parcial E-305, Ecuación [52], se consigue el valor de $\bar{V}$. Cabe destacar que debido a que la alimentación es un líquido saturado, el caudal molar de vapor, asumiendo CMO, no variará, es decir $V = \bar{V}$.

$$\bar{L} = L + q \cdot F \quad [51]$$

$$\bar{V} = \bar{L} - B \quad [52]$$

Además, las composiciones molares de las corrientes de destilado y de colas ya son conocidas. Por lo tanto, teniendo todos los valores de los caudales de líquido y vapor en la columna, resumidos en la Tabla 18 resulta posible conocer las pendientes y las ordenadas en el origen de las líneas de operación.

Sección de enriquecimiento

$$y_{n+1} = 0,38 \cdot x_n + 0,56$$

Sección de agotamiento

$$y_n = 2,20 \cdot x_{n-1} - 0,004$$

Y, debido a que la alimentación es un líquido saturado, la línea de la alimentación corresponderá a una recta vertical, graficada en $x = 0,308$.

Tabla 18. Resultados del balance de materia en la columna de destilación T-304, asumiendo CMO.

Parámetro	Valor
q	1
L (kmol/h)	16,47
V (kmol/h)	42,97
$\bar{L}$ (kmol/h)	94,44
$\bar{V}$ (kmol/h)	42,97

Graficando las tres rectas, y dibujando las etapas teóricas en forma de escalera, se obtiene el diagrama McCabe-Thiele de la Figura 10.

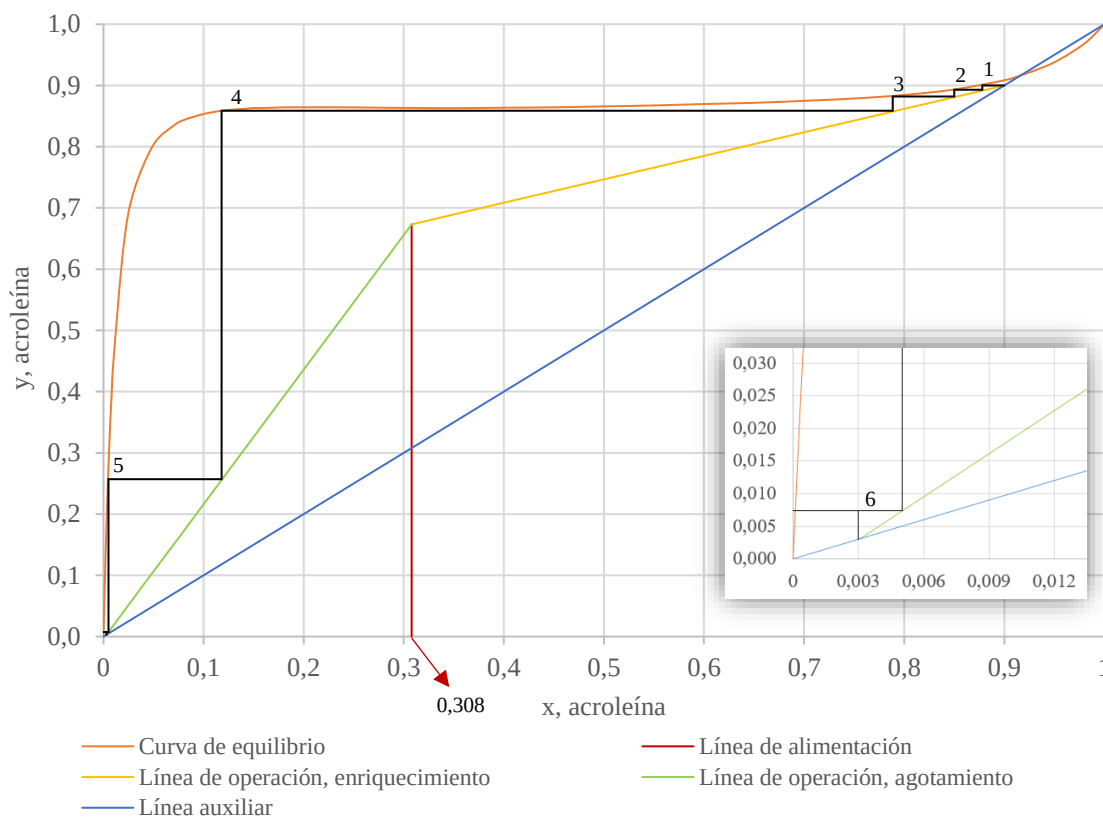


Figura 10. Diagrama McCabe-Thiele, utilizando una relación de reflujo de 0,62.

Se obtiene entonces que, para llevar a cabo la separación del sistema acroleína-agua son necesarias 6 etapas teóricas. Debido a que se cuenta con una caldera parcial, esta contará como una etapa de equilibrio. Por lo tanto, serán necesarias 5 etapas de equilibrio dentro de la columna, más la caldera. La alimentación a la columna se debe realizar en el plato número 4.

Es importante aclarar que los resultados obtenidos por este método de diseño aproximado sirven para una estimación del número de etapas de equilibrio necesarias, sin embargo, el número definitivo se obtendrá con el método riguroso de diseño, presentado en el apartado a continuación.

3.5. Método riguroso de diseño: Ecuaciones MESH

Se ha desarrollado una serie de modelos sofisticados para la simulación rigurosa de columnas de destilación, muchos de ellos basados en las etapas de equilibrio del sistema estudiado. Como resultado de estos métodos rigurosos de diseño, se obtienen los perfiles de composición, de temperatura, y de caudales, tanto de líquido como de vapor, a lo largo de las etapas de equilibrio. El concepto de etapas de equilibrio conduce al desarrollo de las conocidas ecuaciones MESH (11).

El término MESH proviene de las siglas de *Material balance, Equilibrium, Summation and Heat (energy) balance, equations*. Estas ecuaciones se resuelven desde cabezas de la columna hasta la alimentación y desde colas hasta la alimentación. Mientras más componentes tenga la mezcla a separar, más complicado resulta el sistema de ecuaciones a resolver. Debido a que el sistema a separar en la columna de destilación T-304 del presente proyecto es binario, resulta factible resolver estas ecuaciones desde cabezas hasta colas de la columna.

A continuación, se muestran las ecuaciones MESH para la etapa n de una columna de destilación. En la Figura 11 se representan los caudales de entrada y de salida de dicha etapa.

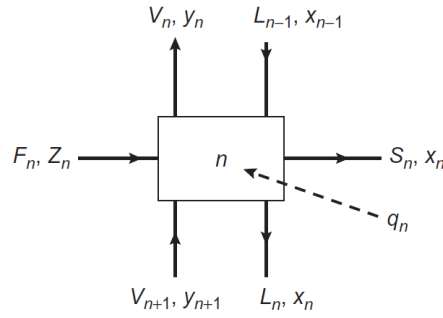


Figura 11. Representación de entradas y salidas de una etapa de equilibrio en una columna de destilación (3).

Ecuaciones del balance de materia:

$$V_{n+1} \cdot y_{n+1} + L_{n-1} \cdot x_{n-1} + F_n \cdot z_n = V_n \cdot y_n + L_n \cdot x_n + S_n \cdot x_n \quad [53]$$

Ecuaciones de equilibrio, expuesta anteriormente:

$$P \cdot y_i = P_i^o \cdot \gamma_i \cdot x_i \quad [16]$$

Ecuaciones de sumatoria de fracciones molares, expuestas anteriormente:

$$\sum x_i = 1 \quad [45]$$

$$\sum y_i = 1 \quad [46]$$

Ecuaciones del balance de energía:

$$V_{n+1} \cdot H_{n+1} + L_{n-1} \cdot h_{n-1} + F_n \cdot h_f + q_n = V_n \cdot H_n + L_n \cdot h_n + S_n \cdot h_n \quad [54]$$

Donde:

- V_{n+1} y L_{n-1} son los caudales de vapor y líquido que entran a la etapa n , en kmol/h.
- V_n y L_n son los caudales de vapor y líquido que salen de la etapa n , en kmol/h.
- F_n hace referencia al caudal de alimentación de la etapa n , en kmol/h.
- S_n hace referencia a la salida lateral de la etapa n , en kmol/h.
- y_i y x_i corresponden a la fracción molar del componente i en las corrientes de vapor y líquidas, respectivamente.
- z es la fracción molar del componente i en la corriente de alimentación.
- H y h corresponden a las entalpías específicas de las corrientes de vapor y líquidas, respectivamente, en kJ/kmol.
- h_f es la entalpía específica de la corriente de alimentación, en kJ/kmol.
- q_n hace referencia a cualquier flujo de energía aportado o retirado de la etapa n , en kJ/h.

3.5.1. Cálculo de entalpías específicas

Resulta necesario determinar las entalpías específicas de corrientes líquidas y de vapor, para poder aplicar las ecuaciones relativas a balances de energía. Para ello, será necesario contar con el calor específico a presión constante C_p de cada componente del sistema binario con el que se opera. Cabe resaltar que los valores de C_p varían con la temperatura, debido a esto, se contará con el simulador de procesos *Aspen Hysys* para la obtención de los valores de C_p a las temperaturas determinadas.

Para el cálculo de la entalpía específica de una corriente líquida compuesta únicamente por una sustancia se emplea la Ecuación [55].

$$h_i = C_{p,i} \cdot (T - T_{ref}) \quad [55]$$

Anteriormente se comentó que el sistema acroleína-agua presenta una desviación de la idealidad en la fase líquida. Por esta razón, al determinar la entalpía para las corrientes líquidas se tomará en cuenta la entalpía en exceso, calculada según la Ecuación [56] (2).

$$h^E = R \cdot T \cdot x \cdot \ln \gamma_l + R \cdot T \cdot (1 - x) \cdot \ln \gamma_h \quad [56]$$

Siguiendo esta línea, la entalpía específica de una corriente líquida compuesta por más de una sustancia se podrá determinar empleando la Ecuación [57].

$$h = \left(\sum h_i \cdot x_i \right) + h^E \quad [57]$$

Donde:

- h_i es la entalpía específica de la corriente líquida de componente puro i , en kJ/kmol.
- $C_{p,i}$ es el calor específico a presión constante del componente i , en kJ/(kmol·°C)
- T corresponde a la temperatura de burbuja de la mezcla.
- T_{ref} es la temperatura de referencia, tomada como 0 °C.
- h^E hace referencia a la entalpía en exceso, en kJ/kmol.
- R es la constante de gases ideales, en kJ/(kmol·K).
- x corresponde a la fracción molar del componente más volátil.
- γ_l y γ_h hacen referencia a los coeficientes de actividad de los compuestos más y menos volátiles, respectivamente.
- h corresponde a la entalpía específica de una corriente líquida, en kJ/kmol.
- x_i es la fracción molar, en fase líquida, del componente i .

Por otra parte, para determinar la entalpía específica de una corriente en fase vapor compuesta únicamente por una sustancia, se hace uso de la Ecuación [58]. Y, la entalpía específica de una corriente en fase vapor compuesta por más de una sustancia se calcula utilizando la Ecuación [59].

$$H_i = h_i + \lambda_i \quad [58]$$

$$H = \sum H_i \cdot y_i \quad [59]$$

Siendo:

- λ_i el calor latente de vaporización del componente puro i , en kJ/kmol.
- H_i la entalpía específica de una corriente en fase vapor de componente puro i , en kJ/kmol.
- H la entalpía específica de una corriente en fase vapor, en kJ/kmol.

Los calores latentes de vaporización de los componentes puros de la mezcla binaria con la que se trabaja, acroleína y agua, se han tomado del simulador de procesos *Aspen Hysys*, y se resumen en la Tabla 19, mostrada a continuación.

Tabla 19. Calores latentes de vaporización. Elaboración propia, con datos tomados de Aspen Hysys.

Compuesto	λ_i (kJ/kmol)
Acroleína	28.341,36
Agua	40.650,57

3.5.2. Cálculos por etapas de equilibrio

Considerando lo expuesto en el apartado 2. *Especificaciones iniciales* y con los cálculos realizados en el apartado 3.1. *Balance de materia*, ya se conocen las composiciones de las corrientes de entrada y salida de la columna de destilación T-304. Para empezar a realizar los cálculos etapa por etapa, se debe conocer la temperatura de la corriente que sale por cabezas de la columna, es decir, de la corriente de destilado. Es necesario conocerla debido a que la corriente de reflujo que ingresa a la columna tendrá la misma composición y estará a las mismas condiciones que el destilado. Dado que es una corriente líquida en saturación, se aplicará el algoritmo de la Figura 1 para calcular su temperatura de burbuja. El resultado se muestra en la Tabla 20.

Tabla 20. Temperatura de burbuja de las corrientes de destilado y reflujo.

$T_{burbuja} (^{\circ}\text{C}) = 51,99$				
	$x_{D,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$y_{D,i}$
Acroleína	0,900	0,990	1,035	0,909
Agua	0,100	0,138	6,692	0,091
$\sum y_{D,i} =$				1,000

De manera similar, será posible calcular la temperatura de la corriente de alimentación a la columna y de la corriente de salida por colas de la columna. De nuevo, como se tratan de corrientes líquidas en condiciones de saturación, se aplicará el mismo algoritmo de la Figura 1. En la Tabla 21 y en la Tabla 22 se muestran los resultados de las temperaturas de burbuja de la corriente de alimentación y de la corriente de colas, respectivamente.

Tabla 21. Temperatura de burbuja de la corriente de alimentación.

$T_{burbuja} (^{\circ}\text{C}) = 53,30$				
	$z_{F,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$y_{F,i}$
Acroleína	0,308	1,035	2,745	0,863
Agua	0,692	0,147	1,361	0,137
$\sum y_{f,i} =$				1,000

Tabla 22. Temperatura de burbuja de la corriente de colas.

$T_{burbuja} (^{\circ}\text{C}) = 94,75$				
	$x_{B,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$y_{B,i}$
Acroleína	0,003	3,641	16,993	0,185
Agua	0,997	0,828	1,000	0,815
$\sum y_{B,i} =$				1,000

Ahora, es posible empezar los cálculos por etapas. Cabe destacar que debido a que el condensador es total y no parcial, no se considera una etapa de equilibrio, siendo la composición de la corriente de vapor a su entrada la misma que la de la corriente líquida a su salida, es decir $y_1 = x_D = x_o$.

Por consiguiente, la primera etapa de equilibrio corresponde al primer plato dentro de la columna de destilación, y se puede observar en la Figura 12.

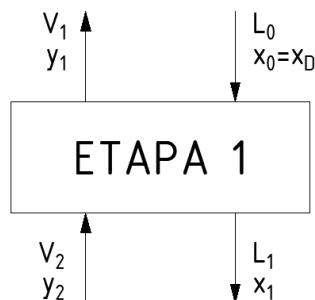


Figura 12. Primera etapa de equilibrio.

Se ha fijado la composición del destilado y fueron calculados los caudales L_0 y V_1 , con lo cual, estos caudales y sus composiciones son conocidos. En la Tabla 23 se resumen estos caudales, junto al de la alimentación, que también se ha especificado anteriormente, en el apartado 2.1. *Corriente de alimentación*. Asimismo, se conoce la temperatura de la corriente de reflujo, que ha sido calculada como se muestra en la Tabla 20, con lo cual ya es posible estimar la entalpía de la corriente, como se ha explicado en 3.5.1. *Cálculo de entalpías específicas*. Tal como se comentó anteriormente, los valores de los calores específicos a presión constante de los compuestos puros varían con la temperatura y serán tomados de *Aspen Hysys*.

Tabla 23. Resumen de caudales y composiciones conocidos previamente.

	L_0	V_1	F
Caudales (kmol/h)	16,47	42,97	77,97
Acroleína, x y	0,900	0,900	0,308
Agua, x y	0,100	0,100	0,692

Por otro lado, se llevará a cabo un cálculo de la temperatura de rocío, siguiendo el algoritmo especificado en la Figura 2, para estimar la temperatura de V_1 , que corresponderá a la temperatura de la primera etapa de equilibrio, y por consiguiente la temperatura de L_1 también. Asimismo, con este cálculo se obtendrá la composición del líquido en equilibrio, es decir la composición de L_1 . El resultado obtenido se muestra en la Tabla 24. De igual manera, al tener la temperatura de V_1 se hace posible calcular su entalpía.

Tabla 24. Temperatura de rocío de la etapa 1.

$T_{\text{rocío}} (^{\circ}\text{C}) = 52,03$				
	$y_{1,i}$	$P_i^{\circ} \text{ (bar)}$	γ_i	$x_{1,i}$
Acroleína	0,900	0,990	1,052	0,875
Agua	0,100	0,138	5,858	0,125
	$\sum x_{1,i} =$			1,000

Al conocer la composición de L_1 , se asume que la suposición de *Constant Molal Overflow* (CMO) es válida, y se procede a estimar la composición de V_2 haciendo uso de la Ecuación [60]. Una vez calculada, se procede a estimar la temperatura de rocío de V_2 , utilizando el algoritmo de la Figura 2. El resultado obtenido se muestra en la Tabla 25. Teniendo las composiciones de L_1 y V_2 y sus temperaturas, es posible calcular la entalpía de cada una de estas corrientes. En la Tabla 26 se resumen los valores de las entalpías específicas de las corrientes de entrada y salida de la etapa 1.

$$y_2 = \left(\frac{L_0}{V_1}\right) \cdot (x_1 - x_0) + y_1 \quad [60]$$

Tabla 25. Temperatura de rocío de la etapa 2. Suposición de CMO para el cálculo de $y_{2,i}$.

$T_{\text{rocío}} (^{\circ}\text{C}) = 52,14$				
	$y_{2,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{2,i}$
Acroleína	0,890	0,994	1,086	0,836
Agua	0,110	0,139	4,862	0,164
$\sum x_{2,i} =$				1,000

Tabla 26. Resumen de entalpías específicas. Todos los valores de entalpías se expresan en kJ/kmol.

Temperatura $L_0 = 51,99 ^{\circ}\text{C}$				Temperatura $L_1 = 52,03 ^{\circ}\text{C}$		
	$x_{0,i}$	h_i	$h_i \cdot x_i$	$x_{1,i}$	h_i	$h_i \cdot x_i$
Acroleína	0,900	6.106,15	5.495,77	0,875	6.111,81	5.348,52
Agua	0,100	3.950,21	394,87	0,125	3.953,60	493,76
		$h^E =$	596,22			$h^E =$ 716,91
		$h_0 =$	6.486,86			$h_1 =$ 6.559,19

Temperatura $V_1 = 52,03 ^{\circ}\text{C}$				Temperatura $V_2 = 52,14 ^{\circ}\text{C}$		
	$y_{1,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$	$y_{2,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,900	34.453,18	31.009,16	0,890	34.466,63	30.691,98
Agua	0,100	44.604,16	4.458,73	0,110	44.612,20	4.885,76
		$H_1 =$	35.467,89			$H_2 =$ 35.577,74

Con lo cual, solo quedan dos incógnitas: L_1 y V_2 . Aplicando balances de materia y energía a la etapa, haciendo uso de las Ecuaciones [61] y [62], se pueden calcular dichos caudales. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 27.

$$L_0 \cdot x_0 + V_2 \cdot y_2 = V_1 \cdot y_1 + L_1 \cdot x_1 \quad [61]$$

$$L_0 \cdot h_0 + V_2 \cdot H_2 = V_1 \cdot H_1 + L_1 \cdot h_1 \quad [62]$$

Tabla 27. Resultados obtenidos.

	L_1	V_2
Caudales (kmol/h)	16,35	42,85

Obtenidos los caudales L_1 y V_2 , se puede observar claramente que la suposición CMO no es aplicable, puesto que los caudales molares de líquido y vapor no se han mantenido constantes. Por lo tanto, se procederá a volver a calcular la composición de V_2 , abandonando la suposición de CMO, despejando directamente y_2 de la Ecuación [61]. Obtenido su valor, se vuelve a calcular la temperatura de rocío de V_2 , empleando el algoritmo de la Figura 2, y su entalpía. Se vuelven a calcular L_1 y V_2 , aplicando las Ecuaciones [61] y [62], y se repiten los cálculos hasta la convergencia. Se considerará que se ha alcanzado la convergencia en el plato cuando al calcular

la composición y_2 se obtenga el mismo resultado. En la Tabla 28 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 28. Resultados obtenidos al iterar.

ITERACIÓN 1						
$T_{rocío} (°C) = 52,14$						
	$y_{2,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{2,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,891	0,994	1,085	0,836	34.466,55	30.693,41
Agua	0,109	0,139	4,867	0,164	44.612,15	4.883,80
$\sum x_{2,i} =$				1,000	$H_2 =$	35.577,21
			L_1		V_2	
Caudales (kmol/h)			16,35		42,85	

ITERACIÓN 2						
$T_{rocío} (°C) = 52,14$						
	$y_{2,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{2,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,891	0,994	1,085	0,836	34.466,55	30.693,40
Agua	0,109	0,139	4,867	0,164	44.612,15	4.883,82
$\sum x_{2,i} =$				1,000	$H_2 =$	35.577,22
			L_1		V_2	
Caudales (kmol/h)			16,35		42,85	

Vemos que al obtener el mismo resultado de $y_{2,i}$, ya todos los valores de los otros parámetros son iguales, por lo tanto, se finaliza la iteración. Si bien los decimales de los valores de entalpía varían levemente, esto se debe a cambios después del tercer decimal del valor de $y_{2,i}$, respecto al primer valor obtenido. No obstante, estas diferencias no serán significativas. Se procede entonces a la etapa 2, cuyas entradas y salidas se muestran en la Figura 13.

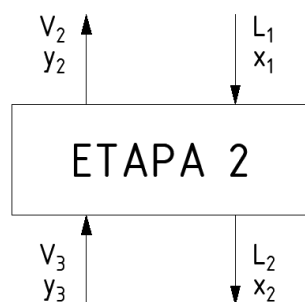


Figura 13. Segunda etapa de equilibrio.

Las corrientes L_1 y V_2 ya están totalmente definidas, pues ya se conocen sus caudales, composiciones y entalpías. Al estimar la composición de la corriente V_2 , se ha conocido también la composición de L_2 , pues se encuentran en equilibrio. Por lo tanto, las incógnitas son: L_2 , V_3 e y_3 . Se empezará asumiendo CMO para estimar la composición de V_3 , aplicando la Ecuación [63]. Una vez calculada, se estima la temperatura de rocío, empleando el algoritmo de la Figura 2, con la cual se obtiene también las composiciones en fase líquida que están en equilibrio, es decir, x_3 . Los resultados se muestran en la Tabla 29.

$$y_3 = \left(\frac{L_1}{V_2}\right) \cdot (x_2 - x_1) + y_2 \quad [63]$$

Tabla 29. Temperatura de rocío de la etapa 3. Suposición de CMO para el cálculo de $y_{3,i}$.

$T_{\text{rocío}} (^{\circ}\text{C}) = 52,52$				
	$y_{3,i}$	P_i° (bar)	γ_i	$x_{3,i}$
Acroleína	0,876	1,007	1,239	0,711
Agua	0,124	0,142	3,075	0,289
$\sum x_{3,i} =$				1,000

Teniendo sus temperaturas, es posible entonces, estimar las entalpías específicas de las corrientes L_2 y V_3 . Los resultados se resumen en la Tabla 30.

Tabla 30. Resumen de entalpías específicas. Todos los valores de entalpías se expresan en kJ/kmol.

Temperatura $L_2 = 52,14 ^{\circ}\text{C}$				Temperatura $V_3 = 52,52 ^{\circ}\text{C}$		
	$x_{2,i}$	h_i	$h_i \cdot x_i$	$y_{3,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,836	6.125,19	5.121,99	0,876	34.513,99	30.223,47
Agua	0,164	3.961,58	648,84	0,124	44.640,44	5.549,36
$h^E =$			886,00	$H_3 =$		
$h_2 =$			6.656,82	35.772,83		

Aplicando las Ecuaciones [64] y [65], es posible calcular los caudales de L_2 y V_3 . Los resultados se muestran en la Tabla 31.

$$L_1 \cdot x_1 + V_3 \cdot y_3 = L_2 \cdot x_2 + V_2 \cdot y_2 \quad [64]$$

$$L_1 \cdot h_1 + V_3 \cdot H_3 = L_2 \cdot h_2 + V_2 \cdot H_2 \quad [65]$$

Tabla 31. Resultados obtenidos.

	L_2	V_3
Caudales (kmol/h)	16,12	42,61

De nuevo, es posible apreciar que los caudales obtenidos de L_2 y V_3 no resultan iguales que L_1 y V_2 , por lo tanto, se abandonará la suposición de CMO, recalculando y_3 , despejándola de la Ecuación [64]. Teniendo el nuevo valor, se recalcula la temperatura de la corriente, su entalpía, y de nuevo con las Ecuaciones [64] y [65], se estiman los caudales L_2 y V_3 . Los resultados se muestran en la Tabla 32.

Tabla 32. Resultados obtenidos al iterar.

ITERACIÓN 1						
$T_{\text{rocío}} (^{\circ}\text{C}) = 52,52$						
	$y_{3,i}$	P_i° (bar)	γ_i	$x_{3,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,876	1,007	1,239	0,711	34.513,99	30.230,92
Agua	0,124	0,142	3,075	0,289	44.640,44	5.539,72
$\sum x_{3,i} =$				1,000	$H_3 =$	35.770,64
				L_2	V_3	
Caudales (kmol/h)				16,12	42,62	

Con una sola iteración ya se alcanza al valor obtenido anteriormente de $y_{3,i}$. Cabe destacar que, aun así, hay ligeras variaciones en el valor obtenido de la entalpía, que se deben a cambios después del tercer decimal del valor de $y_{3,i}$, respecto al primer valor obtenido. A pesar de esto, se da por finalizada la iteración. Se procede entonces a la etapa 3, cuyas entradas y salidas se pueden apreciar en la Figura 14. De estas corrientes, L_2 y V_3 están totalmente definidas, conociendo ya sus caudales, composiciones y entalpías. Asimismo, ya se conoce la composición de L_3 . Por lo tanto, las incógnitas son: L_3 , V_4 e y_4 .

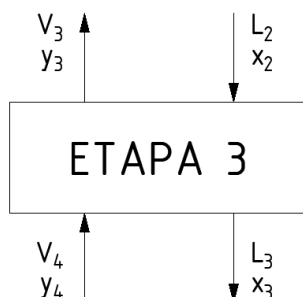


Figura 14. Tercera etapa de equilibrio.

De igual manera, se empezará asumiendo CMO, para una primera estimación de y_4 , aplicando la Ecuación [66]. Calculadas estas composiciones, tanto de acroleína como del agua, se procede a estimar la temperatura de rocío de la corriente, correspondiente a la temperatura de la cuarta etapa de equilibrio, haciendo uso del algoritmo mostrado en la Figura 2. Obteniendo así los valores de x_4 que se encuentran en equilibrio. Los resultados se muestran en la Tabla 33.

$$y_4 = \left(\frac{L_2}{V_3} \right) \cdot (x_3 - x_2) + y_3 \quad [66]$$

Tabla 33. Temperatura de rocío de la etapa 4. Suposición de CMO para el cálculo de $y_{4,i}$.

$T_{\text{rocío}} (^{\circ}\text{C}) = 57,70$				
	$y_{4,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{4,i}$
Acroleína	0,829	1,202	10,761	0,065
Agua	0,171	0,181	1,024	0,935
	$\sum x_{4,i} =$			1,000

Se procede entonces a estimar las entalpías específicas de las corrientes L_3 y V_4 . Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 34 a continuación.

Tabla 34. Resumen de entalpías específicas. Todos los valores de entalpías se expresan en kJ/kmol.

Temperatura $L_3 = 52,52 ^{\circ}\text{C}$				Temperatura $V_4 = 57,70 ^{\circ}\text{C}$		
	$x_{3,i}$	h_i	$h_i \cdot x_i$	$y_{4,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,711	6.172,63	4.389,06	0,829	35.170,77	29.141,28
Agua	0,289	3.989,88	1.152,87	0,171	45.028,98	7.719,53
		$h^E =$	1.290,88		$H_4 =$	36.860,81
		$h_3 =$	6.832,81			

Ahora bien, aplicando las Ecuaciones [67] y [68] será posible calcular los caudales molares de L_3 y V_4 . Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 35.

$$L_2 \cdot x_2 + V_4 \cdot y_4 = L_3 \cdot x_3 + V_3 \cdot y_3 \quad [67]$$

$$L_2 \cdot h_2 + V_4 \cdot H_4 = L_3 \cdot h_3 + V_3 \cdot H_3 \quad [68]$$

Tabla 35. Resultados obtenidos.

	L_3	V_4
Caudales (kmol/h)	14,67	41,17

Se observa que los valores de L_3 y V_4 resultaron diferentes a L_2 y V_3 , por lo tanto, se deben repetir los cálculos abandonando la suposición de CMO. Teniendo ya una primera estimación de estos caudales, se procede a despejar y_4 de la Ecuación [67]. Se recalcula la temperatura de rocío de la etapa 4, el valor de la entalpía de la corriente V_4 , y teniendo todos los datos, se aplican nuevamente las Ecuaciones [67] y [68], para calcular L_3 y V_4 . Se itera hasta la convergencia. Los resultados se resumen en la Tabla 36.

Tabla 36. Resultados obtenidos al iterar.

ITERACIÓN 1						
$T_{rocío} (^{\circ}C) = 57,20$						
	$y_{4,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{4,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,833	1,182	10,424	0,068	35.107,65	29.234,22
Agua	0,167	0,177	1,027	0,932	44.991,90	7.526,46
	$\sum x_{4,i} =$			1,000	$H_4 =$	36.760,68
	L_3			V_4		
Caudales (kmol/h)	14,80			41,30		

ITERACIÓN 2						
$T_{rocío} (^{\circ}C) = 57,25$						
	$y_{4,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{4,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,832	1,184	10,459	0,068	35.113,86	29.225,15
Agua	0,168	0,178	1,026	0,932	44.995,55	7.545,33
	$\sum x_{4,i} =$			1,000	$H_4 =$	36.770,48
	L_3			V_4		
Caudales (kmol/h)	14,79			41,29		

ITERACIÓN 3						
$T_{rocío} (^{\circ}C) = 57,25$						
	$y_{4,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{4,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,832	1,184	10,459	0,068	35.113,86	29.226,55
Agua	0,168	0,178	1,026	0,932	44.995,55	7.543,54
	$\sum x_{4,i} =$			1,000	$H_4 =$	36.770,09
	L_3			V_4		
Caudales (kmol/h)	14,79			41,29		

Se da por finalizada la iteración al observar que los valores de $y_{4,i}$ ya no presentan variaciones en los primeros tres decimales. La siguiente etapa corresponde a la cuarta etapa de equilibrio, cuya temperatura ya es conocida, es de 57,25 °C. Esta temperatura supera a la temperatura de la alimentación, cuyo cálculo se muestra en la Tabla 21, y toma un valor de 53,30 °C. Esto ya es una indicación de que la alimentación se deberá introducir entre las etapas 3 y 4. Por otro lado, siguiendo lo establecido en la bibliografía (3), se añadirán etapas de equilibrio en la sección de enriquecimiento hasta que se cumpla la condición expuesta en la Ecuación [69].

$$\left(\frac{x_{acroleína}}{x_{agua}} \right) \leq \left(\frac{x_{acroleína}}{x_{agua}} \right)_{alimentación} \quad [69]$$

En la Tabla 37 se puede visualizar lo explicado anteriormente. Debido a estas razones, se introducirá la alimentación a la columna entre la tercera y la cuarta etapa de equilibrio. Siguiendo esta línea, se representará la etapa de equilibrio número cuatro, como se muestra en la Figura 15.

Tabla 37. Parámetros evaluados para la introducción de la alimentación en la columna entre las etapas 3 y 4.

	Temperatura (°C)	$\left(\frac{x_{acroleína}}{x_{agua}} \right)$
Etapas 3	52,52	2,46
Alimentación	53,30	0,45
Etapas 4	57,25	0,07

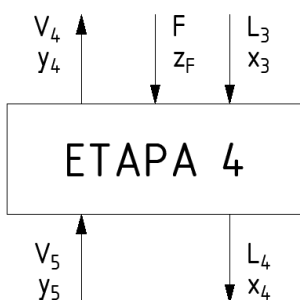


Figura 15. Cuarta etapa de equilibrio.

En esta etapa, se conocen F , L_3 y V_4 , sus caudales, composiciones y temperaturas. Se conocen también las entalpías de L_3 y V_4 , y la composición de L_4 . Por lo tanto, falta definir L_4 , V_5 e y_5 . Tal como se ha venido haciendo hasta ahora, se empezará estimando la composición de la corriente V_5 , asumiendo CMO. Para ello, se empleará la Ecuación [70].

$$y_5 = \left(\frac{L_3}{V_4} \right) \cdot (x_4 - x_3) + \left(\frac{F}{V_4} \right) \cdot (x_4 - z_{F,i}) + y_4 \quad [70]$$

Una vez calculada, se procede a estimar la temperatura de rocío de la corriente V_5 , que corresponde a la temperatura de la quinta etapa de equilibrio, empleando el algoritmo de la Figura 2. Conocida su temperatura, es posible estimar su entalpía. Por otro lado, también se puede estimar las entalpías de las corrientes F y L_4 , debido a que sus temperaturas ya son conocidas. En la Tabla 38 se muestran los resultados del cálculo de la temperatura de rocío de la corriente V_5 , y en la Tabla 39 se resumen las entalpías específicas de las corrientes mencionadas.

Tabla 38. Temperatura de rocío de la etapa 5. Suposición de CMO para el cálculo de $y_{5,i}$.

$T_{\text{rocío}} (^{\circ}\text{C}) = 95,96$				
	$y_{5,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{5,i}$
Acroleína	0,148	3,760	16,995	0,002
Agua	0,852	0,865	1,000	0,998
	$\sum x_{5,i} =$			1,000

Tabla 39. Resumen de entalpías específicas. Todos los valores de entalpías se expresan en kJ/kmol.

Temperatura $L_4 = 57,25 ^{\circ}\text{C}$				Temperatura $V_5 = 95,96 ^{\circ}\text{C}$		
	$x_{4,i}$	h_i	$h_i \cdot x_i$	$y_{5,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,068	6.772,50	461,16	0,148	40.291,07	5.960,42
Agua	0,932	4.344,99	4.049,13	0,852	47.872,46	40.789,88
		$h^E =$	505,33		$H_5 =$	46.750,30
		$h_4 =$	5.015,61			

Temperatura $F = 53,30 ^{\circ}\text{C}$			
	$z_{F,i}$	h_i	$h_i \cdot z_i$
Acroleína	0,308	6.271,22	1.930,68
Agua	0,692	4.048,59	2.802,18
		$h^E =$	1.422,32
		$h_F =$	6.155,18

Haciendo uso de las Ecuaciones [71] y [72], es posible calcular los caudales de las corrientes L_4 y V_5 . Los resultados obtenidos se recogen en la Tabla 40.

$$F \cdot z_F + L_3 \cdot x_3 + V_5 \cdot y_5 = L_4 \cdot x_4 + V_4 \cdot y_4 \quad [71]$$

$$F \cdot h_F + L_3 \cdot h_3 + V_5 \cdot H_5 = L_4 \cdot h_4 + V_4 \cdot H_4 \quad [72]$$

Tabla 40. Resultados obtenidos.

	L_4	V_5
Caudales (kmol/h)	79,43	27,97

Como la alimentación corresponde a un líquido saturado, si se cumpliera CMO la corriente L_4 tendría que ser la suma de L_3 y F . Vemos que no es así, por lo tanto, hay que recalcular los caudales abandonando la suposición de CMO. Con esta primera estimación de L_4 y V_5 , es posible despejar y_5 de la Ecuación [71]. Teniendo este nuevo resultado, se calcula la temperatura de rocío y la entalpía de la corriente V_5 . Posteriormente, se vuelven a aplicar las Ecuaciones [71] y [72] para determinar los caudales de L_4 y V_5 . Se itera hasta la convergencia. Los resultados obtenidos se resumen en la Tabla 41.

Tabla 41. Resultados obtenidos al iterar.

ITERACIÓN 1						
$T_{rocío} (^{\circ}C) = 94,70$						
	$y_{5,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{5,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,186	3,637	16,993	0,003	40.115,58	7.460,55
Agua	0,814	0,827	1,000	0,997	47.779,92	38.892,74
$\sum x_{5,i} =$				1,000	$H_5 =$	46.353,29
L_4				V_5		
Caudales (kmol/h)			79,70	28,23		

ITERACIÓN 2						
$T_{rocío} (^{\circ}C) = 94,75$						
	$y_{5,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{5,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,185	3,641	16,993	0,003	40.121,99	7.408,64
Agua	0,815	0,828	1,000	0,997	47.783,31	38.960,79
$\sum x_{5,i} =$				1,000	$H_5 =$	46.369,43
L_4				V_5		
Caudales (kmol/h)			79,70	28,23		

ITERACIÓN 3						
$T_{rocío} (^{\circ}C) = 94,75$						
	$y_{5,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{5,i}$	H_i	$H_i \cdot y_i$
Acroleína	0,185	3,641	16,993	0,003	40.121,99	7.408,62
Agua	0,815	0,828	1,000	0,997	47.783,31	38.960,81
$\sum x_{5,i} =$				1,000	$H_5 =$	46.369,43
L_4				V_5		
Caudales (kmol/h)			79,70	28,23		

Al ya no detectar variaciones en el cálculo de la composición $y_{5,i}$, se da por finalizada la iteración, y se procede a la siguiente etapa de equilibrio. Cabe destacar que la temperatura de rocío calculada para la quinta etapa de equilibrio, 94,75 °C, coincide con la temperatura de burbuja de la corriente de colas, calculada en la Tabla 22. Con lo cual, la quinta etapa de equilibrio corresponde a la última etapa, que se trata de la caldera parcial. En la Figura 16 se ilustran la entrada y salidas de esta etapa.

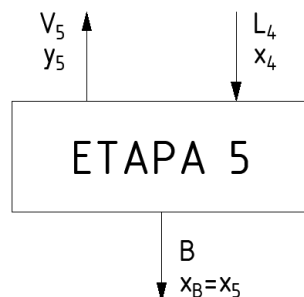


Figura 16. Quinta etapa de equilibrio.

De los caudales de esta última etapa de equilibrio, solo falta por conocer el de la corriente B . No obstante, también resulta necesario considerar el calor que será aportado a la caldera para poder vaporizar el caudal de *boil-up* que se reintroduce en la columna. Por lo tanto, los balances de materia y energía a aplicar en esta quinta etapa de equilibrio se expresan en las Ecuaciones [73] y [74]. Para emplear esta última, primero será necesario estimar la entalpía específica de la corriente B , puesto que ya h_4 y H_5 son conocidas. En la Tabla 42 y en la Tabla 43 se resumen los resultados obtenidos.

$$L_4 = V_5 + B \quad [73]$$

$$L_4 \cdot h_4 + Q_R = V_5 \cdot H_5 + B \cdot h_B \quad [74]$$

Tabla 42. Resumen de la entalpía específica de la corriente B . Todos los valores de entalpías se expresan en kJ/kmol.

Temperatura $B = 94,75\text{ °C}$			
	$x_{B,i}$	h_i	$h_i \cdot x_i$
Acroleína	0,003	11.780,62	35,62
Agua	0,997	7.132,74	7.111,17
		$h^E =$	26,35
		$h_B =$	7.173,14

Tabla 43. Resultados obtenidos.

B (kmol/h)	Q_R (kW)
51,47	362,91

3.5.3. Resumen de los resultados del método riguroso de diseño

En la Tabla 44, mostrada a continuación, se sintetizarán los resultados obtenidos explicados con detalle anteriormente, y en la Figura 17 y Figura 18 se ilustran los perfiles de temperatura y composición en la columna de destilación, respectivamente.

Tabla 44. Resumen de los resultados del método riguroso de diseño: Ecuaciones MESH.

Etapa de equilibrio	Temperatura (°C)	$x_{acroleína}$	x_{agua}	$y_{acroleína}$	y_{agua}	L (kmol/h)	V (kmol/h)
1	52,03	0,875	0,125	0,900	0,100	16,35	42,97
2	52,14	0,836	0,164	0,891	0,109	16,12	42,85
3	52,52	0,711	0,289	0,876	0,124	14,79	42,62
4	57,25	0,068	0,932	0,832	0,168	79,70	41,29
5	94,75	0,003	0,997	0,185	0,815	51,47	28,23

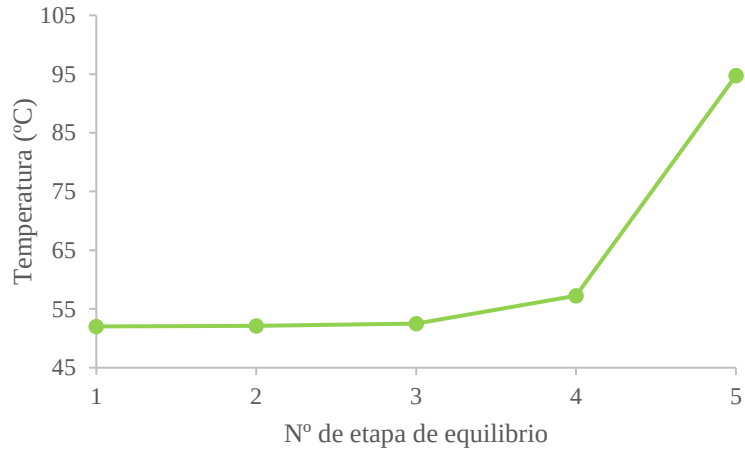


Figura 17. Perfil de temperaturas en la columna de destilación T-304.

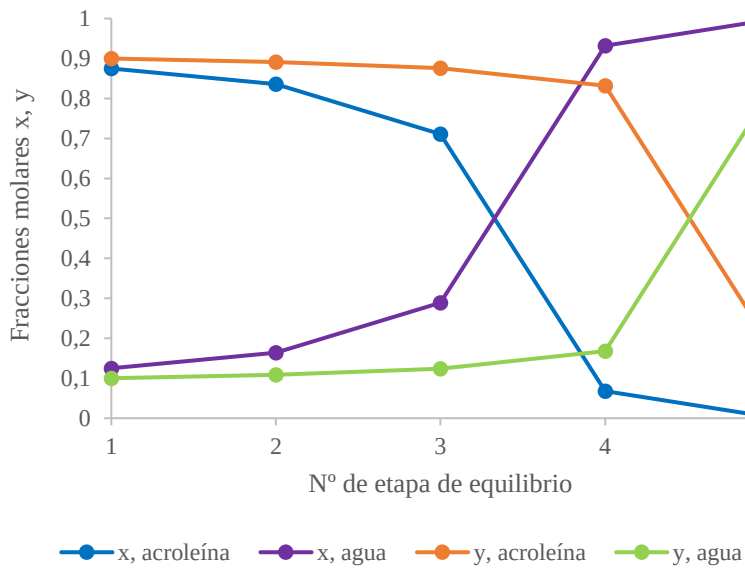


Figura 18. Perfil de composiciones en la columna de destilación T-304.

A modo de comparación, en la Figura 19 se muestra el perfil de composiciones obtenidos al realizar la simulación de la operación de la columna de destilación T-304 en el simulador de procesos Aspen Hysys.

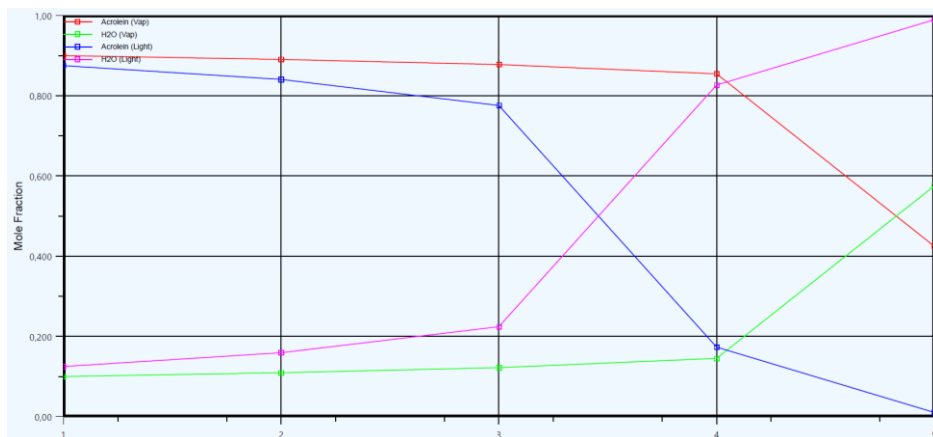


Figura 19. Perfil de composiciones obtenido mediante simulación en Aspen Hysys.

Se puede observar la gran similitud de los perfiles de composiciones que han sido obtenidos al aplicar el método riguroso de diseño con los resultantes de la simulación de *Aspen Hysys*, lo que indica que se han conseguido resultados satisfactorios al aplicar las ecuaciones MESH.

Por último, se hará un balance de materia en la etapa número cuatro, en la que entra la alimentación a la columna, para corroborar el cierre del balance. Para ello, se emplea la Ecuación [71] (mencionada anteriormente, del balance de materia por componente), y un balance global, Ecuación [75].

$$F \cdot z_F + L_3 \cdot x_3 + V_5 \cdot y_5 = L_4 \cdot x_4 + V_4 \cdot y_4 \quad [71]$$

$$F + L_3 + V_5 = L_4 + V_4 \quad [75]$$

Tabla 45. Caudales de entrada y salida de la etapa de alimentación.

	Entradas (kmol/h)			Salidas (kmol/h)	
	F	L_3	V_5	L_4	V_4
Acroleína	24,00	10,52	5,22	5,39	34,35
Agua	53,97	4,27	23,01	74,31	6,94
Total	77,97	14,79	28,23	79,70	41,29

Tabla 46. Cierre del balance de materia en la etapa de alimentación.

	Entradas (kmol/h)	Salidas (kmol/h)	Cierre
Acroleína	39,74	39,74	0,00
Agua	81,25	81,25	0,00
Total	120,99	120,99	0,00

3.6. Resumen de la determinación del número de etapas de equilibrio

A modo de conclusión, se puede decir que los resultados obtenidos por el método aproximado de diseño, el método gráfico McCabe-Thiele, que fueron: 6 etapas de equilibrio, con la alimentación en la cuarta etapa, resultaron bastante realistas con lo obtenido posteriormente en el método riguroso de diseño: 5 etapas de equilibrio, con la alimentación entre las etapas 3 y 4.

4. Diseño hidráulico de la columna de destilación T-304

En este apartado se llevará a cabo el diseño hidráulico de la columna de destilación, lo que conlleva la determinación del diámetro de la columna, y el diseño de su interior. Los platos utilizados como dispositivos de contacto entre las fases deben conseguir una suficiente retención de líquido para lograr la transferencia de materia y, además, debe haber suficiente área y espaciado para que el líquido fluya entre los platos (3).

Una operación satisfactoria se consigue en un rango de caudales limitado. Como se observa en la Figura 20, el límite superior del caudal de vapor lo fija la condición de inundación, y el límite inferior la condición de goteo. Si ocurre inundación en la columna, la eficiencia del plato disminuiría considerablemente, aumentaría la caída de presión, y el arrastre de líquido por el flujo de vapor sería excesivo. Mientras que, en caso de goteo, el caudal de vapor resultaría insuficiente para mantener el líquido en el plato. El efecto *coning* ocurre cuando hay poco contacto entre las fases, y el vapor hace que el líquido fluya en dirección contraria (3).

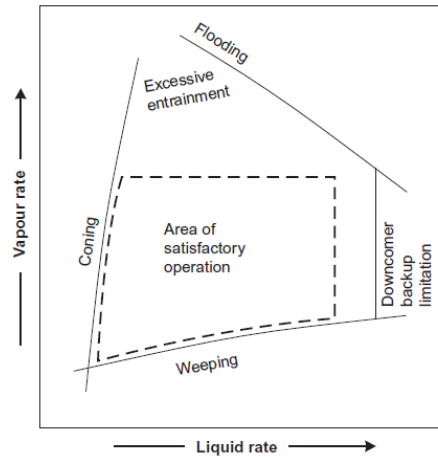


Figura 20. Rango de operación satisfactoria en una columna de destilación de platos (3).

Cabe destacar que los cálculos que se presentarán a lo largo de este apartado se han realizado reiteradas veces en una hoja Excel, siguiendo un procedimiento de prueba y error, hasta conseguir que todas las condiciones de diseño se cumplan. No obstante, al ir explicando cada parámetro, se presentarán los resultados finales obtenidos. El procedimiento que se ha seguido comprende:

- Calcular la eficiencia de la columna, recolectar las propiedades físicas del sistema con el que se opera, seleccionar un espaciado entre platos y el tipo de platos a utilizar.
- Estimar el diámetro de la columna y seleccionar un patrón de flujo.
- Decidir la estructura del plato, determinar el área de la bajante, área activa, diámetro de los orificios del platos, y demás parámetros relacionados.
- Comprobar la velocidad de goteo, la caída de presión y el retorno de la bajante. Si son satisfactorios, continuar, sino cambiar la estructura del plato o el espaciado entre platos.
- Decidir los detalles del plato. Si el *pitch* no se encuentra dentro de los valores favorables, cambiar la estructura del plato.
- Recalcular y comprobar el porcentaje de inundación.
- Comprobar el arrastre. Si toma un valor satisfactorio finalizar, sino volver a estimar el diámetro de la columna y repetir los cálculos.

4.1. Eficiencia de la columna

Para comenzar el diseño hidráulico, primero se debe determinar el número de platos reales que tendrá la columna de destilación, puesto que con las ecuaciones MESH se han determinado el número de etapas teóricas para alcanzar la separación deseada. La eficiencia global de la columna, E_o , es el parámetro que vincula el número de etapas reales con las teóricas, tal como se expresa en la Ecuación [76] (3).

$$E_o = \frac{\text{número de etapas teóricas}}{\text{número de etapas reales}} \quad [76]$$

Para la estimación de la eficiencia de la columna se empleará la correlación de O'Connell, Ecuación [77]. Para su cálculo, se necesita conocer la volatilidad relativa media de los componentes de la mezcla a destilar y la viscosidad media de la alimentación (3).

$$E_o = 51 - 32,5 \cdot \log(\mu_a \cdot \overline{\alpha_{AB}}) \quad [77]$$

El valor de μ_a , se ha tomado de *Aspen Hysys*, a una temperatura promedio de la columna, a 73,37 °C. Por otro lado, la volatilidad relativa de un componente respecto al otro se ha calculado según la Ecuación [78], y luego, se ha utilizado la media geométrica de las volatilidades relativas en cabezas y colas de la columna, como se muestra en la Ecuación [79] (2).

$$\alpha_{AB} = \frac{P_A^o \cdot \gamma_A}{P_B^o \cdot \gamma_B} \quad [78]$$

$$\overline{\alpha_{AB}} = \sqrt{\alpha_{AB \text{ cabezas}} \cdot \alpha_{AB \text{ colas}}} \quad [79]$$

Siendo:

- α_{AB} la volatilidad relativa de un componente A respecto al componente B, a una determinada temperatura, composición y presión. Se ha establecido como componente A la acroleína, y como componente B el agua.
- $\overline{\alpha_{AB}}$ la volatilidad relativa media de los componentes.

En la Tabla 47 se resumen las condiciones en los extremos de la columna, y en la Tabla 48 se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 47. Resumen de las condiciones en cabezas y colas de la columna de destilación T-304.

	Cabezas (T = 51,99 °C)			Colas (T = 94,75 °C)		
	$x_{D,i}$	P_i^o (bar)	γ_i	$x_{B,i}$	P_i^o (bar)	γ_i
Acroleína	0,900	0,990	1,035	0,003	3,641	16,993
Agua	0,100	0,138	6,692	0,997	0,828	1,000

Tabla 48. Cálculo de la eficiencia de la columna y número de etapas reales.

Parámetro	Valor
$\alpha_{AB \text{ cabezas}}$	1,11
$\alpha_{AB \text{ colas}}$	74,67
$\overline{\alpha_{AB}}$	9,09
μ_a (mPa·s)	$2,84 \cdot 10^{-1}$
E_o (%)	37,62
Etapas reales	11

Conociendo que se necesitan 4 etapas teóricas más la caldera para alcanzar la separación deseada, y una vez determinada la eficiencia de la columna, se calculan entonces que serán necesarias 11 etapas reales más la caldera. Asimismo, se estima que la alimentación será introducida entonces entre las etapas reales 8 y 9, con lo cual, habría 8 etapas reales en la sección de enriquecimiento y 3 en la de agotamiento.

4.2. Propiedades del sistema

Es importante resaltar que los cálculos del número de etapas de equilibrio se han realizado a presión atmosférica constante, no obstante, en realidad si existe una caída de presión en la columna, que será calculada en el presente diseño hidráulico. En principio, se asumirá un valor de caída de presión de 150 mm de agua, y luego se comprobará que la caída de presión existente

sea menor que la asumida. Por tanto, la caída de presión en la columna se calcula de la siguiente manera:

$$\Delta P_{\text{columna}} = 0,150 \text{ m H}_2\text{O} \cdot 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot 9,81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot 11 \text{ etapas} = 16.186,50 \text{ Pa}$$

Como los datos de equilibrio no presentan grandes diferencias con una pequeña caída de presión, los resultados obtenidos en el apartado 3. *Determinación del número de etapas de equilibrio en la columna de destilación T-304* serán igualmente válidos. En la Tabla 49 mostrada a continuación, se recopilan algunas propiedades del sistema con el cual se opera, cuyos valores serán necesarios para ciertos cálculos del diseño hidráulico. Los valores de densidades y de la tensión superficial del líquido fueron tomados del simulador de procesos *Aspen Hysys*.

Tabla 49. Recopilación de parámetros necesarios para el cálculo del diseño hidráulico de la columna de destilación.

Parámetro	Cabezas	Colas
Temperatura (°C)	51,99	94,75
Presión (bar)	1,01	1,17
Densidad del líquido (kg/m ³)	805,35	942,55
Densidad del vapor (kg/m ³)	1,96	0,98
Tensión superficial del líquido (N/m)	$2,72 \cdot 10^{-2}$	$5,97 \cdot 10^{-2}$

4.3. Espaciado entre platos

El rango típico de espaciado entre platos varía desde 0,15 a 1 metro, no obstante, en la mayoría de los casos, el rango se reduce a 0,30 a 0,60 metros (3). Se utilizará un valor de 0,60 metros como espaciado entre platos.

4.4. Tipo de plato

Los platos de flujo cruzado son los más utilizados en columnas de destilación. Tal como se muestra en la Figura 21, el líquido fluye de plato a plato a través de canales verticales conocidos como bajantes, en inglés *downcomers*, quedando retenida una cierta cantidad del líquido en el plato gracias a un rebosadero, *weir* en inglés. A la vez, el vapor ascenderá verticalmente a lo largo de la columna (3).

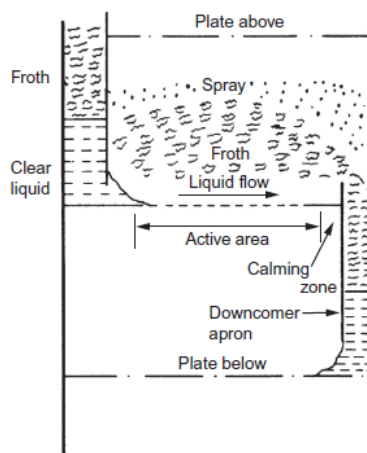


Figura 21. Plato perforado de flujo cruzado (3).

Existen tres tipos de platos en los que el flujo puede ser cruzado. Estos se explican a continuación (3):

1. Platos perforados: es el tipo de plato más sencillo y económico. El vapor asciende a través de los orificios del plato, mientras que el líquido queda retenido en el plato y no desciende por los orificios gracias al flujo de vapor, sino que desciende por la bajante. Generalmente, los orificios suelen ser de pequeño tamaño.
2. Platos de campanas de borboteo: presentan tubos cortos mediante los cuales asciende el vapor, garantizando que se mantenga cierto nivel de líquido en el plato independientemente si el caudal de vapor es pequeño o grande. Corresponden al tipo de plato más antiguo, son más caros que los perforados, y por lo general se corroen, ensucian y obstruyen fácilmente.
3. Platos de válvulas: son similares a los platos perforados, con la diferencia en que los orificios se perforan parcialmente, con lo cual una parte del orificio permanece cubierta por válvulas, fijas o flotantes. Suelen ser diseños patentados, de modo que, al trabajar con bajos caudales de vapor, las válvulas se cierran y no dejan pasar el líquido.

La elección del tipo de plato dependerá del coste, rango de operación, eficiencia y caída de presión. El coste de los platos perforados resulta mucho menor que los otros tipos de platos, y proporcionan un funcionamiento eficaz en un rango del 50 al 120% de la capacidad de diseño. Con respecto a la eficiencia, será prácticamente la misma para los tres tipos de platos, al operar en las mismas condiciones. Y, en lo que se refiere a la caída de presión, los platos perforados proporcionan la caída de presión más baja (3). Debido al funcionamiento satisfactorio de los platos perforados, estos serán los seleccionados para el diseño de la columna de destilación T-304.

4.5. Diámetro de la columna

Como se expuso con la Figura 20, la condición de inundación determina la velocidad del vapor más alta con la que se opera. Generalmente, la velocidad del vapor estará entre el 70 y 90% de la que causaría inundación. Siguiendo lo establecido en la bibliografía (3), para el diseño se deben tomar valores de la velocidad del vapor alrededor del 80 y 85% de la velocidad de inundación. Particularmente, para el presente diseño la velocidad del vapor se calculará como el 80% de la velocidad de inundación.

Se utilizará la Ecuación [80] para calcular el factor de flujo líquido-vapor y la Ecuación [81] para estimar la velocidad de inundación. Cabe destacar que los cálculos se harán para las dos secciones de la columna: enriquecimiento y agotamiento.

$$F_{LV} = \frac{L_w}{V_w} \cdot \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} \quad [80]$$

$$u_f = K_1 \cdot \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V}} \quad [81]$$

Donde:

- F_{LV} es el factor de flujo líquido-vapor.
- L_w y V_w son los caudales máxicos máximos en fase líquida y vapor, respectivamente, en kg/s.
- ρ_L y ρ_V son las densidades del líquido y del vapor, respectivamente, en kg/m³.
- u_f es la velocidad de inundación del vapor, en m/s.
- K_1 es una constante cuyo valor se obtiene de la gráfica de la Figura 22.

En la Tabla 50 se muestran los datos de los caudales de líquido y vapor másicos con los que se calcula el factor de flujo F_{LV} , y el resultado obtenido.

Tabla 50. Resultados obtenidos del cálculo del factor de flujo líquido-vapor.

	Enriquecimiento	Agotamiento
L_w (kg/s)	$2,39 \cdot 10^{-1}$	$4,01 \cdot 10^{-1}$
V_w (kg/s)	$6,28 \cdot 10^{-1}$	$1,97 \cdot 10^{-1}$
F_{LV}	$1,88 \cdot 10^{-2}$	$6,60 \cdot 10^{-2}$
K_1	$1,20 \cdot 10^{-1}$	$1,05 \cdot 10^{-1}$

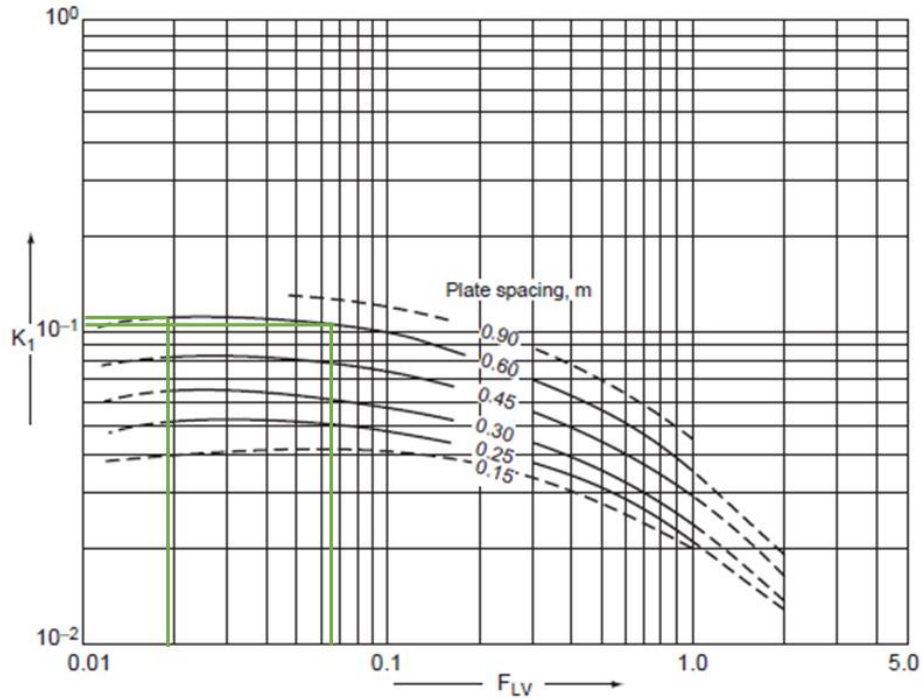


Figura 22. Gráfica para la obtención del valor de la constante K_1 . Adaptado de (3).

Es importante resaltar que para el uso de dicha gráfica se tienen que cumplir las siguientes condiciones (3):

1. El diámetro del orificio debe ser menor a 6,50 mm.
2. La altura del rebosadero debe ser menor al 15% del espaciado entre platos. Tomando un espaciado de 0,60 m, entonces la altura del rebosadero debe ser menor a 90 mm.
3. No debe darse lugar a la formación de espumas.
4. Para valores del área perforada menores al 10% del área activa, debe corregirse el valor de K_1 , tal como se expone en la Tabla 51.

Tabla 51. Correcciones de K_1 según el área perforada. Adaptado de (3).

Área perforada	Multiplicar K_1 por:
10% del área activa	1,00
8% del área activa	0,90
6% del área activa	0,80

5. Para valores de tensión superficial del líquido, σ , diferentes de 0,02 N/m, se corrige el valor de K_1 , multiplicándolo por $\left(\frac{\sigma}{0,02}\right)^{0,2}$.

Como se dijo anteriormente, los cálculos del diseño hidráulico siguieron un procedimiento repetitivo de prueba y error. Finalmente, se obtuvo que el área perforada sería un 9,50% del área activa del plato, por lo tanto, interpolando entre los valores de la Tabla 51, se debe corregir el valor de K_1 , multiplicándolo por 0,975. Por lo tanto, aplicando las correcciones a la Ecuación [81] queda de la siguiente forma, como se expresa en la Ecuación [82].

$$u_f = K_1 \cdot 0,975 \cdot \left(\frac{\sigma}{0,02}\right)^{0,2} \cdot \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V}} \quad [82]$$

Conocida la velocidad de inundación, se puede obtener la velocidad neta del vapor, u_n , que como se dijo anteriormente será un 80% de la velocidad de inundación. También, es posible calcular el caudal de vapor máximo volumétrico en cada sección de la columna, $Q_{V,max}$, empleando la Ecuación [83], y luego, el área neta requerida en la columna, A_n , mediante la Ecuación [84].

$$Q_{V,max} = \frac{V_w}{\rho_V} \quad [83]$$

$$A_n = \frac{Q_{V,max}}{u_n} \quad [84]$$

Se calcula también el área de la columna, A_c , haciendo uso de la Ecuación [85], estimando que el área de la bajante es un 8% de la misma. De forma que, ya conociendo el área de la columna, se pueda despejar el diámetro interno de la columna, D_c , tal como se establece en la Ecuación [86].

$$A_c = \frac{A_n}{1 - 8\%} \quad [85]$$

$$D_c = \sqrt{\frac{4 \cdot A_c}{\pi}} \quad [86]$$

Los resultados se resumen en la Tabla 52 mostrada a continuación.

Tabla 52. Resultados obtenidos en el cálculo del diámetro de la columna.

	Enriquecimiento	Agotamiento
u_f (m/s)	2,52	3,94
u_n (m/s)	2,02	3,16
$Q_{V,max}$ (m ³ /s)	$3,21 \cdot 10^{-1}$	$2,00 \cdot 10^{-1}$
A_n (m ²)	$1,59 \cdot 10^{-1}$	$6,34 \cdot 10^{-2}$
A_c (m ²)	$1,73 \cdot 10^{-1}$	$6,89 \cdot 10^{-2}$
D_c (mm)	469,23	296,16

Es cierto que los diámetros calculados para la sección de enriquecimiento y agotamiento difieren en más de un 20%. No obstante, se mantendrán los valores calculados, y posteriormente, se comprobará que la columna no se inunde en ninguna de sus secciones. Siempre y cuando se verifiquen todas las comprobaciones del diseño, se considerarán válidos los resultados obtenidos.

Por lo tanto, se toma el mayor valor calculado del diámetro interno de la columna, y se procede a estandarizar. Posteriormente, en el diseño mecánico, se explicará la elección del material de construcción de la columna. No obstante, se adelantará que el material elegido es acero inoxidable 304, por lo que se han buscado las tablas de diámetros estandarizados de conducciones de dicho material.

Buscando el valor de diámetro interno por encima de 469,23 mm, se encuentra que el diámetro interno estandarizado es de 488,95 mm (19,25 in). Por consiguiente, ya se establece que el espesor de la carcasa será de 9,525 mm (0,375 in), y la columna tendrá un diámetro externo estandarizado de 508 mm (20 in).

Tabla 53. Diámetros estandarizados de tuberías de acero inoxidable (ASTM A312 / ASME SA312). Adaptado de (12).

PIPE SIZE	OD IN INCHES	PIPE SCHEDULES										
		5S	5	10S	10	20	30	40S & STD	40	60	80S & XH	
20	20.000	Wall Thickness	.188		.219	.250	.375	.500	.375	.594	.182	.500
		Weight / Foot	39.78		46.27	52.73	78.60	104.1	78.60	123.1	166.4	104.1
		Inside Diameter	19.624		19.682	19.5	19.25	19	19.25	18.812	18.376	19
		Burst Pressure	1316		15.33	1750	2625	3500	2626	4158	5684	3500

Por lo tanto, se continuarán los cálculos del diseño hidráulico de la columna de destilación T-304 empleando el valor del diámetro interno estandarizado.

4.6. Patrón de flujo

Se determinará el caudal volumétrico máximo de líquido en cada sección de la columna, haciendo uso de la Ecuación [87]. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 54.

$$Q_{L,max} = \frac{L_w}{\rho_L} \quad [87]$$

Tabla 54. Caudal volumétrico máximo de líquido en cada sección de la columna.

	Enriquecimiento	Agotamiento
$Q_{L,max}$ (m ³ /s)	$2,97 \cdot 10^{-4}$	$4,26 \cdot 10^{-4}$

Es necesario determinar el patrón de flujo del líquido que descenderá a lo largo de la columna de destilación. Siguiendo lo establecido en la bibliografía (3), hay tres tipos de patrones de flujo de líquido para platos perforados: flujo inverso, flujo cruzado de paso simple y de paso doble. Por lo general, para la mayoría de los casos el patrón de flujo cruzado de paso simple es una buena opción, y funciona para un amplio rango de caudales. Como se puede observar en la Figura 23, el flujo inverso se recomienda cuando se trabaja con bajos caudales de líquido, mientras que se emplea paso doble para cuando se trabaja con grandes caudales de líquido.

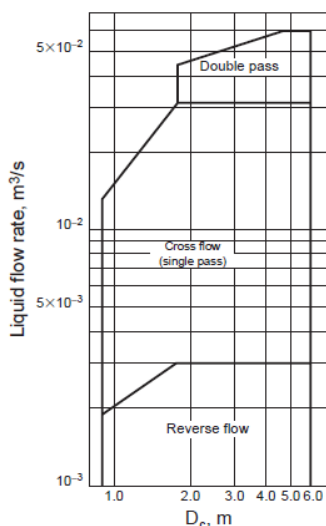


Figura 23. Patrones de flujo del líquido (3).

En principio, viendo que el caudal de líquido existente en la columna es pequeño, resulta razonable pensar que como patrón de flujo se seleccione flujo inverso. A pesar de esto, se seleccionará flujo cruzado de paso simple, debido a que la bibliografía consultada ofrece toda la información necesaria para continuar el diseño hidráulico de la columna, seleccionando este patrón de flujo. Además de que es el patrón de flujo más versátil en lo que se refiere a rangos de caudales de operación, por lo que en principio sería aceptable esta consideración.

4.7. Estructura del plato

Se deberán tener en cuenta ciertos parámetros, para llevar a cabo el diseño del plato, estos se explicarán a continuación (3).

Área de la sección transversal de la columna, A_c

Reordenando la Ecuación [86], y ya conociendo el diámetro interno estandarizado que tendrá la columna de destilación T-304, el área seccional total se calcula empleando la Ecuación [88].

$$A_c = \frac{\pi \cdot D_c^2}{4} \quad [88]$$

Área de la bajante, A_d

Corresponde a la parte del área de la sección de la columna, que es destinada a la bajante, por donde descenderá el líquido. Según la bibliografía (3), esta área puede tomar valores desde aproximadamente 6-19% del área seccional total, en este caso particular, tomará un valor del 8%.

Área neta disponible, A_n

Es el área disponible para llevar a cabo la separación líquido-vapor, y será calculada como se muestra en la Ecuación [89].

$$A_n = A_c - A_d \quad [89]$$

Área activa o de borboteo, A_a

Su valor puede obtenerse haciendo uso de la Ecuación [90].

$$A_a = A_c - 2 \cdot A_d \quad [90]$$

Área perforada, A_p

Su valor tiene en cuenta al área ocupada por los orificios existentes en el plato, las zonas de calma y el ancho de los anillos de soportes del plato. Por lo general, su valor ronda el 10% del área activa o de borboteo, y si se emplean valores inferiores, se debe hacer la corrección pertinente, según los valores mostrados en la Tabla 51 (3). Como ya se ha comentado, en el presente diseño se emplea un valor del área perforada del 9,50% del área activa, por lo que se ha multiplicado el parámetro K_1 por 0,975, tal como se mostró en la Ecuación [82].

Longitud del rebosadero, l_w

La longitud del rebosadero depende del área de la bajante que se ha seleccionado. Tal como se establece en la bibliografía (3), esta longitud varía entre 60-85% del diámetro de la columna. En la Figura 24 se muestra que, para un área de la bajante del 8% del área activa, la longitud del rebosadero será aproximadamente el 70% del diámetro interno de la columna.

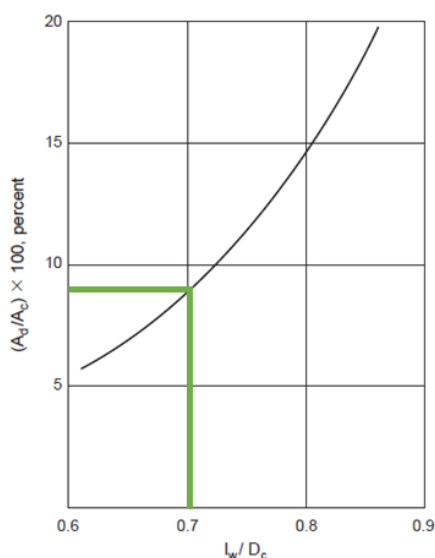


Figura 24. Gráfico para el cálculo de la longitud del rebosadero. Adaptado de (3).

Altura del rebosadero, h_w

Este parámetro determina el volumen de líquido existente en el plato, resultando influyente en la eficiencia que tendrá el plato. De modo que, mientras el rebosadero tenga una mayor altura, conducirá a una mayor eficiencia del plato, no obstante, la caída de presión existente también aumentará.

Generalmente, en columnas que operan a presiones por encima de la atmosférica, el rango típico de alturas del rebosadero va desde 40 a 90 mm, preferiblemente entre 40 y 50 mm (3). Para el diseño de la columna de destilación T-304, se tomará una altura del rebosadero de 40 mm.

Diámetro del orificio, d_o

Los diámetros de los orificios de los platos van desde los 2,50 hasta los 19 mm. Es importante tener en cuenta que, si estos orificios se conseguirán por procesos de perforado simple, el diámetro del orificio dependerá del espesor del plato. Para platos de acero al carbono, el diámetro del orificio puede ser el mismo que el espesor del plato, no obstante, para acero inoxidable se recomienda que el diámetro de los orificios sea mayor que el espesor del plato (3). Por esta razón, una vez fijado el valor de t_{plato} , se selecciona como diámetro del orificio un valor de 3,50 mm.

Espesor del plato, t_{plato}

Se suele utilizar el término calibre para hacer referencia al espesor de los platos. Siguiendo lo establecido en la bibliografía (3), para platos de acero inoxidable se recomienda un espesor de 2,778 mm (calibre 12).

Como se especificó al principio de la descripción del diseño hidráulico, para realizarlo, se siguió un procedimiento de prueba y error, en el cual, se empezó utilizando dicho valor de espesor del plato recomendado, pero finalmente se consiguió cumplir con todos los requerimientos de diseño empleando un espesor de los platos de 1,984 mm (calibre 14), valor buscado en la bibliografía (13).

En la Tabla 55 mostrada a continuación se recopilan los resultados obtenidos de los cálculos realizados y los valores seleccionados de los últimos parámetros comentados.

Tabla 55. Valores de parámetros relacionados al diseño del plato.

Parámetro	Valor
D_c (mm)	488,95
A_c (m ²)	$1,88 \cdot 10^{-1}$
A_d (m ²)	$1,50 \cdot 10^{-2}$
A_n (m ²)	$1,73 \cdot 10^{-1}$
A_a (m ²)	$1,58 \cdot 10^{-1}$
A_p (m ²)	$1,50 \cdot 10^{-2}$
I_w (mm)	342,27
h_w (mm)	40,00
d_o (mm)	3,50
t_{plato} (mm)	1,984

4.8. Comprobación de la velocidad de goteo

Como se observó en la Figura 20, la velocidad de goteo o lloriqueo fija el límite inferior de operación, que corresponderá a la velocidad del vapor más baja con la que se puede operar para seguir teniendo un funcionamiento estable en la columna. Si se opera por debajo de este límite, el líquido descenderá a través de los orificios del plato. Por lo tanto, se requiere que la velocidad del vapor sea mayor que la velocidad en el punto de goteo.

Para determinar la velocidad del vapor en el punto de goteo, u_h , se utilizará la expresión de la Ecuación [91].

$$u_{h,goteo} = \frac{[K_2 - 0,90 \cdot (25,4 - d_o)]}{\rho_V^{1/2}} \quad [91]$$

Siendo K_2 una constante que depende de la profundidad del líquido en el plato. Para obtener su valor, se emplea la gráfica de la Figura 25.

Primero, se deberá calcular la profundidad del líquido en el plato como la suma de la altura del rebosadero, h_w , y la altura del líquido sobre el rebosadero, h_{ow} . Esta última se puede estimar empleando la Ecuación [92].

$$h_{ow} = 750 \cdot \left[\frac{L_w}{\rho_L \cdot I_w} \right]^{2/3} \quad [92]$$

Esta altura del líquido sobre el rebosadero será calculada utilizando los valores máximos y mínimos de líquido en la columna. Tanto para los caudales de líquido como de vapor, se considera el valor mínimo un 80% del máximo. Cabe destacar que el valor de K_2 será obtenido calculando la profundidad del líquido en el plato a caudal mínimo de líquido.

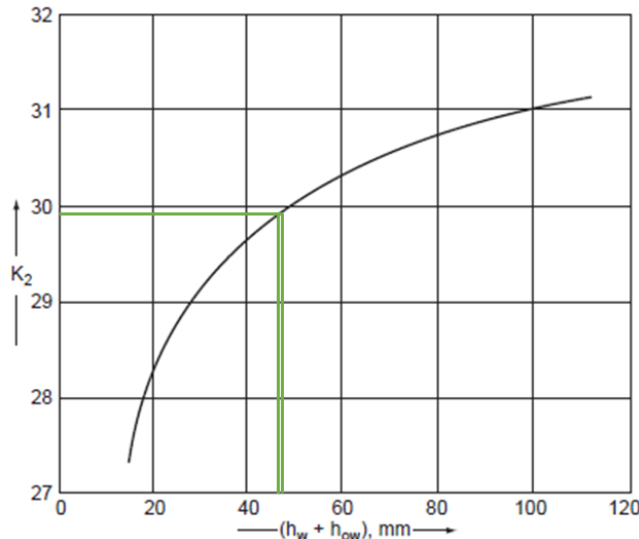


Figura 25. Gráfica para la obtención del valor de la constante K_2 . Adaptado de (3).

Por último, se calcula la velocidad del vapor mínima a través de los orificios del plato, haciendo uso de la Ecuación [93].

$$u_{h,min} = \frac{Q_{V,min}}{A_p} \quad [93]$$

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 56. Se puede observar que la velocidad del vapor mínima es mayor que la velocidad en el punto de goteo en las dos secciones de la columna.

Tabla 56. Resultados obtenidos relacionados con el cálculo de la velocidad del vapor en el punto de goteo.

	Enriquecimiento	Agotamiento
$L_{w,m\acute{a}x}$ (kg/s)	$2,39 \cdot 10^{-1}$	$4,01 \cdot 10^{-1}$
$L_{w,min}$ (kg/s)	$1,91 \cdot 10^{-1}$	$3,21 \cdot 10^{-1}$
$h_{ow,m\acute{a}x}$ (mm)	6,82	8,68
$h_{ow,min}$ (mm)	5,88	7,48
$h_w + h_{ow}$ (mm) a caudal mín.	45,88	47,48
K_2	29,80	29,80
$u_{h,goteo}$ (m/s)	7,21	10,18
$Q_{V,min}$ (m ³ /s)	$2,57 \cdot 10^{-1}$	$1,60 \cdot 10^{-1}$
$u_{h,min}$ (m/s)	17,13	10,67

4.9. Comprobación de la caída de presión

La caída de presión es un factor importante que considerar. Las dos causas principales de la caída de presión en una columna de destilación son: el flujo de vapor a través de los orificios del plato, y la carga estática del líquido en el plato. Para estimar la caída de presión en el plato, se sumará

la caída de presión producida en el plato seco, h_d , la carga ejercida por el líquido en el plato, $(h_w + h_{ow})$, y otras pérdidas de presión menos significativas, conocidas como la carga residual del plato, h_r . Siguiendo esta línea, la caída de presión total en el plato, h_t , se estima mediante la Ecuación [94] (3).

$$h_t = h_d + (h_w + h_{ow}) + h_r \quad [94]$$

Para calcular la caída de presión en el plato seco, h_d , se hará uso de la Ecuación [95]. Por otro lado, para calcular la carga residual del plato se empleará la expresión de la Ecuación [96]. Por último, como la caída de presión se expresa en mm de líquido, se utilizará la expresión de la Ecuación [97] para pasarla a unidades de presión.

$$h_d = 51 \cdot \left[\frac{u_h}{C_0} \right]^2 \cdot \frac{\rho_V}{\rho_L} \quad [95]$$

$$h_r = \frac{12,5 \cdot 10^3}{\rho_L} \quad [96]$$

$$\Delta P_t = 9,81 \cdot 10^{-3} \cdot h_t \cdot \rho_L \quad [97]$$

Siendo:

- u_h la velocidad máxima del vapor a través de los orificios del plato, en m/s.
- C_0 el coeficiente del orificio, que es función del espesor del plato, diámetro del orificio y del porcentaje del área activa que se encuentra perforada. Su valor se obtiene de la gráfica mostrada en la Figura 26.
- ΔP_t es la caída de presión total en el plato, en N/m².

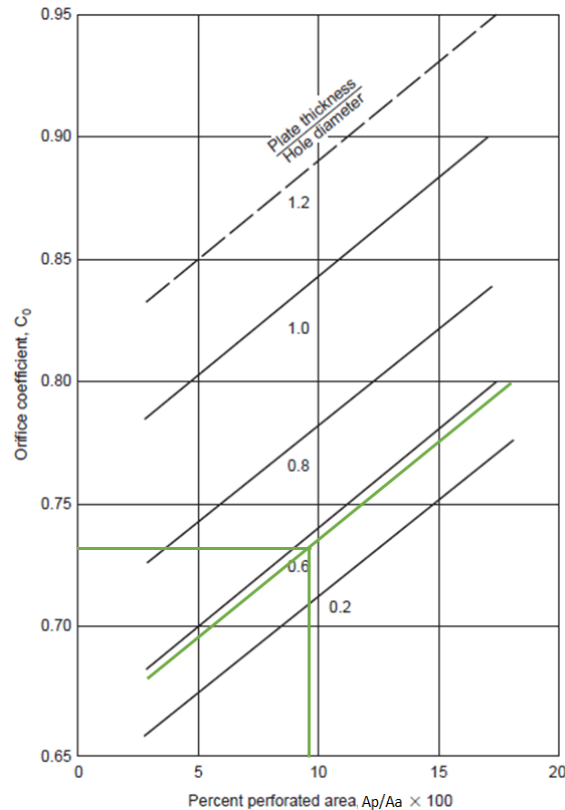


Figura 26. Gráfica para la obtención del valor del coeficiente C_0 . Adaptado de (3).

Los valores obtenidos se resumen en la Tabla 57 mostrada a continuación.

Tabla 57. Resultados obtenidos del cálculo de la caída de presión en el plato.

	Enriquecimiento	Agotamiento
t_{plato} / d_o		0,57
% de área perforada, A_p/A_a		9,50
C_0		0,73
u_h (m/s)	21,42	13,34
h_d (mm)	106,62	17,77
h_r (mm)	15,52	13,26
h_t (mm)	168,02	78,51
ΔP_t (N/m ²)	1.327,45	725,90

Tal como se expuso anteriormente, en el apartado 4.2. *Propiedades del sistema*, se había asumido inicialmente una caída de presión de 150 mm de H₂O por plato, lo que conducía a una caída de presión total en la columna de 16.186,50 N/m². Dividiendo este valor entre las 11 etapas reales existentes en la columna se obtiene el valor de caída de presión por plato, y luego despejando h_t de la Ecuación [97], se obtienen los valores de caída de presión mostrados en la Tabla 58, para cada sección de la columna.

Tabla 58. Caída de presión asumida por plato, para cada sección de la columna.

	Enriquecimiento	Agotamiento
h_t asumida (mm)	186,26	159,14

Se puede observar claramente que los valores de h_t calculados son menores a los asumidos inicialmente, por lo que los valores obtenidos se consideran satisfactorios. Por tanto, se procede a calcular la caída de presión total en la columna, tal como se expresa en la Ecuación [98].

$$\Delta P_{columna} = \Delta P_{enriquecimiento} \cdot N_{enriquecimiento} + \Delta P_{agotamiento} \cdot N_{agotamiento} \quad [98]$$

Teniendo 8 platos en la sección de enriquecimiento y 3 en la de agotamiento, resulta una caída de presión total en la columna de 12.797,30 N/m², es decir, aproximadamente 0,13 bar. Por lo tanto, la presión en colas de la columna toma un valor de 1,14 bar. Es posible estimar también la presión de la corriente de alimentación a la columna, que resulta de 1,12 bar.

4.10. Comprobación del retorno de la bajante

El área de la bajante y el espaciado considerado entre los platos de la columna deben garantizar que el nivel del líquido esté por debajo del rebosadero del plato superior, puesto que sino la columna se inundará. Por tanto, es necesario estimar el retorno de la bajante, h_b , para el cual se empleará la expresión de la Ecuación [99], que utiliza un término de la pérdida de carga en la bajante, h_{dc} , que a su vez se calcula haciendo uso de la Ecuación [100].

$$h_b = h_t + (h_w + h_{ow}) + h_{dc} \quad [99]$$

$$h_{dc} = 166 \cdot \left[\frac{L_{wd}}{\rho_L \cdot A_m} \right]^2 \quad [100]$$

Donde:

- L_{wd} es el caudal de líquido en la bajante, en kg/s. Este será estimado como el caudal de líquido máximo en la columna, L_w .
- A_m corresponde al menor valor entre el área de la bajante, A_d , y el área libre por debajo de la bajante, A_{ap} , en m^2 . Para calcular este último parámetro se utiliza la Ecuación [101].

$$A_{ap} = h_{ap} \cdot I_w \quad [101]$$

Siendo h_{ap} la altura existente entre el final del rebosadero del plato superior y el plato actual, cuyo valor se calcula como la altura del rebosadero menos 5–10 mm. Para el presente diseño, se selecciona 5 mm, y la expresión resulta como se muestra en la Ecuación [102].

$$h_{ap} = h_w - 5 \text{ mm} \quad [102]$$

Para un mejor entendimiento de las alturas comentadas, estas se ilustran en la Figura 27.

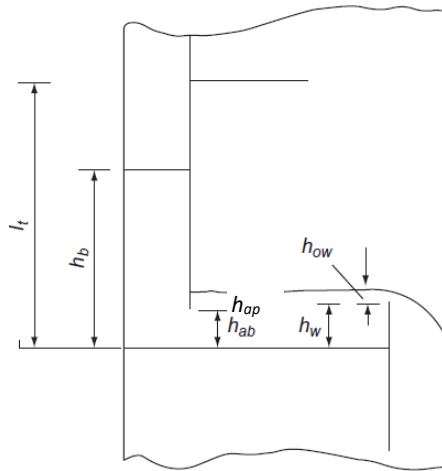


Figura 27. Alturas relacionadas con el diseño de la bajante (3).

Para diseñar correctamente la bajante, se debe cumplir con la condición de la Ecuación [103], siendo I_t el espaciado entre platos considerado, de 0,60 metros.

$$h_b \leq 0,5 \cdot (I_t + h_w) \quad [103]$$

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 59. Se puede apreciar que, el valor obtenido de h_b , tanto para la sección de enriquecimiento como de agotamiento, se encuentra muy por debajo del límite establecido por la condición de la Ecuación [103].

Tabla 59. Comprobación del retorno de la bajante.

	Enriquecimiento	Agotamiento
h_{ap} (mm)	35,00	
A_{ap} (m^2)	$1,20 \cdot 10^{-2}$	
A_m (m^2)	$1,20 \cdot 10^{-2}$	
L_{wd} (kg/s)	$2,39 \cdot 10^{-1}$	$4,01 \cdot 10^{-1}$
h_{dc} (mm)	$1,02 \cdot 10^{-1}$	$2,10 \cdot 10^{-1}$
h_b (mm)	214,00	126,19
$0,5 \cdot (I_t + h_w)$ (mm)	320,00	

4.11. Comprobación del tiempo de residencia

Es importante que exista un tiempo de residencia suficiente en la bajante, de modo que se consiga la separación del líquido y del vapor. Para que el vapor no se vea arrastrado por el líquido, se recomienda que el tiempo de residencia en la bajante sea mayor que 3 segundos (3). Para calcularlo, se utilizará la Ecuación [104].

$$t_r = \frac{A_d \cdot h_{bc} \cdot \rho_L}{L_{wd}} \quad [104]$$

Siendo:

- t_r el tiempo de residencia, en s.
- h_{bc} el retorno del líquido suspendido, en m. Se considera que es igual a h_p .

Los valores obtenidos del tiempo de residencia se recogen en la Tabla 60. Se puede observar que tanto en la sección de enriquecimiento como en la de agotamiento, su valor supera los 3 segundos, por lo que se considera satisfactorio.

Tabla 60. Resultados del tiempo de residencia.

	Enriquecimiento	Agotamiento
t_r (s)	10,83	4,45

4.12. Detalles del plato

Resulta de gran importancia considerar todos los detalles del plato. Los platos no estarán totalmente perforados, sino que también se tienen que incluir elementos estructurales, como lo son los anillos de soporte y vigas, y por la existencia de zonas de calma. Es por ello que, el área perforada se verá reducida, tal como se ilustra en la Figura 28 (3).

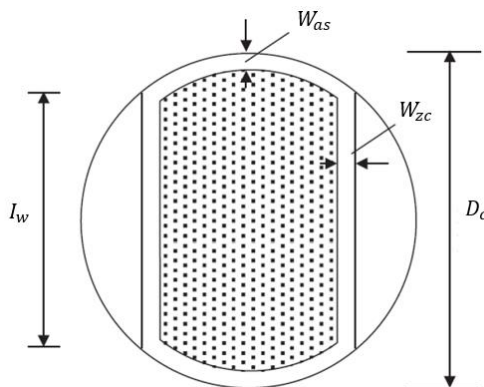


Figura 28. Especificaciones del plato. Adaptado de (3).

Las zonas de calma son partes del plato que no estarán perforadas, a la entrada y salida del líquido en el plato. Generalmente ambos lados presentan el mismo ancho, W_{zc} , y se ha supuesto un valor de 50 mm. Por otro lado, el ancho del anillo del soporte, W_{as} , tomará un valor de 40 mm.

Siguiendo esta línea, el área no perforada del plato se puede estimar por su geometría. En la Figura 29 se muestra la relación entre la longitud de la cuerda del rebosadero, su altura y el ángulo subtendido por el borde del plato. En la Tabla 61 se resumen los valores obtenidos de dicha gráfica, conociendo la altura del rebosadero y el diámetro interno de la columna.

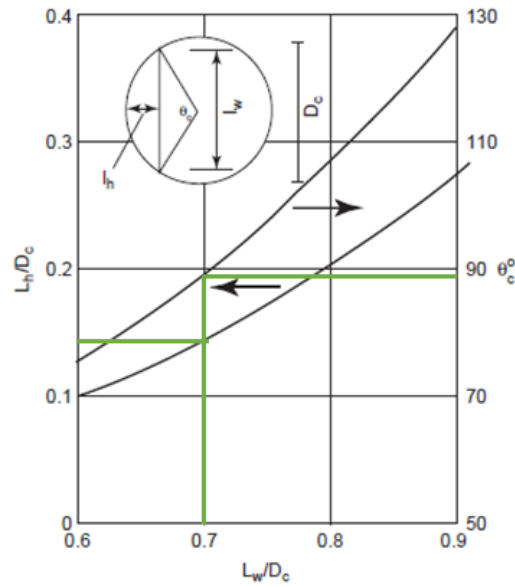


Figura 29. Relación entre la longitud de la cuerda del rebosadero, su altura y el ángulo subtendido por el borde del plato. Adaptado de (3).

Tabla 61. Parámetros relacionados con la geometría del plato.

Parámetro	Valor
L_w/D_c	0,70
L_h/D_c	0,145
θ_c (°)	88,00

Se puede calcular el ángulo subtendido por el borde del plato, θ_s , utilizando la Ecuación [105]. Por otro lado, se estimará la longitud media de los bordes no perforados, L_{bnp} , empleando la Ecuación [106]. Conociendo su valor, será posible calcular también el área de los bordes no perforados, A_{bnp} , haciendo uso de la Ecuación [107].

$$\theta_s = 180 - \theta_c \quad [105]$$

$$L_{bnp} = (D_c - W_{as}) \cdot \pi \cdot \frac{\theta_s}{180} \quad [106]$$

$$A_{bnp} = W_{as} \cdot L_{bnp} \quad [107]$$

Asimismo, se calculará también la longitud media de las zonas de calma, L_{zc} y el área de dichas zonas, A_{zc} . Para lo cual, se utilizarán las Ecuaciones [108] y [109], respectivamente.

$$L_{zc} = (D_c - W_{zc}) \cdot \text{seno} \left(\frac{\theta_c}{2} \right) \quad [108]$$

$$A_{zc} = 2 \cdot L_{zc} \cdot W_{zc} \quad [109]$$

Por consiguiente, el área total que será destinada a las perforaciones del plato, $A_{perforaciones}$, se estimará mediante la Ecuación [110].

$$A_{perforaciones} = A_a - A_{zc} - A_{bnp} \quad [110]$$

Los valores de todos los parámetros comentados se resumen a continuación, en la Tabla 62.

Tabla 62. Detalles del plato.

Parámetro	Valor
θ_s (°)	92,00
L_{bnp} (mm)	720,88
A_{bnp} (m ²)	$2,88 \cdot 10^{-2}$
L_{zc} (m)	304,92
A_{zc} (m ²)	$3,05 \cdot 10^{-2}$
$A_{perforaciones}$ (m ²)	$9,84 \cdot 10^{-2}$

Por otro lado, se debe seleccionar la disposición de los orificios en los platos, que suelen ser disposiciones cuadradas o triangulares. Sin embargo, según lo expuesto en la bibliografía, se prefieren disposiciones triangulares. Asimismo, se deberá calcular el *pitch* de los orificios, I_p , que corresponde a la distancia entre los centros de los orificios. Este valor debe superar el doble del diámetro del orificio, y se recomienda que esté en un rango de 2,5 – 4 veces el diámetro del orificio (3).

El área total del orificio como fracción del área perforada, para un *pitch* triangular, se calcula según la Ecuación [111]. Obtenido su valor, se procede a emplear la gráfica de la Figura 30 para estimar la relación I_p/d_o .

$$\frac{A_p}{A_{perforaciones}} = 0,9 \cdot \left[\frac{d_o}{I_p} \right]^2 \quad [111]$$

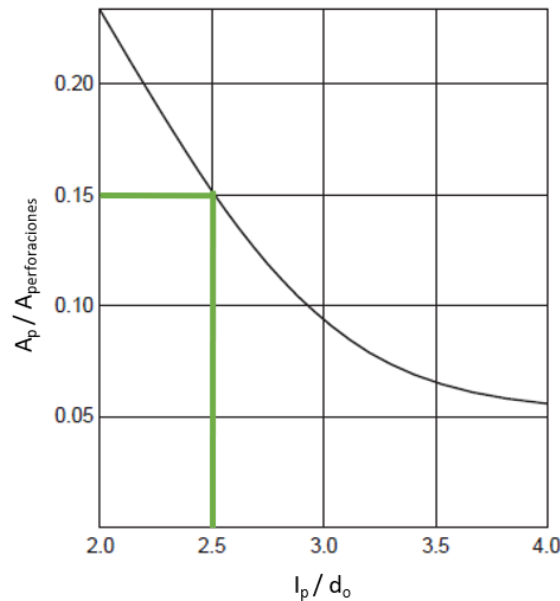


Figura 30. Relación entre el área del orificio y el pitch. Adaptado de (3).

Se observa que la relación I_p/d_o toma un valor de 2,5, lo que quiere decir que el *pitch* será 2,5 veces el diámetro del orificio, estando dentro del rango recomendado mencionado anteriormente.

Por último, se calculará el número de orificios existentes en cada plato. Para ello, se estimará el área del orificio haciendo uso de la Ecuación [112], y posteriormente, la Ecuación [113].

$$A_{orificio} = \pi \cdot \frac{d_o^2}{4} \quad [112]$$

$$N_{orificios} = \frac{A_p}{A_{orificio}} \quad [113]$$

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 63.

Tabla 63. Resultados relacionados con los orificios del plato.

Parámetro	Valor
I_p/d_o	2,50
I_p (mm)	8,75
$A_{orificio}$ (m ²)	$9,62 \cdot 10^{-6}$
$N_{orificios}$	1.558,00

4.13. Comprobación del porcentaje de inundación

Una vez obtenidos los valores correspondientes al diseño de los platos, se volverá a calcular la velocidad neta del caudal máximo de vapor para comprobar que el porcentaje de inundación se encuentre por debajo del asumido al inicio del presente diseño hidráulico. En el apartado 4.5. *Diámetro de la columna*, se había asumido la velocidad del vapor como el 80% de la velocidad de inundación.

Se calculará la velocidad del vapor con la expresión de la Ecuación [114], considerando el área neta disponible, cuyo valor se muestra en la Tabla 55.

$$u_n = \frac{Q_{v,max}}{A_n} \quad [114]$$

Los valores obtenidos se muestran en la Tabla 64. Se observa que los valores de inundación son menores que el 80% inicialmente asumido.

Tabla 64. Comprobación del porcentaje de inundación.

	Enriquecimiento	Agotamiento
u_n (m/s)	1,86	1,16
% inundación	73,68	29,35

4.14. Comprobación del arrastre

Empleando los valores de porcentaje de inundación obtenidos en cada sección de la columna, será posible realizar la comprobación del arrastre, mediante la gráfica de la Figura 31. De esta gráfica resulta el arrastre fraccional, ψ , en función del factor de flujo líquido-vapor. Según lo expuesto en la bibliografía (3), se considerará satisfactorio un valor de arrastre fraccional menor a 0,1.

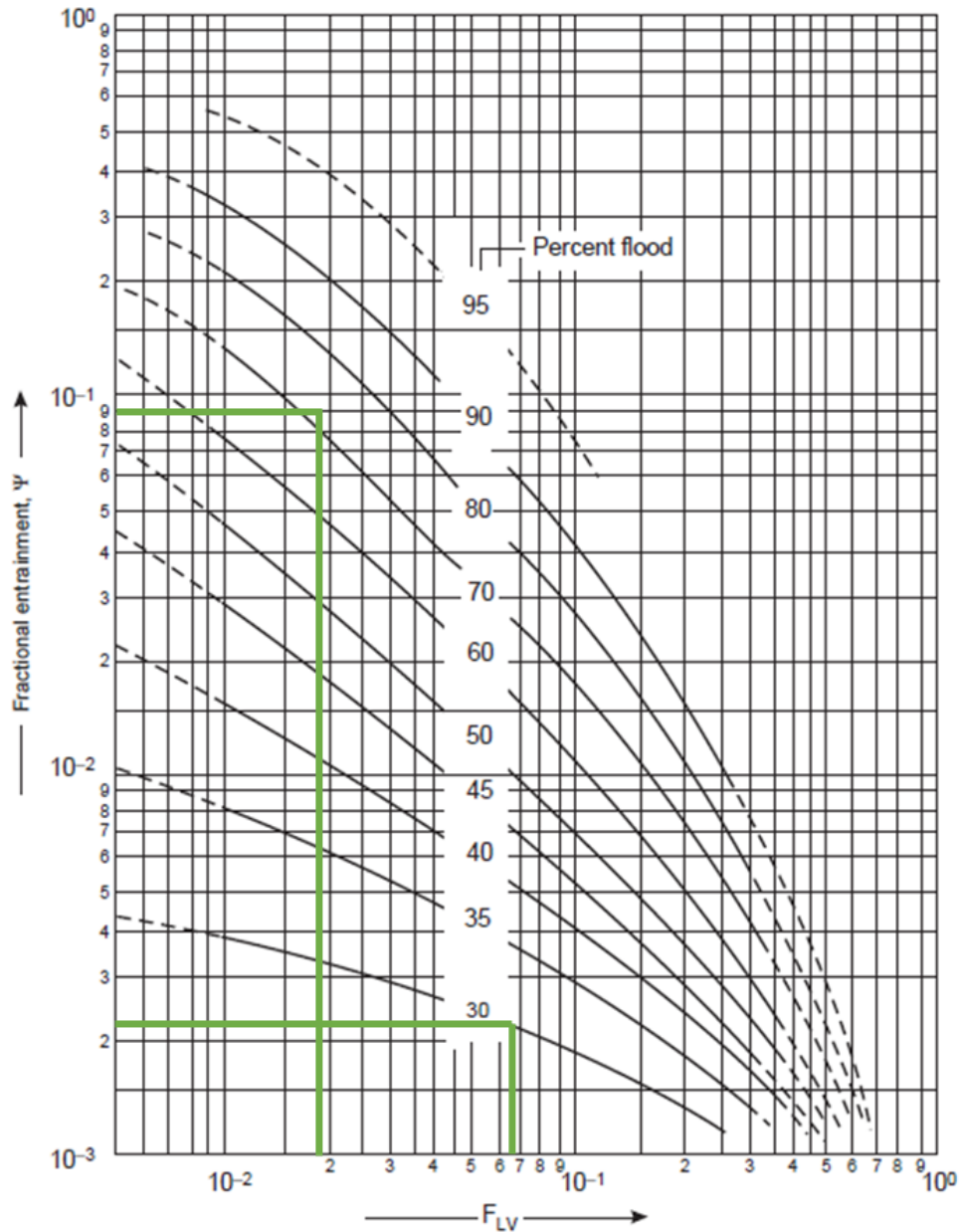


Figura 31. Gráfica para realizar la comprobación del arrastre. Adaptado de (3).

El resultado obtenido se muestra en la Tabla 65. Como se puede observar, el valor del arrastre fraccional, ψ , en ambas secciones de la columna resulta menor a 0,1, lo que indica un resultado favorable.

Tabla 65. Valores obtenidos del arrastre fraccional.

	Enriquecimiento	Agotamiento
ψ	$9,00 \cdot 10^{-2}$	$2,30 \cdot 10^{-3}$

Con esta comprobación se finaliza el diseño hidráulico de la columna de destilación T-304 del presente proyecto, cumpliendo con todas las condiciones requeridas para un buen funcionamiento de la columna.

5. Diseño mecánico de la columna de destilación T-304

Para realizar el diseño mecánico de la columna de destilación T-304 del presente proyecto, se considerará la columna como un recipiente cilíndrico a presión con orientación vertical, y se seguirá lo establecido en el código de diseño ASME *Boiler and Pressure Vessel Code*, Sección VIII, División 1.

Cabe destacar que se ha explicado detalladamente todos los aspectos a considerar para llevar a cabo el diseño mecánico en cuestión, en la *Parte A: Diseño mecánico* del presente *Anexo II: Cálculos justificativos*. Por este motivo, en el presente apartado se hará referencia a las ecuaciones explicadas en la *Parte A: Diseño mecánico*, y se presentarán los resultados obtenidos.

5.1. Presión de diseño

La presión de diseño será tomada como el mayor valor calculado mediante las Ecuaciones [1] y [2] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Los valores de la presión máxima de operación de la columna, $P_{\text{máx. operación}}$, y la presión de diseño, $P_{\text{diseño}}$, se muestran en la Tabla 66.

Tabla 66. Presión de diseño de la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
$P_{\text{máx. operación}}$ (bar)	1,14
$P_{\text{diseño}}$ (bar)	2,86

5.2. Temperatura de diseño

De manera similar, se estima la temperatura de diseño haciendo uso de la Ecuación [3] de la *Parte A: Diseño mecánico*. En la Tabla 67, a continuación, se resumen los valores de la temperatura máxima de operación en la columna, y el valor de la temperatura de diseño obtenido.

Tabla 67. Temperatura de diseño de la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
$T_{\text{máx. operación}}$ (°C)	94,75
$T_{\text{diseño}}$ (°C)	122,53

5.3. Selección del material de construcción

Como se ha explicado en el apartado 4. *Selección del material de construcción* de la *Parte A: Diseño mecánico*, se ha empleado la Metodología Ashby para seleccionar el material de construcción de la columna de destilación.

En la Tabla 3, de la *Parte A: Diseño mecánico*, se responden a todos los criterios que establece la metodología empleada: función del equipo como recipiente a presión, el objetivo que se quiere maximizar, las limitaciones existentes y la variable de diseño libre. Teniendo esto en consideración, y una vez explicados los criterios de fallo, se selecciona el criterio *leak-before-break*, debido a que garantiza un diseño más seguro, permitiendo localizar las fugas con mayor facilidad.

Estudiando los índices de materiales que se corresponden con el criterio de fallo seleccionado, y graficando en el diagrama de Ashby de la Figura 1 de la *Parte A: Diseño mecánico*, se obtienen los materiales que satisfacen los requerimientos impuestos. Para seguir comparando estos

materiales, se evalúan también sus costos económicos, y la compatibilidad química con los compuestos con los que se opera, que en el caso de la columna de destilación son acroleína y agua mayoritariamente, y trazas de dióxido de carbono y acetaldehído.

Se encuentra que el acero inoxidable 304 es de los materiales que satisfacen los requerimientos, además resulta económico y compatible químicamente con los compuestos mencionados. Por estas razones, se selecciona como material de construcción de la columna de destilación T-304.

5.4. Mínimo espesor de carcasa requerido

Para determinar el mínimo espesor de carcasa requerido, se calculan los espesores mínimos para tensión radial y longitudinal, haciendo uso de las Ecuaciones [8] y [9] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Para emplearlas, se necesitan conocer los valores del máximo esfuerzo permisible para el acero inoxidable, S , a la temperatura de diseño, y la eficacia de la unión soldada, E . Interpolando para una temperatura de 252,55 °F en la Tabla 5 de la *Parte A: Diseño mecánico*, se obtiene el valor del primer parámetro, y seleccionando una soldadura doble con examen radiográfico puntual, se obtiene el valor del segundo parámetro, de la Tabla 6 de la *Parte A: Diseño mecánico*. Los valores de estos datos se recogen en la Tabla 68.

Es importante tener presente que el código de diseño ASME BPV establece un espesor mínimo de 1,50 mm, que debe aumentarse en caso de existir riesgo de corrosión, para lo cual se ha tomado un factor de 4 mm. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 68.

Tabla 68. Datos y resultados del cálculo de espesores mínimos de carcasa.

Parámetro	Valor
S (bar)	1.116,00
E	0,85
t_r (mm)	4,74
t_l (mm)	4,37
$t_{\text{mínimo exigido}}$ (mm)	5,50

No obstante, tal como se comentó en el apartado 4.5. *Diámetro de la columna*, se ha estandarizado el diámetro interno de la columna de destilación T-304, buscando en la bibliografía (12) el valor superior más próximo al obtenido mediante los cálculos.

Con lo cual, aparte de obtener el diámetro interno estandarizado, se obtiene también el espesor de carcasa respectivo, el cual dará el diámetro externo estandarizado de la columna de destilación. Siguiendo esta línea, y en vista de que el espesor mínimo de carcasa calculado es inferior al establecido en el estándar ASTM A312 / ASME SA312 para acero inoxidable, *Schedule 40S & Standard*, valor recogido en la Tabla 53, se selecciona como espesor de carcasa de la columna de destilación un valor de 9,525 mm (0,375 in).

5.5. Cabezales

Como se explica en el apartado 6. *Cabezales* de la *Parte A: Diseño mecánico*, existen distintos cabezales que pueden ser empleados para cubrir los extremos de los recipientes a presión. Expuestas sus características, y gracias a que son los más económicos y recomendados para presiones de operación inferiores a 15 bar, se decide utilizar cabezales torisféricos en los extremos superior e inferior de la columna de destilación T-304.

No obstante, se calcularán los espesores mínimos requeridos para los tres tipos de cabezales existentes, empleando las Ecuaciones [10], [11] y [12] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 69. Cabe destacar que se han utilizado los mismos valores de la Tabla 68, del máximo esfuerzo permisible, S , de la eficacia de la unión soldada E , y del factor de corrosión que se le suma al valor obtenido (4 mm).

Tabla 69. Espesores mínimos requeridos para los cabezales, según su tipo.

Parámetro	Valor
$t_{\text{hemisférico}}$ (mm)	4,37
$t_{\text{elíptico}}$ (mm)	4,74
$t_{\text{toriesférico}}$ (mm)	5,31
$t_{\text{mínimo exigido}}$ (mm)	5,50

Tal como sugiere la bibliografía (3), el espesor de los cabezales debe aumentarse para compensar el efecto de debilitamiento debido a las aberturas existentes que no se encuentren reforzadas localmente. Se sabe que en los cabezales existirán dichas aberturas para las conexiones con las conducciones de proceso. Por lo tanto, tomando en cuenta que el espesor de carcasa se ha fijado en 9,525 mm, se decide unificar los espesores de carcasa y cabezales, por lo que estos tomarán el mismo valor de 9,525 mm (0,375 in).

Ahora bien, una vez seleccionado el espesor de los cabezales toriesféricos a emplear, se procede a calcular sus dimensiones, utilizando las Ecuaciones [13], [14], [15], [16], [17] y [18] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Los resultados obtenidos se resumen en la Tabla 70. Cabe destacar que los cabezales superior e inferior tendrán las mismas dimensiones.

Tabla 70. Dimensiones de los cabezales toriesféricos de la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
D_o (mm)	508,00
CR (mm)	508,00
KR (mm)	50,80
SF (mm)	33,34
DH (mm)	93,96
TH_i (mm)	127,30

5.6. Altura de la columna

Conocidos el espaciado entre los platos en el interior de la columna y la altura de los cabezales superior e inferior, solo queda por determinar el espacio libre que se tendrá en cabezas de la columna, entre el primer plato y el cabezal superior, y el espacio libre en el fondo de la columna, entre el último plato y el cabezal inferior.

Como espacio libre en cabezas de la columna, I_{superior} , se ha tomado un valor de 0,60 metros, igual que el espaciado entre platos, mientras que el espaciado libre en el fondo de la columna, I_{inferior} , será de 1,20 metros, es decir, el doble del espaciado entre platos, para mantener el nivel de líquido y permitir el retorno del vapor que proviene de la caldera (*boil-up*).

Por tanto, la altura total de la columna de destilación T-304, L_{total} , se calculará haciendo uso de la Ecuación [115].

$$L_{total} = 11 \text{ platos} \cdot t_{plato} + (11 \text{ platos} - 1) \cdot I_t + I_{superior} + I_{inferior} + 2 \cdot TH_i \quad [115]$$

En la Tabla 71 mostrada a continuación, se resumen los valores de estos parámetros y la altura de la columna obtenida. Asimismo, se calculará también la altura del cuerpo cilíndrico de la columna L , restándole a la altura total, la altura de los cabezales superior e inferior.

Tabla 71. Cálculo de la altura de la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
t_{plato} (mm)	1,984
I_t (mm)	600,00
$I_{superior}$ (mm)	600,00
$I_{inferior}$ (mm)	1.200,00
TH_i (mm)	127,30
L_{total} (m)	8,08
L (m)	7,82

Se prosigue a realizar una comprobación de la relación altura/diámetro de la columna. Según se establece en heurísticas, la relación altura/diámetro de las columnas de destilación debe ser menor a 30, preferiblemente menor a 20 (14).

Teniendo en cuenta la altura total de la columna, y su diámetro externo de 0,508 metros, la relación altura/diámetro de la presente columna de destilación toma un valor de 15,90, valor que resulta satisfactorio según lo establecido en heurísticas.

5.7. Aislamiento térmico

Como fue explicado en el apartado 7. *Aislamiento térmico* de la Parte A: *Diseño mecánico*, los equipos deberán contar con un recubrimiento de material aislante para minimizar las pérdidas de energía térmica, y proteger a los operadores de la planta si entran en contacto directo con la carcasa del recipiente. En el caso de la presente columna de destilación, la temperatura máxima de operación supera los 50 °C establecidos como temperatura límite a la cual podrá estar la superficie del equipo, por lo tanto, es razonable considerar el recubrimiento del equipo con un material aislante.

Una vez evaluadas las características de algunos materiales aislantes comúnmente utilizados, se decide utilizar fibra de vidrio. Para estimar el espesor de aislante requerido, $t_{aislante}$, se hará uso de las Ecuaciones [19] y [20] de la Parte A: *Diseño mecánico*, considerando la temperatura del fluido en el interior de la columna como la temperatura máxima de operación, tal como se muestra en la Figura 32.

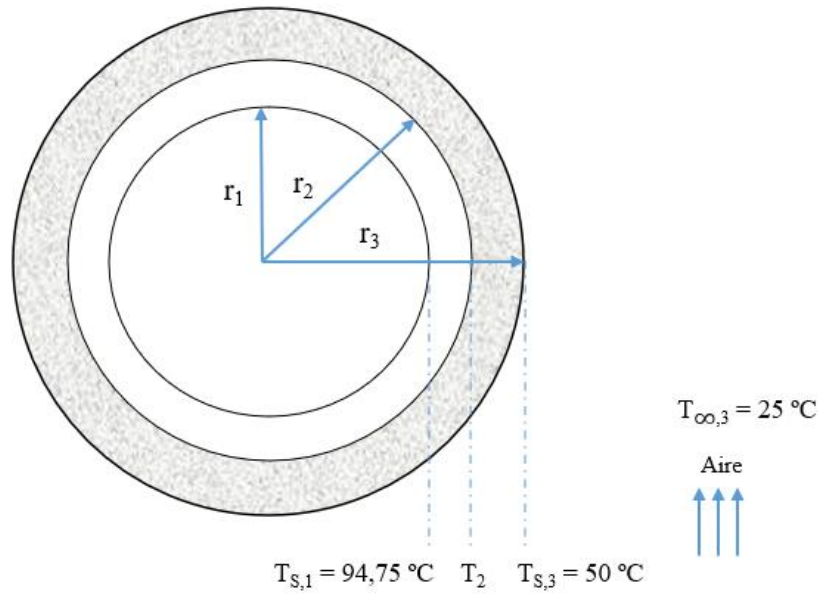


Figura 32. Esquema de radios de la columna de destilación T-304 y sus respectivas temperaturas. Elaboración propia.

Sin embargo, será necesario calcular primero el coeficiente de convección del aire, h_{∞} , empleando la Ecuación [21] de la *Parte A: Diseño mecánico*. A su vez, se necesita conocer previamente el módulo de Nusselt, Nu_L . Para ello, se hará la comprobación de la aproximación a placas planas verticales, de la Ecuación [22] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Para lo cual, será necesario conocer el número de Grashof, Gr_L , y el coeficiente de dilatación volumétrica del aire, β , empleando las Ecuaciones [23] y [24] de la *Parte A: Diseño mecánico*, respectivamente.

Una vez realizada la comprobación mencionada, se procederá a utilizar las Ecuaciones [25] y [26] de la *Parte A: Diseño mecánico*, para obtener así el módulo de Nusselt, Nu_L .

Para realizar los cálculos, se hará uso de los parámetros del aire y del material aislante recogidos en la Tabla 8 de la *Parte A: Diseño mecánico*. En la Tabla 72, a continuación, se muestra el coeficiente de conducción del acero inoxidable, $k_{acero\ inox}$ a la temperatura máxima de operación de la columna, tomado de la bibliografía (15), y se resumen los resultados obtenidos.

Tabla 72. Resultados de los cálculos del espesor del material aislante seleccionado.

Parámetro	Valor
$k_{acero\ inox}$ [W/(m·K)]	16,05
β (K ⁻¹)	$3,22 \cdot 10^{-3}$
Gr_L	$1,50 \cdot 10^{12}$
Comprobación $\frac{D_0}{L} \geq \frac{35}{Gr_L^{1/4}}$	$6,29 \cdot 10^{-2} \geq 3,16 \cdot 10^{-2}$
Ra_L	$1,06 \cdot 10^{12}$
Nu_L	1.126,43
h_{∞} [W/(m ² ·K)]	3,78
q (W)	1.258,18
r_3 (mm)	270,47
$t_{aislante}$ (mm)	16,47

Se ha encontrado que Owens Corning es una empresa que comercializa materiales aislantes, entre los cuales se encuentra el material aislante seleccionado, fibra de vidrio, con el nombre de *FIBERGLAS™ PIPE AND TANK INSULATION*. Buscando en los catálogos, se ha encontrado que el espesor mínimo comercializado es de 1 pulgada (25,40 mm), que se recomienda para recipientes con un diámetro de 250 mm o superior (16).

Con lo cual, el espesor del aislante se fija en 25,40 mm. En la Tabla 73, se muestra el valor del radio más externo de la columna, que incluye el aislante, ilustrado en la Figura 32, el calor intercambiado, recalculado para el espesor real de aislante, y la temperatura a la que se encontrará la superficie del aislante, que ahora resulta menor que los 50 °C fijados como temperatura límite.

Tabla 73. Espesor del material aislante seleccionado.

Parámetro	Valor
t_{aislante} (mm)	25,40
r_3 (mm)	279,40
q (W)	953,31
$T_{s,3}$ (°C)	43,34

5.8. Aberturas y conexiones

La columna de destilación T-304 contará con cinco boquillas: una para la entrada de la alimentación a la columna, una para la salida del vapor que se dirige al condensador, una para la corriente que se devuelve a la columna como reflujo, una para la salida del líquido por colas que se dirige a la caldera parcial y otra para el retorno del *boil-up* a la columna. Además, existirán otras aberturas, entre las que se pueden mencionar las necesarias para instalar el sistema de control de la columna, y para la válvula de alivio que poseerá la columna, denotada como PSV-323.

5.9. Cargas

Tal como se expone en el apartado 9. *Cargas* de la Parte A: *Diseño mecánico*, las cargas que deben ser consideradas en el diseño mecánico de los equipos a presión incluyen: cargas por peso, cargas por viento y cargas por actividad sísmica. Debido a que la planta de producción de acroleína del presente proyecto se localiza en una ubicación de baja peligrosidad sísmica, las cargas por actividad sísmica no serán analizadas.

5.9.1. Cargas por peso

En condiciones de funcionamiento, el peso de la carcasa de un recipiente cilíndrico con un espesor de pared uniforme, incluyendo sus cabezales y excluyendo sus accesorios internos, W_v , se calcula empleando la Ecuación [27] de la Parte A: *Diseño mecánico*. En la Tabla 74 se recogen los datos empleados para el cálculo y el resultado obtenido. El valor de la densidad del material de construcción, ρ_m , que corresponde al acero inoxidable 304, se ha obtenido de la bibliografía (15).

Tabla 74. Peso de la carcasa de la columna de destilación T-304 en condiciones de funcionamiento.

Parámetro	Valor
C_w	1,15
ρ_m (kg/m ³)	7.900,00
D_m (mm)	498,48
W_v (N)	11.266,85

También, resulta necesario estimar el peso del aislante que recubre la columna, $W_{Aislante}$. Para ello, se hará uso de las Ecuaciones [28] y [29] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Los valores empleados y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 75. Cabe destacar que la densidad del material aislante, $\rho_{Aislante}$, ha sido tomada de la bibliografía (15).

Tabla 75. Peso del material aislante que recubre la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
$L_{Aislante}$ (m)	7,82
$\rho_{Aislante}$ (kg/m ³)	105,00
$V_{Aislante}$ (m ³)	$3,33 \cdot 10^{-1}$
$W_{Aislante}$ (N)	685,86

El valor de $W_{Aislante}$ que se ha presentado ya se encuentra duplicado, de modo que se considere el peso de los accesorios requeridos para su instalación.

Por otro lado, tal como se ha explicado en el apartado 9.1.2. *Columna de destilación T-304* de la *Parte A: Diseño mecánico*, se debe calcular el peso de los platos existentes en el interior de la columna, W_{Platos} . Para ello, se hará uso de la Ecuación [39] mostrada en dicho apartado. Los datos utilizados para el cálculo, y el resultado obtenido se resumen en la Tabla 76. Cabe resaltar que el valor obtenido de W_{Platos} incluye la carga típica del líquido en cada plato.

Tabla 76. Cálculo del peso de los platos de la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
N	11,00
W_{Platos} (N)	2.478,52

Conociendo los valores de todas las cargas por peso consideradas, se procede a sumarlas todas, obteniendo el valor de W_z . Luego, se calcula el peso máximo del recipiente, que corresponde a las condiciones de prueba hidráulica, lo que significaría que la columna se encuentra llena de agua. Se debe estimar el volumen ocupado por el agua, su peso, y una vez conocido este último, se le sumará al valor de W_z , ya calculado. Por lo tanto, se emplearán las Ecuaciones [30], [31] y [32] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 77.

Tabla 77. Peso máximo de la columna de destilación T-304, en condiciones de prueba hidráulica.

Parámetro	Valor
W_z (N)	14.431,23
$V_{liquido}$ (m ³)	1,52
W_{Agua} (N)	14.876,72
$W_{P.H.}$ (N)	29.307,95

5.9.2. Cargas por viento

La columna de destilación T-304 es un equipo con una altura considerable que será instalada al aire libre en la planta de producción de acroleína del presente proyecto. Por esta razón, será necesario considerar las cargas por viento, y considerando lo explicado en el apartado 9.2. *Cargas por viento* de la *Parte A: Diseño mecánico*, se emplearán las Ecuaciones [40], [41] y [42] mostradas en dicho apartado. Los resultados obtenidos se resumen en la Tabla 78.

Tabla 78. Resultados de las cargas por viento en la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
u_w (km/h)	160,00
P_w (N/m ²)	1.280,00
D_{eff} (m)	$5,59 \cdot 10^{-1}$
W (N/m)	715,26
x (m)	10,45
M_x (N·m)	39.047,77

Cabe destacar que para el valor de la altura de la columna medida desde el suelo, x , se ha tomado en consideración que la altura típica requerida para el acceso de los operadores es de 2,10 metros, tal como establece la bibliografía (17). Además, debe haber un espacio a mayores para la conexión de boquilla del cabezal inferior con la conducción de colas de la columna, unidas mediante un codo. Se ha considerado entonces una altura del soporte de la columna de destilación T-304 de 2,50 metros.

5.10. Esfuerzos

Es imprescindible analizar si la columna de destilación T-304 es capaz de soportar todas las cargas a las que se encuentra sometida, por lo que se llevará a cabo el estudio de esfuerzos.

5.10.1. Esfuerzos primarios

En el apartado 10.1. *Esfuerzos primarios* de la Parte A: *Diseño mecánico*, se explican estos esfuerzos. Los esfuerzos longitudinales, σ_L , y radiales, σ_R , debidos a la presión interna en la columna de destilación se estiman empleando las Ecuaciones [43] y [44]. Asimismo, se calcula el esfuerzo debido al peso de la columna, su contenido y accesorios, σ_W , usando la Ecuación [45].

Por otro lado, se calculará I_v , el segundo momento del área del recipiente con respecto al plano de flexión, para poder estimar los esfuerzos de flexión, σ_b , que podrán ser de tracción o de compresión, dependiendo si están en contra o a favor del viento. Para estimar estos parámetros se hará uso de las Ecuaciones [46] y [47] de la Parte A: *Diseño mecánico*. Obtenidos los esfuerzos primarios, se calcula el esfuerzo longitudinal total, σ_z , empleando la Ecuación [48] de la Parte A: *Diseño mecánico*. En la Tabla 79 se resumen los valores obtenidos.

Tabla 79. Resultados de los esfuerzos primarios en la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
σ_L (N/m ²)	$3,68 \cdot 10^6$
σ_R (N/m ²)	$7,35 \cdot 10^6$
σ_W (N/m ²)	$9,67 \cdot 10^5$
I_v (m ⁴)	$4,63 \cdot 10^{-4}$
σ_b (N/m ²)	$\pm 2,14 \cdot 10^7$
σ_z (N/m ²), con el viento a favor	$-1,87 \cdot 10^7$
σ_z (N/m ²), con el viento en contra	$2,41 \cdot 10^7$

5.10.2. Esfuerzos principales y esfuerzo máximo permisible

Se estimarán los esfuerzos principales aplicando las Ecuaciones [49], [50] y [51] de la Parte A: *Diseño mecánico*. Posteriormente, se calculará el esfuerzo máximo permisible, $S_{permisible}$, el cual

se tomará como el mayor valor de los resultados obtenidos al haber empleado las Ecuaciones [52], [53] y [54] de la *Parte A: Diseño mecánico*. A continuación, en la Tabla 80 se muestran los resultados obtenidos. Es posible comprobar que $S_{permisible}$ es inferior que el máximo esfuerzo permisible para el acero inoxidable, S , por lo cual los cálculos se consideran favorables.

Tabla 80. Resultados de los esfuerzos principales en la columna de destilación T-304.

Parámetro	Con el viento a favor	Con el viento en contra
σ_1 (N/m ²)	$7,35 \cdot 10^6$	$2,41 \cdot 10^7$
σ_2 (N/m ²)	$-1,87 \cdot 10^7$	$7,35 \cdot 10^6$
σ_3 (N/m ²)		$1,43 \cdot 10^5$
$S_{permisible}$ (N/m ²)	$2,60 \cdot 10^7$	$2,40 \cdot 10^7$
S (N/m ²)		$1,12 \cdot 10^8$

5.10.3. Esfuerzos de compresión y estabilidad elástica

Además, es necesario verificar que el valor del esfuerzo máximo de compresión en la carcasa de la columna sea inferior que el valor del esfuerzo crítico de compresión. Por tanto, se emplean las Ecuaciones [55] y [56] de la *Parte A: Diseño mecánico*. En la Tabla 81 se muestran los resultados.

Tabla 81. Resultados de los esfuerzos de compresión y estabilidad elástica en la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
σ_c (N/m ²)	$2,24 \cdot 10^7$
$\sigma_{c,critico}$ (N/m ²)	$3,75 \cdot 10^8$

Se puede observar que el esfuerzo máximo de compresión resulta considerablemente menor al crítico, por lo tanto, el diseño se considera satisfactorio.

5.11. Soporte

En el apartado 11. *Soportes* de la *Parte A: Diseño mecánico*, se han expuesto los tipos de soportes existentes. Debido a que la columna de destilación se trata de un recipiente con orientación vertical se selecciona un soporte de tipo falda, que corresponderá a una falda recta ($\theta = 90^\circ$).

Tal como se comentó en el apartado 5.9.2. *Cargas por viento*, la altura del soporte será de 2,50 metros, y con respecto a su espesor, se tomará el mismo que la carcasa y cabezales de la columna, 9,525 mm. Para verificar que el soporte sea capaz de resistir las cargas y momentos de flexión, calculados anteriormente, se deberán estimar los esfuerzos resultantes en el soporte, σ_s , utilizando las Ecuaciones [57], [58], [59], [60], [61] y [62] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Por último, se verificará el cumplimiento de los criterios de diseño expuestos en las Ecuaciones [63] y [64] de la *Parte A: Diseño mecánico*. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 82.

Tabla 82. Diseño del soporte tipo falda para la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
W_T (N), condiciones de operación	14.431,23
W_T (N), condiciones de prueba hidráulica	29.307,95
σ_{ws} (N/m ²), condiciones de operación	$9,67 \cdot 10^5$
σ_{ws} (N/m ²), condiciones de prueba hidráulica	$1,96 \cdot 10^6$

Tabla 82 (Continuación). Diseño del soporte tipo falda para la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
σ_{bs} (N/m ²)	$2,14 \cdot 10^7$
$\hat{\sigma}_s$ máximo (tracción) (N/m ²)	$2,04 \cdot 10^7$
$S \cdot E \cdot \sen \theta$ (N/m ²)	$8,82 \cdot 10^7$
$\hat{\sigma}_s$ máximo (compresión) (N/m ²)	$2,34 \cdot 10^7$
$0,125 \cdot E_\gamma \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) \cdot \sen \theta$ (N/m ²)	$4,57 \cdot 10^8$

Verificados los criterios de diseño, se da por válida la altura y el espesor seleccionado para el soporte tipo falda para la presente columna de destilación, 2,50 m y 9,525 mm, respectivamente. Con esto, se da por finalizado el diseño mecánico de la columna de destilación T-304.

6. Válvula de alivio PSV-323

En el apartado 12. *Válvulas de alivio* de la Parte A: *Diseño mecánico* se han explicado las razones por las cuales se debe contar con estas válvulas de alivio en los recipientes a presión diseñados siguiendo el Código ASME BPV Sección VIII, asimismo se ha detallado el procedimiento para su dimensionamiento.

Haciendo uso de los factores mostrados en la Tabla 9 y de las Ecuaciones [65], [66] y [67] de la Parte A: *Diseño mecánico* se consigue el área efectiva de descarga de la válvula de alivio. Los resultados obtenidos de todos los parámetros relacionados con el dimensionamiento de la válvula de alivio PSV-323 de la columna de destilación T-304 se recogen en la Tabla 83.

Tabla 83. Dimensionamiento de la válvula de alivio PSV-323 de la columna de destilación T-304.

Parámetro	Valor
Presión máxima acumulada (bar)	3,15
Presión de consigna (bar)	2,86
Sobrepresión permitida (bar)	0,29
Presión de alivio (bar)	70,76
P_1 (bar)	3,15
γ	1,14
P_{cf} (bar)	1,81
W (kg/h)	2.259,83
T (K)	367,90
Z	1,00
M (kg/kmol)	52,59
C	331,41
A (mm ²)	772,43

Buscando en el Catálogo Crosby, mostrado en la Figura 13 de la Parte A: *Diseño mecánico*, el valor del área efectiva de descarga igual o superior al calculado, se ha encontrado que la válvula de alivio PSV-323 de la columna de destilación T-304 corresponde a una válvula J del estilo JOS/JBS, con un área efectiva de 830 mm².

7. Hoja de especificaciones del equipo

<i>Planta de producción de 2-propenal a partir de propileno</i>			
COLUMNA DE CONTACTO LÍQUIDO-VAPOR			
Nombre del equipo	Columna de destilación T-304		
Etiqueta del equipo	T-304		
Código de diseño	ASME BPV Sección VIII Div. 1		
Diámetro máximo (incluido aislante)	mm	558,80	
Altura total (desde el suelo)	m	10,45	
DATOS DEL PROCESO			
Número de etapas de equilibrio	12 (11 en la columna + caldera)		
Cabezas	Caudal de vapor máximo	kg/s	$6,28 \cdot 10^{-1}$
	Caudal de líquido máximo	kg/s	$2,39 \cdot 10^{-1}$
	Temperatura de operación	°C	51,99
	Presión de operación	bar	1,01
	Densidad del vapor	kg/m ³	1,96
	Densidad del líquido	kg/m ³	805,35
	Tensión superficial del líquido	N/m	$2,72 \cdot 10^{-2}$
Colas	Caudal de vapor máximo	kg/s	$1,97 \cdot 10^{-1}$
	Caudal de líquido máximo	kg/s	$4,01 \cdot 10^{-1}$
	Temperatura de operación	°C	94,75
	Presión de operación	bar	1,14
	Densidad del vapor	kg/m ³	0,98
	Densidad del líquido	kg/m ³	942,55
	Tensión superficial del líquido	N/m	$5,97 \cdot 10^{-2}$
CONSTRUCCIÓN Y MATERIALES			
Material de la carcasa	Acero inoxidable 304		
Diámetro interno de carcasa	mm	488,95	
Diámetro externo de carcasa	mm	508,00	
Altura de la carcasa cilíndrica	m	7,82	
Altura del equipo con cabezales incluidos	m	8,08	
Temperatura de diseño	°C	122,53	
Presión de diseño	bar	2,86	
Número de platos	11		
Tipo de platos	Perforados		
Material de los platos	Acero inoxidable 304		
Número de pasos por plato	1		
Número de orificios por plato	1.558		
Diámetro de los orificios	mm	3,50	
Pitch de los orificios	mm	8,75	
Área perforada / Área activa	%	9,50	
Espesor del plato	mm	1,984	
Espaciado entre platos	mm	600,00	
Longitud del rebosadero	mm	342,27	
Altura del rebosadero	mm	40,00	
Caída de presión por plato, enriquecimiento	bar	$1,33 \cdot 10^{-2}$	
Caída de presión por plato, agotamiento	bar	$7,26 \cdot 10^{-3}$	
Caída de presión total	bar	0,13	
NOTAS			
La columna de destilación T-304 cuenta con dos cabezales toriesféricos, superior e inferior, que cubren los extremos de la carcasa cilíndrica. La carcasa se encuentra recubierta por 25,40 mm de fibra de vidrio como material aislante. El soporte del equipo es de tipo falda recta, cuya altura es de 2,50 m.			

8. Bibliografía

1. **WANKAT, P.** *Separation Process Engineering*. Massachusetts: Pentice Hall, 2012. ISBN 0-13-138227-6.
2. **DOHERTY, M. & MALONE, M.** *Conceptual Design of Distillation Systems*. Nueva York: The McGraw-Hill Companies, Inc., 2001. ISBN 0-07-0174237-7.
3. **TOWLER, G. & SINNOTT, R.** *Chemical Engineering Design*. Elsevier, Inc., 2008. ISBN 978-0-7506-8423-1.
4. **ULLMANN, F.** *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Weinheim: Wiley-VCH, 2012. págs. 329-346. Vol. I.
5. **SCHON, S., DANIEL, S. & SANDER, R.** Patente ES 2 278 887 T3. [En línea] Arkema, Inc., 2007. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://patentimages.storage.googleapis.com/95/06/87/92661f7e47af85/ES2278887T3.pdf>.
6. **GMEHLING, J. & ONKEN, U.** *Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection: Aqueous-Organic Systems. Chemistry Data Series*. Frankfurt: DECHEMA, 1991. Vol. I, Parte 1. 3-926959-30-4.
7. **OHE, S.** *Vapor-Liquid Equilibrium Data*. Kodansha: Elsevier, 1989. 0-444-98876-9.
8. **IrChe, Iranian Chemical Engineers Website.** Antoine Coefficients for Vapor Pressure. [En línea] [consultado marzo de 2021]. Disponible en: [http://dining.iauo.ac.ir/images/Uploaded_files/ANTOINE_COEFFICIENTS_FOR_VAPOR_PRESSURE\[1\]\[4619259\].PDF](http://dining.iauo.ac.ir/images/Uploaded_files/ANTOINE_COEFFICIENTS_FOR_VAPOR_PRESSURE[1][4619259].PDF).
9. **NIST, National Institute of Standards and Technology.** Water. [En línea] U.S. Department of Commerce, 2018. [consultado marzo de 2021]. Disponible en: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7732185&Mask=4&Type=ANTOINE&Plot=on>.
10. **SMITH, J., VAN NESS, H. & ABBOTT, M.** *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. 5º ed. México D. F.: McGRAW-HILL, 1996. ISBN: 970-10-1333-6.
11. **STICHLMAIR, J. & FAIR, J.** *Distillation: Principles and Practice*. Wiley-VCH., 1998. ISBN: 0-471-25241-7.
12. **Unified Alloys.** Seamless And Welded Austenitic Stainless Steel Pipe Chart: ASTM A312 / ASME SA312 (Dimension, Weight & Burst Data). [En línea] [consultado abril de 2021]. Disponible en: <https://www.unifiedalloys.com/p/stainless-steel-pipe-data/>.
13. **MSKS IP Inc.** Sheet Metal Gauge Chart. [En línea] 2018. [consultado abril de 2021]. Disponible en: <https://www.metalsupermarkets.com/sheet-metal-gauge-chart/>.
14. **TURTON, R., BAILIE, R., WHITING, W. & SHAEIWITZ, J.** *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 3º ed. New Jersey: Prentice Hall, 2009. ISBN: 0-13-512966-4.
15. **INCROPERA, F., DEWITT, D., BERGMAN, T. & LAVINE, A.** *Fundamentals of heat and mass transfer*. 6º ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2007. ISBN: 0-471-45728-0.
16. **Owens Corning.** FIBERGLAS™ PIPE AND TANK INSULATION: FIBERGLASS INSULATION. [En línea] 2019. [consultado mayo de 2021]. Disponible en: <https://dcpd6wotaa0mb.cloudfront.net/mdms/dms/EIS/14728/14728-Fiberglas-Pipe-and-Tank-Insulation-Product-Data-Sheet.pdf?v=1576415262000>.
17. **Piping Engineering.** Distillation Tower Elevation and Support. [En línea] 2015. [consultado mayo de 2021]. Disponible en: <https://www.pipingengineer.org/distillation-tower-elevation-and-support/>.

PARTE E:
DIMENSIONAMIENTO
BÁSICO DE EQUIPOS

ÍNDICE

1.	Introducción	1
2.	Compresor K-101.....	1
3.	Filtro de aire FT-101.....	3
4.	Válvulas	3
4.1.	Válvula VLV-101.....	3
4.2.	Válvula VLV-301.....	3
5.	Bombas.....	4
6.	Intercambiadores de calor	4
6.1.	Intercambiadores sin cambio de fase.....	5
6.1.1.	Intercambiador de calor E-101.....	8
6.1.2.	Intercambiador de calor E-102.....	9
6.1.3.	Intercambiador de calor E-301.....	10
6.1.4.	Intercambiador de calor E-302.....	11
6.2.	Condensadores.....	11
6.2.1.	Condensador E-303.....	14
6.2.2.	Condensador E-304.....	14
6.3.	Caldera E-305.....	15
7.	Columna <i>quench</i> T-301	16
8.	Columna de desorción T-303	17
9.	Tambor de reflujo V-301.....	19
10.	Conducciones de la planta	20
11.	Bibliografía	23

1. Introducción

El presente documento tiene como objetivo obtener un dimensionado básico de los distintos equipos presentes en la planta. En concreto se calculará el parámetro característico de cada equipo que permita aproximar su precio en el *Documento IV: Presupuesto* mediante el método factorial. Según el equipo, dicho parámetro puede variar.

Cabe destacar, que no se mostrarán a continuación el reactor R-201, la columna de absorción T-302 ni la columna de destilación T-304, debido a que su dimensionamiento ya ha sido realizado rigurosamente en el *Anexo II: Cálculos Justificativos*. Para el resto de los equipos, se usarán las ecuaciones pertinentes, así como los resultados obtenidos en el *Anexo I: Balances de materia y energía*. Destacando entre ellos los intercambiadores de calor, que con el objetivo de conocer con mayor precisión el caudal de utilidades requerido, se dimensionarán con mayor detalle.

2. Compresor K-101

El compresor K-101 corresponde al equipo situado al principio del proceso utilizado para acondicionar la presión del aire a la entrada. Para su dimensionado, se deberá determinar la potencia real que necesita el compresor para alcanzar las condiciones de presión deseadas, así como el tipo de compresor a utilizar. Para la correcta selección del equipo destinado a la impulsión de gases en conducciones, se deben tener en cuenta ciertos parámetros como el caudal de gas, la presión diferencial requerida y la presión de operación. Generalmente, se emplean ventiladores o soplantes cuando la caída de presión es baja, y compresores cuando se necesita una presión diferencial mayor (1).

Existen varios tipos de compresores, sin embargo, los más utilizados en la industria química son los compresores reciprocantes, centrífugos y de flujo axial. Los últimos suelen emplearse para caudales altos y presiones diferenciales moderadas, mientras que los dos primeros pueden aplicarse también a los casos en los que se necesite una presión diferencial alta. A pesar de que ambos pueden trabajar con una gran variedad de caudales, los compresores reciprocantes se prefieren frente a los centrífugos cuando se opera con caudales relativamente bajos. Cuando la presión diferencial requerida es elevada, la temperatura del gas comprimido aumentará y se deberán usar compresores multietapa con refrigeración intermedia (1).

En la Tabla 1 se muestran los rangos de operación según el tipo de compresores.

Tabla 1. Rango de operación de compresores. Elaboración propia, adaptada de (1).

Tipo de compresor	Capacidad máxima (m ³ /h)	Máxima presión diferencial (bar)	
		Una etapa	Múltiples etapas
Reciprocante	85.000,00	3,50	5.000,00
Centrífugo	170.000,00	-	0,20
De flujo axial	170.000,00	3,50	10,00

De acuerdo a lo explicado anteriormente y conociendo las condiciones de la corriente de aire a la entrada, mostradas en la Tabla 2, se seleccionará el tipo de compresor a emplear.

Tabla 2. Características de la corriente de entrada al compresor K-101.

	Caudal molar (kmol/h)	Caudal másico (kg/h)	Densidad (kg/m ³), a 25°C y 1,01 bar	Caudal volumétrico (m ³ /h)
Corriente 4	350,12	10.100,51	1,19	8.487,82

Como se puede observar, el caudal volumétrico de aire con el que se opera se encuentra por debajo de la capacidad máxima de todos los compresores expuestos en la Tabla 1. No obstante, debido a que el compresor reciprocante se prefiere al trabajar con caudales relativamente bajos, se seleccionará ese tipo de compresor.

Asimismo, la presión diferencial requerida es de 1,14 bar, por lo que una etapa de compresión es suficiente para alcanzarla. Para calcular la potencia real del compresor K-101, necesaria para estimar su coste, se debe calcular primero el aporte de trabajo necesario para su funcionamiento que, para compresores reciprocantes, se considera trabajo isentrópico. Para ello, se emplea la Ecuación [1] (2).

$$W_s = \left(\frac{k}{k-1} \right) \cdot Z \cdot R \cdot T \cdot \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1 \right] \quad [1]$$

Donde:

- W_s hace referencia al trabajo isentrópico, en kJ/kmol.
- k es la relación entre capacidades caloríficas, $k = \frac{c_p}{c_v}$.
- Z es el factor de compresibilidad del gas.
- R es la constante de los gases ideales, en J/(mol·K).
- T es la temperatura del gas a la entrada del compresor, en K.
- P_1 y P_2 corresponden a la presión del gas a la entrada y salida del compresor, respectivamente, en bar. El cociente $\frac{P_2}{P_1}$ corresponde a la razón de compresión.

Una vez obtenido el trabajo isentrópico, se procede a calcular el trabajo real requerido W_{real} , haciendo uso de la Ecuación [2]. Seguidamente, se calcula la potencia empleando la Ecuación [3].

$$\eta_s = \frac{W_s}{W_{real}} \quad [2]$$

$$Potencia = W_{real} \cdot \frac{1}{3600} \cdot caudal \text{ molar} \quad [3]$$

Para ello, será necesario conocer la eficiencia isentrópica del compresor, η_s . Cuyo valor puede estimarse haciendo uso de la gráfica mostrada en la Figura 1.

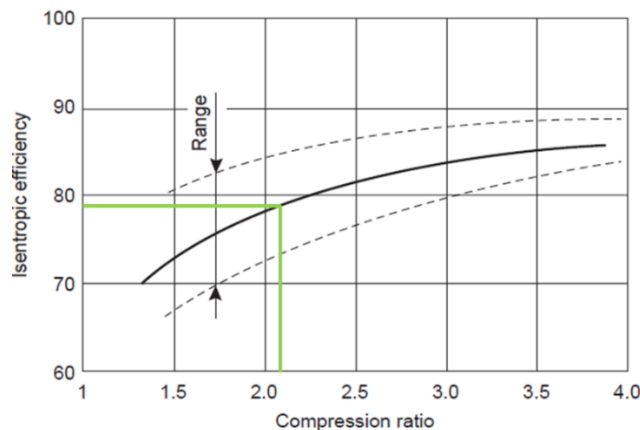


Figura 1. Eficiencias típicas para compresores reciprocantes (1).

Los datos utilizados para la realización de los cálculos anteriormente explicados se muestran en la Tabla 3, y los resultados obtenidos en la Tabla 4. Cabe mencionar que los datos de k y Z fueron tomados de Aspen Hysys.

Tabla 3. Datos para el cálculo de la potencia del compresor K-101.

Parámetro	Valor
k	1,41
Z	1,00
T (K)	298,15
P_1 (bar)	1,01
P_2 (bar)	2,15
η_s	0,78

Tabla 4. Resultados del cálculo de la potencia del compresor K-101.

Parámetro	Valor
W_s (kJ/kmol)	2.083,95
W_{real} (kJ/kmol)	2.671,73
Potencia (kW)	259,85

3. Filtro de aire FT-101

La planta requiere oxígeno como materia prima para llevar a cabo las reacciones en el reactor R-201. Este oxígeno es adquirido de la corriente de aire que proviene del compresor K-101, disminuyendo de esta manera los costes de operación en el proyecto, al no tener que comprarlo. Sin embargo, para evitar la entrada de impurezas, el aire se hace pasar por el filtro FT-101. Este filtro será comprado, por lo que se seleccionan sus dimensiones según el caudal de aire de entrada.

Particularmente, con un caudal de entrada de 7.829,85 m³/h se selecciona el filtro electrostático LUP-24 de la empresa Delsan S.L. Siendo sus dimensiones de 595 mm de ancho, 1.120 mm de alto y 985 mm de profundidad. Este equipo está diseñado para un caudal máximo de 10 mil m³/h, por lo que se ajusta perfectamente a la corriente que debe ser tratada (3).

4. Válvulas

Al igual que el filtro las válvulas no serán dimensionadas, sino que serán compradas ajustándose a la necesidad de la corriente que la precise.

4.1. Válvula VLV-101

En la planta se tiene la válvula VLV-101 que se encarga de disminuir la presión del propileno de la corriente 2 desde 15,01 a 2,05 bar. Esta válvula es imprescindible dado que el propileno debe ser almacenado líquido a alta presión, pero se requiere gaseoso a 2 bar en el reactor R-201. El cambio de presión implica también un cambio de fase con una notoria disminución de temperatura. Por consiguiente, se debe comprar una válvula que trabaje a altas presiones, temperaturas bajas y un alto caudal. Se ha seleccionado la válvula BV25066 PN40 de la empresa BVALVE, con un diámetro nominal de 40 mm. Esta válvula de acero inoxidable ha sido diseñada para soportar temperaturas desde -60 a 400 °C y la presión máxima de 40 a 27,50 bar (4).

4.2. Válvula VLV-301

Por otro lado, la válvula VLV-301 se encuentra a la entrada de la columna de desorción T-303 con el objetivo de disminuir la presión de 1,57 a 1,09 bar. La temperatura del fluido que circula por esta válvula es de 16,31 °C. Por lo tanto, la válvula no tendrá que soportar condiciones atípicas de operación y será más económica que la anterior. Se ha seleccionado en este caso la válvula

BV25060 PN16 de la misma compañía BVALVE, con un diámetro nominal de 127 mm. Consiste en una válvula de globo de acero inoxidable diseñada siguiendo el código ASME B 16.34 con un rango permitido de temperatura de -10 a 200 °C y una presión nominal de 16 bar (4).

5. Bombas

En la planta se encuentran operando diversas bombas, para estimar su coste solo se requiere del caudal. Es por ello que, conociendo las características de las corrientes, resumidas en el *Anexo I: Balance de materia y energía*, se mostrará a continuación el caudal que circula por cada bomba de la planta. Sin embargo, también se requiere identificar el tipo de bombas a emplear. Estas, por lo general, se pueden agrupar en dos tipos diferentes: (1)

1. Bombas dinámicas, como las bombas centrífugas.
2. Bombas de desplazamiento positivo, como las reciprocantes.

Las bombas más utilizadas en la industria química son las bombas centrífugas. Solo se procede a utilizar otro tipo de bombas cuando se tiene una carga elevada o condiciones especiales de proceso (1).

Para el dimensionamiento de las bombas de la planta se emplearán bombas centrífugas, ya que los caudales de fluido de la planta entran en el rango normal de operación de dichas bombas, el cual se muestra en la Tabla 5. Además, no se opera en condiciones extremas, en las cuales se pueda desaconsejar la utilización de bombas centrífugas.

Tabla 5. Valores típicos de operación de bombas centrífugas. Elaboración propia, adaptada de (1).

Tipo	Rango de capacidad (m ³ /h)
Centrífugas	0,25-10 ³

Para determinar los caudales volumétricos de operación se emplea la Ecuación [4]. Cabe destacar que los valores de densidad se obtienen del simulador de procesos *Aspen Hysys*. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 6.

$$Q = \frac{m}{\rho} \quad [4]$$

Donde:

- Q es el caudal volumétrico, en m³/h.
- m es el caudal másico, en kg/h.
- ρ es la densidad, en kg/m³.

Tabla 6. Parámetros relativos al funcionamiento de las bombas.

Bombas	ρ (kg/m ³)	m (kg/h)	Q (m ³ /h)	Q (L/s)	$P_{succión}$ (bar)	$P_{descarga}$ (bar)
P-301	881,43	2.328,35	2,64	0,73	1,07	1,14
P-302	805,35	860,68	1,07	0,30	1,00	1,03
P-303	805,35	1.395,26	1,73	0,48	1,00	1,03
P-304	942,55	1.445,10	1,53	0,43	1,14	1,18

6. Intercambiadores de calor

En esta sección se mostrará el procedimiento seguido para el diseño de los distintos intercambiadores de calor presentes en este proyecto. Cabe destacar que se dividirán en dos tipos

de intercambiadores. Siendo el primer tipo, los simples sin cambio de fase mientras los segundos presentan un cambio de fase. Un ejemplo de estos son los condensadores presentes en la sección de separación y purificación.

Para todos los intercambiadores se sigue la metodología expuesta en el diseño del reactor R-201 que siguen los siguiente diez pasos: (1)

1. Determinar las condiciones de operación del equipo, como los caudales de los fluidos y las temperaturas.
2. Buscar las propiedades físicas y termodinámicas de los fluidos. Por ejemplo, la densidad, viscosidad y la conductividad térmica.
3. Establecer la configuración del intercambiador.
4. Estimar un valor inicial del coeficiente global, U .
5. Determinar la diferencia de temperaturas media logarítmica, ΔT_{ml} .
6. Calcular el área de transferencia requerida en el sistema.
7. Realización del diseño del equipo.
8. Calcular los coeficientes de convección de los ambos fluidos.
9. Determinar el coeficiente global de transferencia de calor y verificar que la diferencia sea despreciable respecto al valor estimado en el paso 4. Si es significativa la diferencia se vuelve al paso 6 empleando el valor de U calculado.
10. Calcular la caída de presión en los tubos y en la carcasa. Si da un valor mayor al permitido se vuelve a los pasos 7 o 4 o 3, siguiendo ese orden.

Concretamente la diferencia en diseño respecto al reactor R-201 se presenta en las correlaciones que han de ser empleadas para el diseño de los tubos. Por lo tanto, para el diseño de la carcasa se sigue empleando la metodología mostrada en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201*.

De modo que se presentará a continuación solo las correlaciones que han de utilizar para la sección de tubos de estos intercambiadores. Posteriormente, se mostrarán los resultados para cada uno de los intercambiadores de calor de la planta. No obstante, estos resultados son estimaciones a modo de orientación y pueden ser posteriormente optimizados.

6.1. Intercambiadores sin cambio de fase

Al igual que en el diseño del reactor R-201, lo primero que ha de calcularse es el calor que se ha de retirar o aportar en cada intercambiador de calor. Este cálculo se puede realizar conociendo la temperatura del fluido de proceso de entrada al equipo y la temperatura requerida a la salida, junto con su calor específico medio como se muestra en la Ecuación [5].

$$Q_{retirar} = m_{fluido} \cdot Cp_{fluido} \cdot (T_1 - T_2) \quad [5]$$

Cabe destacar que en caso de que se emplee un intercambiador de calor para aportar energía, la diferencia de temperaturas sería $(t_2 - t_1)$, dado que este sería el fluido frío.

Por consiguiente, se calcula la cantidad de fluido refrigerante o calefactor (según corresponda) empleando las Ecuaciones [6] y [7].

$$Q_{retirado} = -Q_{absorbido} \quad [6]$$

$$Q_{absorbido} = m_{utilidad} \cdot Cp_{utilidad} \cdot (t_2 - t_1) \quad [7]$$

Ahora se prosigue calculando la temperatura media logarítmica y su factor de corrección F_t , siguiendo las Ecuaciones [46], [47], [48], [49] y [50] del *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201*.

Llegados a este punto, se emplea la herramienta de *Aspen Hysys* para determinar los parámetros necesarios para los fluidos a sus condiciones de operación. En particular se obtienen los valores de densidad (ρ), calor específico (C_p), viscosidad (μ) y el coeficiente térmico (k). Conociendo los fluidos que intercambian calor, mediante valores recomendados se estima un valor del coeficiente global de intercambio de calor y se emplea la Ecuación [8] para determinar el área requerida de intercambio.

$$Q = U_{propuesto} \cdot A_{requerida} \cdot \Delta T_{ml}^* \quad [8]$$

Conocida el área es posible calcular el número de tubos que ha de tener el equipo. Para ello, se emplea la Ecuación [9]. Cabe destacar que se selecciona las dimensiones de los tubos previamente siguiendo las dimensiones estándar del Schedule 40, para conducciones de acero. Siendo d_t y d_i los diámetros externos e internos, respectivamente. Asimismo, se debe seleccionar según estándares TEMA la longitud de los tubos (L).

$$A_{disponible} = N_p \cdot N_t \cdot \pi \cdot d_t \cdot L \quad [9]$$

Siendo N_p el número de pasos por tubos y N_t el número de tubos. Conociendo las dimensiones y el número de tubos al igual que las características de los fluidos, es posible determinar el coeficiente de convección del lado de los tubos calculando los módulos adimensionales del Reynolds, Nusselt y Prandtl. Estos se muestran en las Ecuaciones [10], [11] y [12].

$$Re_p = \frac{d_i \cdot \rho_{fluido} \cdot v_{fluido}}{\mu_{fluido}} \quad [10]$$

$$Pr = \frac{C_{p,fluido} \cdot \mu_{fluido}}{k_{fluido}} \quad [11]$$

$$Nu = \frac{d_i \cdot h_i}{k_{fluido}} = j_h \cdot Re \cdot Pr^{0,33} \quad [12]$$

Como se puede observar se requieren dos parámetros más, la velocidad del fluido y el factor de transferencia para poder calcular el módulo de Nusselt. La velocidad se calcula con la Ecuación [13], mientras que el factor se obtiene de la Figura 2, según el módulo de Reynolds obtenido.

$$v_{fluido} = \frac{\frac{\text{Flujo másico}}{\rho_{fluido}}}{N_t \cdot \pi \cdot \frac{d_i^2}{4}} \quad [13]$$

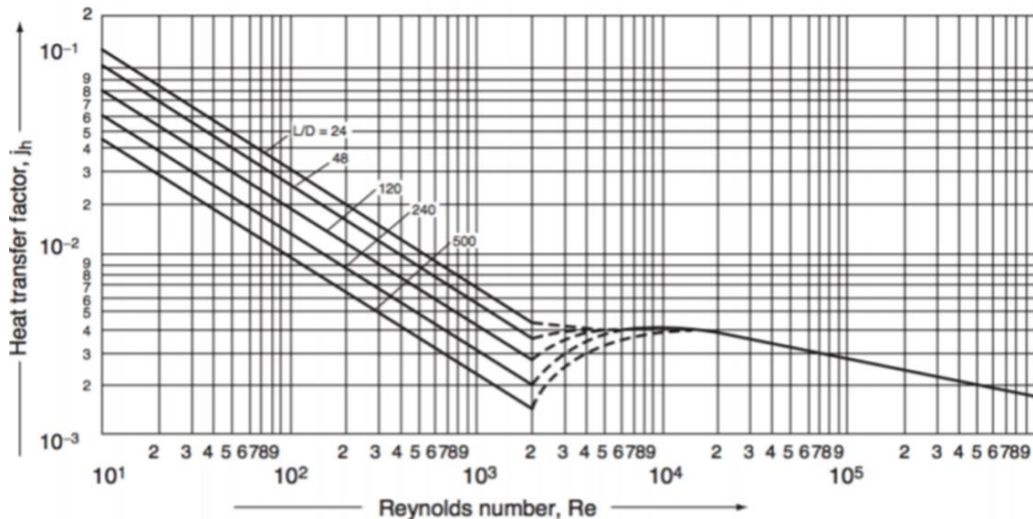


Figura 2. Factor j_h respecto al módulo de Reynolds (1).

Con el módulo de Nusselt calculado es posible despejar el valor del coeficiente de convección de la Ecuación [12]. Este valor junto con el correspondiente para el lado de carcasa será empleado para calcular el valor del coeficiente global de transmisión de calor. Con el valor calculado se comprobará si es válido el valor estimado previamente.

Por último, ha de comprobarse que la caída de presión esté entre el rango permitido. De no ser así, se debe iterar cambiando las dimensiones que se han seleccionado de los tubos. Para el cálculo de la caída de presión se emplea la Figura 3, para obtener el factor de fricción, que depende del módulo de Reynolds, y posteriormente se emplea la Ecuación [14].

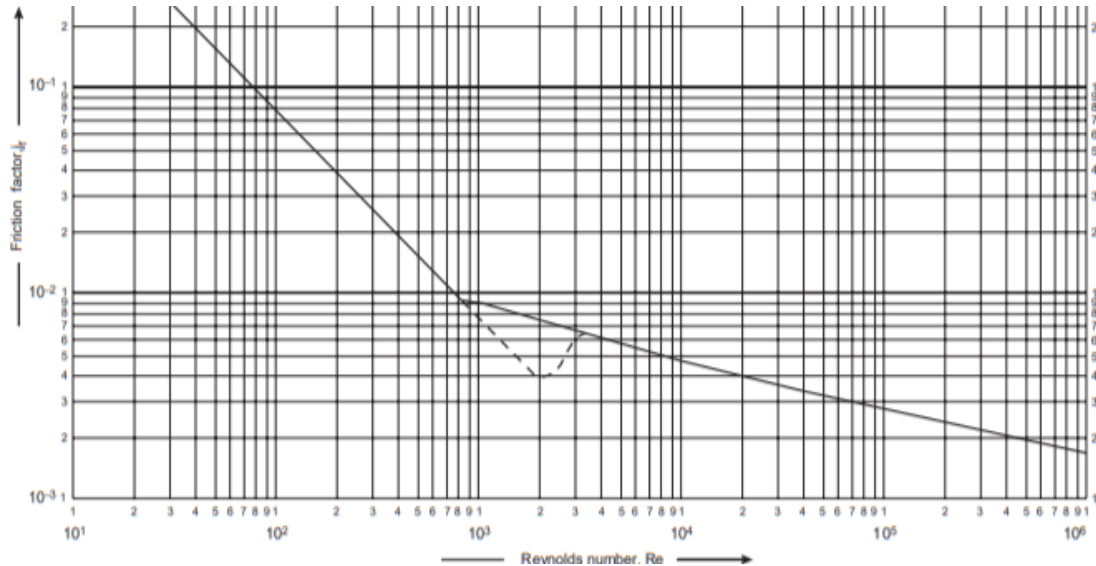


Figura 3. Factor de fricción j_f en función del Reynolds para los tubos (1).

$$\Delta P = N_p \cdot \left[8 \cdot j_f \cdot \frac{L}{d_i} \cdot \left(\frac{\mu_t}{\mu_w} \right)^{-0,14} + 2,5 \right] \cdot \frac{\rho_{fluido} \cdot v_{fluido}^2}{2} \quad [14]$$

Para gases, la caída de presión permisible varía según la presión de operación. Se muestra en la Tabla 7 los valores aceptados para los gases de este proyecto.

Tabla 7. Caída de presión permitidas. Elaboración propia, adaptada de (1)

Presión de operación	Caída de presión permitida
De 1 a 2 bar	$0,50 \cdot \text{Presión manométrica del sistema}$
De más de 10 bar	$0,10 \cdot \text{Presión manométrica del sistema}$

Con los tubos dimensionados ha de realizarse el dimensionamiento de la carcasa del equipo. Para ello se emplean las ecuaciones mostradas en el apartado 10.2. *Diseño de la carcasa del Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201*. Posteriormente, con el valor calculado del coeficiente de convección en la carcasa se debe calcular el coeficiente global de transmisión de calor, como se muestra en *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201*.

Como norma general será aceptado una diferencia entre el 0 y 30% entre el valor estimado y el valor calculado de dicho coeficiente (1). A continuación, se muestran los intercambiadores a los que se les ha aplicado este método, junto con los resultados obtenidos.

6.1.1. Intercambiador de calor E-101

Este intercambiador de calor es empleado en la sección de acondicionamiento de materias primas con el objetivo de calentar la mezcla. Debido al drástico cambio de temperatura que se consigue al disminuir la presión del propileno en la válvula VLV-101, la temperatura de entrada de la mezcla es de 28,44 °C. Esta temperatura debe aumentarse hasta 189,22 °C, por lo que se emplearán sales fundidas al igual que en el reactor R-201. Estas sales están disponibles desde 175 a 500 °C.

Concretamente se ha seleccionado unas condiciones de operación de 400 a 380 °C, para la entrada y salida de estas sales en el intercambiador. Asimismo, se ha decidido colocar por el lado de los tubos la corriente gaseosa que contiene las materias primas. Se muestran a continuación los resultados del diseño básico del equipo en la Tabla 8, obteniendo los parámetros de las corrientes del simulador *Aspen Hysys* y la de bibliografía (5).

Tabla 8. Resumen de los parámetros del intercambiador E-101.

Q= 748,06 kJ/s		Carcasa	Tubos
Fluido		Sales Fundidas	Corriente 7
Caudal	kg/s	23,98	3,45
Densidad	kg/m ³	1.794,22	1,54
Viscosidad	Pa·s	1,90·10 ⁻³	2,07·10 ⁻⁵
Capacidad calorífica	kJ/(kg·K)	1,56	1,35
Conductividad	W/(m·K)	0,48	5,16·10 ⁻²
Velocidad másica	kg/(m ² ·s)	810,26	-
Velocidad	m/s	0,45	24,76
Reynolds		14.640,79	75.214,24
Prandtl		6,17	0,54
Nusselt		133,44	183,89
Coefficiente convección	W/(m ² ·°C)	1.084,42	325,89
Caída de presión	bar	0,01	0,02
Ensuciamiento	W/(m ² ·°C)	4.000,00	5.000,00
Parámetros de construcción			
Temperatura media logarítmica corregida, °C	269,24	Pitch, m	0,06
Coefficiente global de transferencia, W/(m ² ·°C)	150,00	Claridad, mm	13,94
Área de intercambio, m ²	19,16	Diámetro interno de la carcasa, m	0,62
Longitud de los tubos, m	1,83	Diámetro equivalente	0,03
Número de tubos	12,00	Corte	40%
Diámetro interno de los tubos, mm	48,30	Espaciado entre baffles	0,24
Diámetro externo de los tubos, mm	40,90	Número de baffles	7,00
Diámetro del haz de tubos, m	0,59	Área de flujo cruzado, m ²	2,96·10 ⁻³

Se verificó el coeficiente global de transmisión de calor usando la Ecuación [75] mostrada en *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201*. Obteniéndose una diferencia del 21,47%, que está próximo al límite superior aceptado para esta diferencia, pero al tratarse de solo una estimación y no un diseño riguroso se da como válido.

6.1.2. Intercambiador de calor E-102

Este intercambiador es empleado para aumentar la temperatura de la corriente 8 hasta 350 °C, que es la requerida en el reactor R-201, empleando nuevamente sales fundidas de 400 a 380 °C. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 9.

Nuevamente se calculó el coeficiente global de transmisión de calor obteniendo una diferencia del 8,23%, por lo que se ha dado como válido.

Tabla 9. Resumen de los parámetros del intercambiador E-102.

Q= 804,87 kJ/s		Carcasa	Tubos
Fluido		Sales Fundidas	Corriente 8
	kg/s	25,79	3,45
Densidad	kg/m ³	1.794,22	1,06
Viscosidad	Pa·s	1,90·10 ⁻³	2,72·10 ⁻⁵
Capacidad calorífica	kJ/(kg·K)	1,56	1,45
Conductividad	W/(m·K)	0,48	6,66·10 ⁻²
Velocidad másica	kg/(m ² ·s)	759,91	-
Velocidad	m/s	0,42	24,29
Reynolds		9.495,13	25.146,58
Prandtl		6,17	0,59
Nusselt		102,12	80,29
Coefficiente convección	W/(m ² ·°C)	1.200,09	218,42
Caída de presión	bar	0,23	0,02
Ensuciamiento	W/(m ² ·°C)	4.000,00	5.000,00
Parámetros de construcción			
Temperatura media logarítmica corregida, °C	87,56	Pitch, m	0,04
Coefficiente global de transferencia, W/(m ² ·°C)	150,00	Claridad, mm	15,37
Área de intercambio, m ²	61,70	Diámetro interno de la carcasa, m	0,77
Longitud de los tubos, m	2,44	Diámetro equivalente	0,02
Número de tubos	241,00	Corte	30%
Diámetro interno de los tubos, mm	33,40	Espaciado entre baffles	0,22
Diámetro externo de los tubos, mm	26,64	Número de baffles	10,00
Diámetro del haz de tubos, m	0,74	Área de flujo cruzado, m ²	3,30·10 ⁻²

6.1.3. Intercambiador de calor E-301

El objetivo de este intercambiador es cambiar la temperatura de la corriente de salida del reactor para adecuarla a la requerida por la columna *quench* T-301. Se debe disminuir su temperatura de 350 a 120 °C y por lo tanto se empleará agua de refrigeración a las temperaturas de 10 a 15 °C entrada y salida, respectivamente. Los resultados se muestran en la Tabla 10.

Tabla 10. Resumen de los parámetros del intercambiador E-301.

Q= 1.133,41 kJ/s		Carcasa	Tubos
Fluido		Agua	Corriente 10
Caudal	kg/s	54,43	3,45
Densidad	kg/m ³	1.015,90	1,14
Viscosidad	Pa·s	1,21·10 ⁻³	2,33·10 ⁻⁵
Capacidad calorífica	kJ/(kg·K)	4,16	1,43
Conductividad	W/(m·K)	0,59	5,99·10 ⁻²
Velocidad másica	kg/(m ² ·s)	603,05	-
Velocidad	m/s	0,59	18,97
Reynolds		25.864,94	58.025,96
Prandtl		8,49	0,55
Nusselt		193,88	142,93
Coefficiente convección	W/(m ² ·°C)	1.286,75	136,66
Caída de presión	bar	0,09	0,01
Ensuciamiento	W/(m ² ·°C)	5.000,00	5.000,00
Parámetros de construcción			
Temperatura media logarítmica corregida, °C	198,99	Pitch, m	0,09
Coefficiente global de transferencia, W/(m ² ·°C)	100,00	Claridad, mm	15,87
Área de intercambio, m ²	58,19	Diámetro interno de la carcasa, m	0,82
Longitud de los tubos, m	4,88	Diámetro equivalente	0,05
Numero de tubos	52,00	Corte	70%
Diámetro interno de los tubos, mm	73,00	Espaciado entre baffles	0,55
Diámetro externo de los tubos, mm	62,68	Numero de baffles	8,00
Diámetro del haz de tubos, m	0,79	Área de flujo cruzado, m ²	9,00·10 ⁻²

Se ha decidido que el fluido con la acroleína sea el que circule por tubos dado que se encuentra a una mayor presión y temperatura. Cabe destacar que los parámetros de los fluidos son obtenidos como un valor medio de los valores para las temperaturas de entrada y salida sacados de *Aspen Hysys*. La diferencia del coeficiente global de transmisión propuesto esta vez ha sido del 0,1%, considerándolo como válido.

6.1.4. Intercambiador de calor E-302

Este intercambiador E-302 se encuentra a la salida gaseosa de la columna *quench* T-301 para adecuar la temperatura de esta corriente a la requerida para optimizar la operación en el siguiente equipo, la columna de absorción T-302. Como fluido refrigerante se emplea agua de refrigeración, con una temperatura de entrada de 10 °C la cual es calentada hasta 15 °C. Con esta agua es posible enfriar la corriente del proceso que circula por los tubos desde 48,09 hasta 20 °C.

Los resultados obtenidos se muestran a continuación en la Tabla 11. En este caso, la diferencia entre valor calculado del coeficiente global de transmisión de calor y el estimado ha sido de tan solo 6,03%, considerándose por lo tanto como una buena aproximación.

Tabla 11. Resumen de los parámetros del intercambiador E-302.

Q= 125,92 kJ/s		Carcasa	Tubos
Fluido		Agua	Corriente 14
Caudal	kg/s	6,05	3,35
Densidad	kg/m ³	1.015,90	1,08
Viscosidad	Pa·s	1,21·10 ⁻³	1,67·10 ⁻⁵
Capacidad calorífica	kJ/(kg·K)	4,16	1,34
Conductividad	W/(m·K)	0,59	4,32·10 ⁻²
Velocidad másica	kg/(m ² ·s)	373,91	-
Velocidad	m/s	0,37	31,02
Reynolds		10.610,75	82.373,87
Prandtl		8,49	0,52
Nusselt		126,82	198,19
Coeficiente convección	W/(m ² ·°C)	1.272,19	208,98
Caída de presión	bar	0,20	0,03
Ensuciamiento	W/(m ² ·°C)	5.000,00	5.000,00
Parámetros de construcción			
Temperatura media logarítmica corregida, °C	15,12	Pitch, m	0,06
Coeficiente global de transferencia, W/(m ² ·°C)	150,00	Claridad, mm	14,22
Área de intercambio, m ²	56,28	Diámetro interno de la carcasa, m	0,65
Longitud de los tubos, m	4,88	Diámetro equivalente	0,03
Número de tubos	76,00	Corte	20%
Diámetro interno de los tubos, mm	48,30	Espaciado entre <i>baffles</i>	0,12
Diámetro externo de los tubos, mm	40,94	Número de <i>baffles</i>	38,00
Diámetro del haz de tubos, m	0,62	Área de flujo cruzado, m ²	1,60·10 ⁻²

6.2. Condensadores

El diseño de un condensador es similar al mostrado para los demás intercambiadores de calor. Sin embargo, estos deben tener un espaciado de deflectores (B) mayor, normalmente su valor es el mismo que el diámetro de la carcasa (1).

La condensación puede ocurrir dentro o fuera de los tubos. Asimismo, estos equipos pueden disponer de una orientación vertical o horizontal. Lo más habitual en la industria es que se trate de un condensador horizontal con condensación en parte de la carcasa. Otra disposición habitual en la industria son los verticales, pero con la condensación en el lado de los tubos (1). Para este tipo de equipos solo se va a estimar sus características con el objetivo de que más adelante sea

posible obtener un coste aproximado. Por consiguiente, solo se considera un simple diseño térmico.

Por lo tanto, dado que no suele emplearse la condensación en los tubos en los intercambiadores horizontal, se ha optado por dimensionarlo situando la condensación en la parte de la carcasa. Lo primero que ha de calcularse es el calor transferido (Q_v). El cual se calcula empleando la Ecuación [15], usando los datos de flujo másico (m) y la entalpía del vapor y del condensado (H_v y h_c , respectivamente) que ya han sido calculadas para el *Anexo I: Balances de materia y energía*.

$$Q_v = m \cdot (H_v - h_c) \quad [15]$$

Conociendo el calor transferido es posible determinar el caudal másico de refrigerante necesario, empleando la Ecuación [16].

$$m_{utilidad} = \frac{Q_v}{(t_2 - t_1) \cdot Cp_{utilidad}} \quad [16]$$

Ahora, al igual que se mostró anteriormente, se debe calcular el factor de corrección de la temperatura usando las Ecuaciones [46], [47], [48], [49] y [50] del *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201*. Asumiendo un valor del coeficiente de transmisión global, se calcula el área requerida siguiendo la Ecuación [17].

$$A = \frac{Q_v}{U \cdot \Delta T_{ml}^*} \quad [17]$$

Se prosigue calculando el área superficial (A_s) de un tubo con la Ecuación [18] (seleccionando su diámetro del Schedule 40 de acero) y se usa en la Ecuación [19] para determinar la cantidad de tubos requeridos.

$$A_s = \pi \cdot dt \cdot L \quad [18]$$

$$N_t = \frac{A}{A_s} \quad [19]$$

Para el cálculo del pitch (P_t) y el diámetro del haz de tubos (D_b) se emplean las fórmulas convencionales mostradas en las Ecuaciones [20] y [21].

$$P_t = 1,25 \cdot dt \quad [20]$$

$$D_b = dt \cdot \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{1/n_1} \quad [21]$$

Se ha mostrado en el diseño de la carcasa del reactor los valores típicos de K_1 y n_1 dependiendo del número de pasos y la disposición de los tubos. Siendo la cantidad de tubos en la fila central la división entre el diámetro del haz de tubos y el pitch.

- **Coeficiente en el lado de la carcasa**

Lo primero que se ha de determinar es la temperatura de la pared (T_w) y para ello se ha de estimar un valor del coeficiente de condensación (h_c), empleando las Ecuaciones [22], [23] y [24] (1).

$$T_{media carcasa} = T_{mc} = \frac{T_1 - T_2}{2} \quad [22]$$

$$T_{media tubos} = T_{mt} = \frac{T_1 - T_2}{2} \quad [23]$$

$$(T_{mc} - T_w) \cdot h_c = (T_{mc} - T_{mt}) \cdot U \quad [24]$$

Al determinar la temperatura de la pared, se hace una media entre esta y la temperatura media de la carcasa para buscar los parámetros del fluido a esta temperatura. Los parámetros son obtenidos mediante la herramienta de *Aspen Hysys*, concretamente se obtendrá la viscosidad (μ_l), la densidad (ρ_l y ρ_v) y el coeficiente de conducción térmica (k_l).

Por último, se debe calcular la densidad del vapor a esta temperatura media y comprobar que el coeficiente de condensación no necesite ser corregido. Para el cálculo del coeficiente de condensación, primero se determina la tasa de condensado por unidad de perímetro del tubo (Γ_h) usando la Ecuación [25].

$$\Gamma_h = \frac{m}{L \cdot N_t} \quad [25]$$

Asimismo, es necesario calcular el número promedio de tubos que se encuentran en la fila vertical de tubos. Este valor se puede estimar como dos tercios del número de tubos en la fila central, como se muestra en la Ecuación [26]. Con estos parámetros es posible calcular el coeficiente utilizando la Ecuación [27].

$$N_{mr} = \frac{D_b}{P_t} \cdot \frac{2}{3} \quad [26]$$

$$h_c = 0.95 \cdot k_l \cdot \left[\frac{\rho_l \cdot (\rho_l - \rho_v) \cdot g}{\mu_l \cdot \Gamma_h} \right]^{1/3} \cdot N_{mr}^{-1/6} \quad [27]$$

Si este valor calculado se aleja del estimado anteriormente, ha de repetirse los cálculos con este nuevo valor.

- **Coeficiente en el lado de los tubos**

En los tubos circulará el agua de refrigeración que permite, mediante la transferencia de calor, que el fluido de la carcasa condense. Para calcular este coeficiente, primero se calcula la sección transversal del área del tubo con la Ecuación [28] (1).

$$A_{cross} = \frac{\pi}{4} \cdot d_i^2 \cdot \frac{N_t}{4} \quad [28]$$

Asimismo, con la densidad del agua a las condiciones de operación, se calcula su velocidad por los tubos como se muestra en la Ecuación [29]. Finalmente, se emplea la fórmula de Eagle y Ferguson que es precisa para una estimación del coeficiente cuando se utiliza agua. Esta fórmula se muestra en la Ecuación [30].

$$v_{utilidad} = \frac{m}{\rho_{utilidad}} \cdot \frac{1}{A_{cross}} \quad [29]$$

$$h_i = \frac{4200 \cdot (1,35 + 0,02 \cdot T) \cdot v_{utilidad}^{0,8}}{d_i^{0,2}} \quad [30]$$

- **Comprobación del coeficiente global de transmisión de calor y las caídas de presiones.**

Se debe calcular el coeficiente global de transmisión de calor empleando la Ecuación [75] mostrada en *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201*. En caso de que el valor calculado y el estimado tengan entre si una diferencia superior al 30%, ha de realizarse los cálculos con el nuevo valor, siguiendo el método iterativo. Por otro lado, para el cálculo de la caída de presión en la carcasa se selecciona el valor típico de corte de *baffles* del 45%. Con este

se calcula, como se ha mostrado anteriormente, sus dimensiones, como por ejemplo el número de *baffles*, el diámetro interno de la carcasa considerando la claridad y el diámetro equivalente (1).

En particular tiene gran relevancia el valor del área de flujo cruzado, la velocidad másica y lineal del fluido (A_s , G_s y v_s , respectivamente). Todo el procedimiento ha sido mostrado en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte B: Reactor R-201*. Sin embargo, después de calcular el módulo de Reynolds y el factor j_f se emplea la Ecuación [31] para determinar la caída de presión. Esta varía levemente de la empleada anteriormente dado que se está despreciando la corrección por la viscosidad y siguiendo las recomendaciones se toma un valor del 50% del calculado respecto al flujo de entrada (1). Por otro lado, para la caída de presión del lado de los tubos se emplea la Figura 3 y la Ecuación [14] que se han mostrado anteriormente.

$$\Delta P = \frac{1}{2} \cdot \left[8 \cdot j_f \cdot \frac{D_s}{d_e} \cdot \frac{L}{D_s} \cdot \frac{\rho_{vapor} \cdot v_s^2}{2} \right] \quad [31]$$

6.2.1. Condensador E-303

Este equipo tiene como objetivo condensar la corriente de salida de la columna de desorción T-303, de forma que llegue a la entrada de la columna de destilación T-304 como líquido saturado. Para ello en el intercambiador habrá una condensación completa, pasando asimismo de una temperatura de entrada de 90,14 a 53,30 °C. Se emplea agua de refrigeración, y la temperatura de entrada y salida 10 y 30 °C, respectivamente. Los resultados se muestran en la Tabla 12.

Tabla 12. Resumen de los parámetros del intercambiador E-303.

Q= 848,58 kJ/s		Carcasa	Tubos
Fluido		Corriente 22	Agua
Caudal	kg/s	0,65	10,19
Densidad del líquido	kg/m³	377,50	1.015,90
Densidad del vapor	kg/m³	1,94	-
Viscosidad	Pa·s	1,09·10 ⁻³	1,21·10 ⁻⁵
Capacidad calorífica	kJ/(kmol·K)	88,88	4,16
Conductividad	W/(m·K)	0,42	0,59
Entalpia del vapor	kJ/kmol	45.217,31	-
Entalpia del líquido	kJ/kmol	6.155,18	-
Velocidad másica	kg/(m²·s)	15,36	-
Velocidad	m/s	7,89	0,31
Reynolds		423,14	82.373,87
Coefficiente convección	W/(m²·°C)	381,14	5.590,93
Caída de presión	bar	0,02	0,01
Ensuciamiento	W/(m²·°C)	5.000,00	5.000,00
Parámetros de construcción			
Temperatura media logarítmica corregida, °C	43,99	Pitch, m	0,05
Coefficiente global de transferencia, W/(m²·°C)	280,00	Claridad, mm	15,10
Área de intercambio, m²	65,50	Diámetro interno de la carcasa, m	0,74
Longitud de los tubos, m	3,66	Número promedio de tubos	9,00
Número de tubos	135,00	Corte	45%
Diámetro interno de los tubos, mm	42,20	Espaciado entre <i>baffles</i>	0,26
Diámetro externo de los tubos, mm	45,08	Número de <i>baffles</i>	12,00
Diámetro del haz de tubos, m	0,71	Área transversal, m²	3,30·10 ⁻²
Tasa de condensado, kg/(h·m)	4,71	Área de flujo cruzado, m²	4,00·10 ⁻²

La diferencia entre el coeficiente global de transmisión de calor calculado y el estimado previamente ha sido solo un 2,66 %. Validando de esta forma los resultados obtenidos.

6.2.2. Condensador E-304

El condensador E-304 se sitúa a la salida por cabezas de la columna de destilación T-304 para mantener el reflujo necesario de la columna. El balance de energía de este equipo se muestra

rigurosamente en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte D: Columna de destilación T-304*, por lo que se mostrará a continuación una aproximación básica de sus dimensiones empleando esos resultados.

Cabe destacar, que la temperatura de entrada y salida de la corriente de proceso es 52,03 y 51,99 °C, respectivamente. Para enfriar esta corriente se emplea agua con una temperatura de entrada de 10 °C calentándose hasta 30 °C. A continuación, se muestran los resultados obtenidos en la Tabla 13.

Tabla 13. Resumen de los parámetros del intercambiador E-304.

Q= 345,91 kJ/s		Carcasa	Tubos
Fluido		Corriente 25	Agua
Caudal	kg/s	0,62	4,15
Densidad del líquido	kg/m ³	805,35	1.015,90
Densidad del vapor	kg/m ³	0,98	-
Viscosidad	Pa·s	2,73·10 ⁻²	1,21 ·10 ⁻⁵
Conductividad	W/(m·K)	0,18	0,59
Entalpía del vapor	kJ/kmol	4620,74	-
Entalpía del líquido	kJ/kmol	6486,98	-
Velocidad másica	kg/(m ² ·s)	14,16	-
Velocidad	m/s	14,40	0,31
Reynolds		1.229,69	3.077,94
Coefficiente convección	W/(m ² ·°C)	303,87	3.401,02
Caída de presión	bar	0,01	0,01
Ensuciamiento	W/(m ² ·°C)	5.000,00	5.000,00
Parámetros de construcción			
Temperatura media logarítmica corregida, °C	30,93	Pitch, m	0,04
Coefficiente global de transferencia, W/(m ² ·°C)	250,00	Claridad, mm	15,27
Área de intercambio, m ²	44,72	Diámetro interno de la carcasa, m	0,76
Longitud de los tubos, m	1,83	Número promedio de tubos	12,00
Número de tubos	234,00	Corte	45%
Diámetro interno de los tubos, mm	33,40	Espaciado entre baffles	0,29
Diámetro externo de los tubos, mm	24,30	Número de baffles	6,00
Diámetro del haz de tubos, m	0,73	Área transversal, m ²	2,70 ·10 ⁻²
Tasa de condensado, kg/(h·m)	5,24	Área de flujo cruzado, m ²	4,40 ·10 ⁻²

En este condensador la diferencia entre el coeficiente global de transmisión de calor calculado y el estimado ha sido casi nulo, siendo este 10,95%. Comprobando por lo tanto que los resultados son aceptables.

6.3. Caldera E-305

El intercambiador E-305 corresponde a la caldera parcial empleada en la columna de destilación T-304. La caldera que se emplea es de tipo *kettle* y utiliza vapor de agua de baja presión para aportar el calor necesario. El objetivo es evaporar parte de la corriente que sale de colas de la columna. El balance de energía ha sido presentado con precisión en *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte D: Columna de destilación T-304*. Por lo tanto, para una estimación de su dimensión se empleará la Ecuación [8]. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 14.

Tabla 14. Valores de la caldera E-305.

Parámetro	Valor
Q (kW)	361,11
U (W·m ⁻² ·°C ⁻¹)	450,00
ΔT _{ml} * (°C)	44,87
Arequerida (m ²)	17,20

7. Columna *quench* T-301

La columna *quench* T-301 se encuentra justo después del reactor R-201 y antes de la columna de absorción T-302. Una columna *quench*, como se puede ver en la Figura 4, resulta diferente a las columnas convencionales y, es por ello que, para efectos del dimensionado básico del equipo se aproximará a una columna de platos. Siguiendo esta línea, se calculará la masa de la carcasa de este equipo y un estimado de número de platos, siendo estos los parámetros necesarios para estimar su precio.

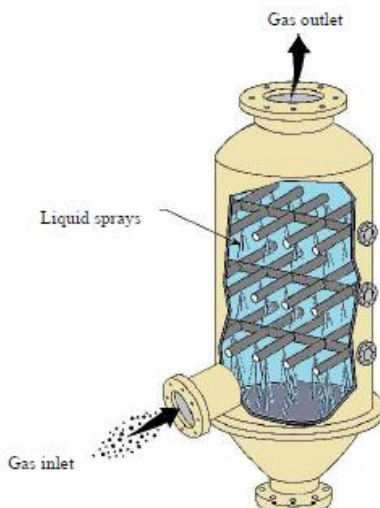


Figura 4. Ejemplo de columna *quench* (6).

En el simulador *Aspen Hysys* se estudiará el funcionamiento de la columna, de modo que se obtengan las condiciones de las corrientes de entrada para conseguir las condiciones requeridas en las corrientes de salida.

Una vez realizada la simulación, se decide utilizar como superficie de contacto platos perforados. El diámetro de la columna y el número de platos teóricos se obtuvieron mediante la simulación. Posteriormente, siguiendo lo establecido en heurística, se fija el espaciado entre platos en 0,6 metros (7). La eficiencia de la columna se estima en 30%, y la caída de presión existente por plato de 0,03 bar.

Haciendo uso de la Ecuación [32] se obtiene el número de platos reales de la columna, y para el cálculo de la caída de presión se utiliza la Ecuación [33]. Obteniendo el valor de la caída de presión, es posible calcular la presión en la salida de la columna, y siendo esta la presión de operación más alta, se estima la presión de diseño de la columna, tal como se explica en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte A: Diseño Mecánico*.

$$E_o = \frac{\text{número de platos teóricos}}{\text{número de platos reales}} \quad [32]$$

$$\Delta P_{\text{columna}} = \text{número de platos reales} \cdot \Delta P_{\text{plato}} \quad [33]$$

A continuación, se procede a estimar la altura de la columna ya que se conoce el número de platos reales y el espaciado entre platos. Como esta columna no es objeto de diseño en el presente proyecto y no se detalla la estructura de los platos, como primera aproximación se seleccionará el mismo espesor del plato que el utilizado en la columna de destilación T-304, explicada en detalle en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte D: Columna de destilación T-304*.

Por último, se deberá estimar el espesor de la carcasa de la columna, utilizando las ecuaciones para el cálculo de espesores mínimos de carcasa para tensión radial y longitudinal, mostradas en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte A: Diseño Mecánico*. Como en los equipos anteriores, se seleccionará el espesor mayor, añadiéndole el factor de corrosión de 4 mm. Siendo el material de construcción acero inoxidable AISI 304. Por último, con la Ecuación [34] se calcula la masa de la carcasa de la columna.

$$M_c = \pi \cdot D_i \cdot H_v \cdot t \cdot \rho_m \quad [34]$$

Donde:

- M_c es la masa de la carcasa, en kg.
- D_i es el diámetro interno de la columna, en m.
- H_v es la altura de la columna, en m.
- t es el espesor de la carcasa, en m.
- ρ_m es la densidad del material de la columna, en kg/m³.

En la Tabla 15 se muestran los datos utilizados para la realización de los cálculos explicados y en la Tabla 16, los resultados obtenidos.

Tabla 15. Datos para el dimensionamiento de la columna quench T-301.

Parámetro	Valor
Platos teóricos	3,00
Presión en cabezas (bar)	1,60
Diámetro de la columna (m)	2,00
Espesor del plato (mm)	1,98
Densidad del material (kg/m ³)	7.900,00
Esfuerzo permisible (bar)	1.174,73
Examen radiográfico	0,85

Tabla 16. Resultados obtenidos del dimensionamiento de la columna quench T-301.

Parámetro	Valor
Platos reales	10,00
Caída de presión (bar)	0,30
Presión en colas (bar)	1,90
Presión de diseño (bar)	3,62
Altura de la columna (m)	7,50
Espesor de carcasa (mm)	7,64
Masa de la carcasa (kg)	2.843,03

8. Columna de desorción T-303

La columna de desorción T-303 se encuentra entre la columna de absorción T-302 y la columna de destilación T-304. Para su dimensionamiento, la variable a estimar será la masa de la carcasa de la columna. Asimismo, se determinará el dispositivo de contacto entre las fases en el interior de la columna, evaluando en *Aspen Hysys* su funcionamiento, obteniendo las condiciones de entrada a la columna, de modo que se alcance la composición requerida en las corrientes de salida.

Una vez simulado, se decide que el dispositivo de contacto a emplear sean platos, y mediante la simulación se estima la cantidad de platos teóricos que serán necesarios, así como también el

diámetro de la columna. Según heurística, se fija el espaciado entre platos en 0,6 metros y la caída de presión existente por plato de 0,007 bar (7). La eficiencia de la columna se estima en 30%.

Para el cálculo del número de platos reales que tiene la columna de desorción T-303, se emplea la Ecuación [32], conociendo la eficiencia del equipo, E_o . Asimismo, se calculará la caída de presión existente en la columna, utilizando la Ecuación [33]. Una vez conocida la caída de presión existente, se calcula la presión en colas de la columna, y se estima la presión de diseño de la columna, tal como se explica en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte A: Diseño Mecánico*.

Por otro lado, se puede estimar la altura de la columna de desorción conociendo el número de platos reales y el espaciado entre platos. Como esta columna no es objeto de diseño en el presente proyecto y no se detalla la estructura de los platos, como primera aproximación se seleccionará el mismo espesor del plato que para la columna de destilación T-304, explicada en detalle en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte D: Columna de destilación T-304*. De esta manera, el espesor de cada plato se toma en cuenta para la estimación de la altura de la columna de desorción T-303. Además, en la parte superior de la columna, se dejará un espaciado igual al de los platos, y en la parte inferior de la columna el espaciado será el doble del espaciado entre platos.

También, se deberá estimar el espesor de la carcasa de la columna, haciendo uso de las ecuaciones para el cálculo de espesores mínimos de carcasa para tensión radial y longitudinal, mostradas en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte A: Diseño Mecánico*. Se seleccionará el valor más alto obtenido, incluyendo un factor de corrosión de 4 mm. Y, como material de construcción de la columna de desorción, se selecciona acero inoxidable AISI 304. Una vez realizados estos cálculos, se procede a estimar la masa de la carcasa de la columna de desorción T-303, utilizando la Ecuación [34], mostrada anteriormente. En la Tabla 17, se resumen los datos utilizados para la realización de los cálculos, y en la Tabla 18 los resultados obtenidos.

Tabla 17. Datos para el dimensionamiento de la columna de desorción T-303.

Parámetro	Valor
Platos teóricos	4,00
Presión en cabezas (bar)	1,09
Diámetro de la columna (m)	1,32
Espesor del plato (mm)	1,98
Densidad del material (kg/m ³)	7.900,00
Esfuerzo permisible (bar)	1.174,73
Examen radiográfico	0,85

Tabla 18. Resultados obtenidos del dimensionamiento de la columna de desorción T-303.

Parámetro	Valor
Platos reales	14,00
Caída de presión (bar)	$9,33 \cdot 10^{-2}$
Presión en colas (bar)	1,18
Presión de diseño (bar)	2,91
Altura de la columna, H_v (m)	10,20
Espesor de carcasa, t (mm)	5,93
Masa de la carcasa, M_c (kg)	1.979,89

Se hace la comprobación de la relación longitud/diámetro de la columna T-303, siendo esta de 7,73, estando por debajo de 30 justo como se recomienda en heurísticas (7). Por lo tanto, el dimensionamiento de la columna de desorción T-303 se considera correcto.

9. Tambor de reflujo V-301

El tambor de reflujo V-301 corresponde al recipiente donde se recoge todo el líquido condensado en cabezas de la columna de destilación T-304. Para proceder a su dimensionamiento, la variable de diseño seleccionada es la masa de la carcasa del recipiente, con la cual se podrá estimar su coste.

Generalmente, estos tambores de reflujo suelen ser recipientes cilíndricos con orientación horizontal. Sus dimensiones tienen cierta dependencia de la presión de operación, es por ello que, las relaciones longitud/diámetro tabuladas varían, tal como se muestra en la Tabla 19 (2).

Tabla 19. Valores de relación longitud/diámetro en tambores de reflujo. Elaboración propia, adaptada de (2).

Presión (bar)	Relación Longitud/Diámetro
0,00 – 17,30	3,00
17,30 – 34,50	4,00
34,50 +	5,00

El volumen de los tambores de reflujo se relaciona con el caudal de líquido con el que se opera, así como también, con el tiempo de residencia del fluido en su interior. Para la gran mayoría de los casos, esos tiempos suelen ser de 5 a 10 minutos. Siguiendo esta línea, se calcula el volumen del tambor de reflujo V-301 empleando la Ecuación [35]. Teniendo el volumen del recipiente, se sustituye en la Ecuación [36], la cual queda únicamente en función del diámetro del recipiente, al haber utilizado la relación longitud/diámetro correspondiente a la presión de operación del recipiente.

$$V = Q \cdot t_{residencia} \quad [35]$$

$$V = \pi \cdot r_i^2 \cdot L = \pi \cdot \left(\frac{D_i}{2}\right)^2 \cdot 3 \cdot D_i \quad [36]$$

Donde:

- V hace referencia al volumen del tambor de reflujo, en m^3 .
- Q es el caudal volumétrico del líquido condensado, en m^3/min .
- $t_{residencia}$ es el tiempo de residencia del líquido en el tambor de reflujo. Se tomará un valor de 10 minutos.
- D_i es el diámetro interno del recipiente, en m.
- L es la longitud del recipiente, en m.

Conocido el diámetro, es posible calcular la longitud del tambor de reflujo aplicando de nuevo la relación longitud/diámetro. Adicionalmente, será necesario calcular el espesor del recipiente. Para ello, se emplearán las ecuaciones mostradas en el *Anexo II: Cálculos Justificativos. Parte A: Diseño Mecánico*, para el cálculo de espesores mínimos para tensiones radial y longitudinal. De los resultados obtenidos, se seleccionará el valor más alto, aplicando un factor de corrosión de 4 mm. Al igual que para los demás equipos del proceso, como material de construcción del tambor de reflujo V-301 se selecciona acero inoxidable AISI 304.

Por último, se calcula la masa de la carcasa del tambor de reflujo V-301, aplicando la Ecuación [34], anteriormente explicada. En la Tabla 20 y Tabla 21, se muestran los datos utilizados para los cálculos y los resultados obtenidos, respectivamente.

Tabla 20. Datos para el dimensionamiento del tambor de reflujo V-301.

Parámetro	Valor
Presión de operación (bar)	1,00
Relación longitud/diámetro	3,00
Tiempo de residencia (min)	10,00
Caudal másico de líquido a la entrada (kg/min)	37,43
Densidad del líquido (kg/m ³)	805,35
Densidad del material (kg/m ³)	7.900,00
Esfuerzo permisible (bar)	1.174,73
Examen radiográfico	0,85

Tabla 21. Resultados obtenidos del dimensionamiento del tambor de reflujo V-301.

Parámetro	Valor
Caudal volumétrico de líquido a la entrada (m ³ /min)	4,65·10 ⁻²
Volumen (m ³)	0,47
Diámetro interno (m)	0,58
Longitud (m)	1,75
Presión de diseño (bar)	2,72
Espesor (mm)	5,50
Masa de la carcasa (kg)	138,75

10. Conducciones de la planta

A diferencia del resto de equipos, las conducciones del presente proyecto serán estimadas con el objetivo de que se pueda realizar el plano de *Piping and Instrumentation Diagram* (PID) de este proyecto. Sin embargo, estas dimensiones serán solo una aproximación. Para las corrientes líquidas de la planta se empleará la Ecuación [37] propuesta por la bibliografía (1), la cual es utilizada para estimar un diámetro óptimo de tuberías.

$$D_i = \left(\frac{G}{\rho} \right)^{0,5} \quad [37]$$

Siendo:

- G el caudal de la corriente, en kg/s.
- ρ la densidad de la corriente, en kg/m³.
- D_i el diámetro interno óptimo para la conducción, en m.

Los valores de estos parámetros son obtenidos del *Anexo I: Balances de materia y energía*. Sin embargo, usando la Ecuación [37], la velocidad del fluido por la conducción es de 1,27 m/s, siendo esta una velocidad inadecuada para los gases. Es por ello, que, acudiendo al rango típico de velocidades de los gases en conducciones, se calculará el diámetro de las conducciones por las que circulen. Cabe destacar, que todas las conducciones serán posteriormente estandarizadas tomando el Schedule 40 para acero inoxidable, utilizando la bibliografía (8), asegurando que, con el diámetro interno estandarizado la velocidad del fluido continúe estando en el rango aceptado.

Asimismo, para una estimación de la caída de presión debido a la fricción en estas conducciones, se emplearán las distancias de seguridad mínimas entre cada equipo, determinadas en *Documento I: Memoria*, y se calculará siguiendo las caídas de presión típicas mostradas a continuación. Por consiguiente, se utiliza la velocidad de 25 m/s para las corrientes gaseosas y las caídas de presión según el tipo de fluido, como se muestra en la Tabla 22.

Tabla 22. Velocidades y caídas de presión recomendadas. Elaboración propia, adaptada de (1).

Parámetro	v (m/s)	ΔP (kPa/m)
Líquido bombeado	1-3	0,50
Líquido que fluye por gravedad	-	0,05
Gases y vapores	15-30	0,02% de la presión de la corriente

Por último, las corrientes que se encuentren en condiciones atípicas deben llevar aislante, para garantizar la seguridad de los operarios en planta y disminuir las pérdidas de calor. Por consiguiente, se seleccionará un espesor de aislante, según el diámetro de la conducción y la temperatura de operación, siguiendo la Figura 5.

Tuberías		°C Temperatura del fluido ≤										
Diámetro nominal		100	150	200	250	300	350	400	450	500	550	600
Di (")	Di (mm)	Espesor de aislamiento (mm)*										
1	34	40	50	60	80	100	120	120	140	160	200	200
1 1/2	48	50	60	80	80	100	120	140	160	180	200	220
2	60	50	60	80	100	100	120	140	160	190	210	220
2 1/2	73	60	80	100	100	110	130	140	170	190	210	230
3	89	60	80	100	110	110	130	150	180	200	220	240
4	114	80	80	110	110	120	140	160	180	210	240	250
6	168	80	80	110	120	130	150	170	190	230	260	280
8	219	80	100	120	130	130	160	180	200	240	270	290
10	273	100	100	120	130	140	170	190	210	250	290	310
12	324	100	100	120	130	140	170	200	220	260	300	320
14	356	120	120	130	140	140	180	200	230	260	300	320
16	407	120	120	130	140	150	180	200	230	270	310	330
18	457	120	120	130	140	150	180	210	240	280	320	340
20	508	120	120	130	140	150	190	210	240	280	320	350
22	559	120	130	140	150	150	190	220	250	290	330	350
24	609	130	140	140	150	150	190	220	250	290	330	360

TECH Pipe Section MT 4.0* TECH Pipe Section MT 4.1* TECH Pipe Section MT 4.1 + TECH Wired Mat MT 3.1 (2 o 3 capas)*
 TECH Pipe Section MT 4.1 + TECH Wired Mat MT 4.2 (2 o 3 capas)* TECH Wired Mat MT 4.2* TECH Wired Mat MT 5.1*
 TECH Wired Mat MT 6.1*

Figura 5. Espesores mínimos para el aislante en función del diámetro de la tubería (9).

Siendo estos espesores calculados siguiendo la Norma EN 12828 para una temperatura del aislante de 50 °C (9). Las fórmulas empleadas para el cálculo del diámetro interno de las conducciones de los gases tienen en cuenta la sección transversal de estas (A en m²), su caudal volumétrico (Q en m³/s) y la velocidad (v en m/s), como se muestra en las Ecuaciones [38] y [39].

$$A = \frac{Q}{v} \quad [38]$$

$$A = \frac{\pi \cdot d_i^2}{4} \quad [39]$$

En la Tabla 23 se muestran los parámetros obtenidos para las conducciones del presente proyecto. Cabe destacar que se tomarán en cuenta también las conducciones de utilidades del reactor R-201 y las conducciones necesarias para el funcionamiento de la columna de destilación T-304.

Tabla 23. Diámetros estandarizados y caídas de presión en las conducciones.

Corriente	D_i (mm)	D_N (mm) (in)		t (mm)	D_o (mm)	L (m)	ΔP (bar/m)	$P_{inicial}$ (bar)	P_{final} (bar)
1	202,72	203,20	8,00	8,18	219,08	7,50	$4,10 \cdot 10^{-4}$	2,05	2,05
2	35,05	31,75	1,25	3,56	42,16	3,00	$3,00 \cdot 10^{-3}$	15,01	15,00
3	40,89	38,10	1,50	3,68	48,26	4,50	$4,10 \cdot 10^{-4}$	2,05	2,05
4	254,51	254,00	10,00	9,27	273,05	2,00	$2,03 \cdot 10^{-4}$	1,01	1,01
5	254,51	254,00	10,00	9,27	273,05	1,50	$4,30 \cdot 10^{-4}$	2,15	2,15
6	254,51	254,00	10,00	9,27	273,05	4,00	$4,10 \cdot 10^{-4}$	2,05	2,05
7	304,80	304,80	12,00	9,53	323,85	5,00	$4,10 \cdot 10^{-4}$	2,05	2,05
8	304,80	304,80	12,00	9,53	323,85	1,53	$4,07 \cdot 10^{-4}$	2,03	2,03
9	438,40	457,20	18,00	9,53	457,45	42,75	$4,04 \cdot 10^{-4}$	2,02	2,00
10	438,40	457,20	18,00	9,53	457,45	35,22	$3,82 \cdot 10^{-4}$	1,91	1,90
A	304,80	304,80	12,00	9,53	323,85	-	-	-	-
B	304,80	304,80	12,00	9,53	323,85	-	-	-	-
11	387,35	406,40	16,00	9,53	406,40	3,05	$3,80 \cdot 10^{-4}$	1,90	1,90
12	40,89	38,10	1,50	3,68	48,26	4,00	$5,00 \cdot 10^{-3}$	1,62	1,60
13	40,89	38,10	1,50	3,68	48,26	4,00	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,90	1,70
14	387,35	406,40	16,00	9,53	406,40	3,05	$3,20 \cdot 10^{-4}$	1,60	1,60
15	438,40	457,20	18,00	9,53	457,45	3,05	$3,14 \cdot 10^{-4}$	1,57	1,57
16	128,19	127,00	5,00	6,55	141,30	4,00	$5,00 \cdot 10^{-3}$	1,57	1,55
17	336,55	355,60	14,00	9,53	355,60	4,00	$3,10 \cdot 10^{-4}$	1,55	1,55
18	128,19	127,00	5,00	6,55	141,30	2,29	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,57	1,57
19	128,19	127,00	5,00	6,55	141,30	2,29	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,09	1,09
20	438,40	457,20	18,00	9,53	457,45	4,00	$2,37 \cdot 10^{-4}$	1,18	1,18
21	128,19	127,00	5,00	6,55	141,30	4,00	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,18	1,18
22	202,72	203,20	8,00	8,18	219,08	3,05	$2,18 \cdot 10^{-4}$	1,09	1,09
23	35,05	31,75	1,25	3,56	42,16	3,05	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,07	1,07
24	35,05	31,75	1,25	3,56	42,16	3,05	$5,00 \cdot 10^{-3}$	1,14	1,12
25	26,64	25,40	1,00	3,38	33,40	3,05	$5,00 \cdot 10^{-3}$	1,03	1,01
26	20,93	19,05	0,75	2,87	26,67	3,05	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,14	1,14
C	128,19	127,00	5,00	6,55	141,30	3,05	$2,03 \cdot 10^{-4}$	1,01	1,01
D	35,05	31,75	1,25	3,56	42,16	3,05	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,00	1,00
E	35,05	31,75	1,25	3,56	42,16	1,55	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,00	1,00
F	20,93	19,05	0,75	2,87	26,67	1,50	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,00	1,00
G	26,64	25,40	1,00	3,38	33,40	1,50	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,00	1,00
H	20,93	19,05	0,75	2,87	26,67	3,05	$5,00 \cdot 10^{-3}$	1,03	1,01
I	26,64	25,40	1,00	3,38	33,40	3,05	$5,00 \cdot 10^{-4}$	1,14	1,14
J	26,64	25,40	1,00	3,38	33,40	3,05	$5,00 \cdot 10^{-3}$	1,18	1,17
K	102,26	101,60	4,00	6,02	114,30	3,05	$2,28 \cdot 10^{-4}$	1,14	1,14

En la Figura 6 se pueden visualizar las conducciones denotadas con letras, referentes al reactor R-201 y a la columna de destilación T-304, que también han sido estimadas.

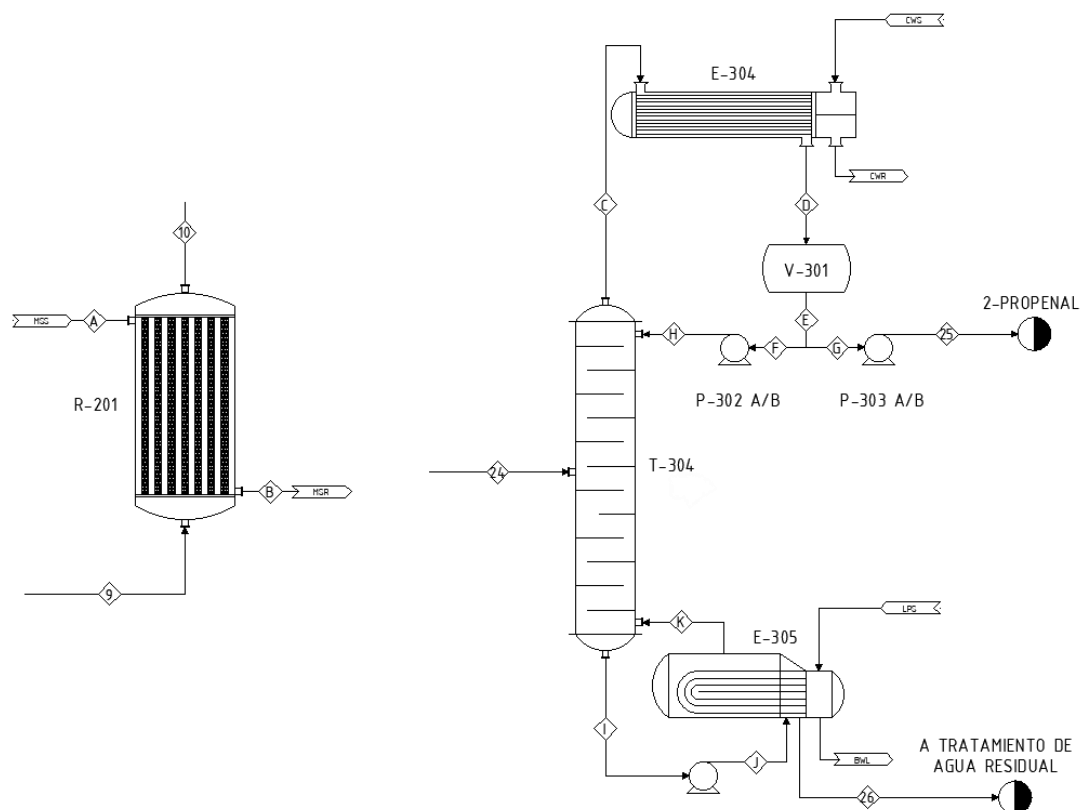


Figura 6. Conducciones referentes al reactor y a la columna de destilación que han sido estimadas. Elaboración propia.

11. Bibliografía

1. TOWLER, G. & SINNOTT, R. *Chemical Engineering Design*. Elsevier, Inc., 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1.
2. WALAS, S. *Chemical Process Equipment: Selection and Design*. Boston: Butterworth-Heinemann, 1990. ISBN: 0-7506-9385-1.
3. DELSAN Ingenieros S.L. Equipo Depurador Electrostático. *Catálogo de productos*. [En línea] [Consultado en abril 2021]. Disponible en: <https://delsaningenieros.com/wp-content/uploads/2021/02/4-Filtros-Gama-LUP-Serie-Industrial-Delsan-Ingenieros.pdf>.
4. BVALVE. Globe Valve BV25060 PN16. [En línea] [Consultado en abril 2021]. Disponible en: <https://thebellowssealedvalve.com/products/globe-valve/>.
5. SERRANO, R., FRADERA, J. & CUESTA-LOPEZ, S. Molten salts database for energy applications. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 2013. 87-102. DOI: 10.1016/j.cep.2013.07.008.
6. FIRDAUS, M. & DWIJAYANTI, A. *Kolmetz Handbook Of Process Equipment Design*. Karl Kolmetz. KLM Technology Group, 2014.
7. TURTON, R., BAILIE, R., WHITING, W. & SHAEIWITZ, J. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 3º ed. New Jersey: Prentice Hall, 2009. ISBN: 0-13-512966-4.
8. Unified Alloys. Stainless Steel Pipe Chart. [En línea] [Consultado en abril 2021]. Disponible en: <https://www.unifiedalloys.com/p/stainless-steel-pipe-data/>.
9. SAINT-GOBAIN ISOVER IBÉRICA, S.L. Aislamiento de Tuberías. Soluciones de Aislamiento con Lana Mineral. [En línea] 2018. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <http://www.isover-aislamiento-tecnico.es/>.

ANEXO III: ANÁLISIS DE VIABILIDAD ECONÓMICA

ÍNDICE

1.	Introducción	1
2.	Inversión inicial.....	1
3.	Financiación	2
4.	Costes de producción.....	3
4.1.	Costes de explotación	3
4.1.1	Materias primas	3
4.1.2	Servicios generales	4
4.1.3	Mano de obra directa e indirecta	4
4.1.4	Mantenimiento	5
4.1.5	Coste de distribución	5
4.1.6	Seguro	5
4.1.7	Costes ambientales.....	5
4.2.	Costes de gestión.....	6
4.3.	Amortización	6
5.	Ingresos.....	7
6.	Flujos de caja.....	8
7.	Evaluación financiera.....	11
7.1.	Valor Actual Neto, VAN	11
7.2.	Tasa Interna de Retorno, TIR.....	11
7.3.	Pay-back	12
8.	Análisis de sensibilidad.....	13
9.	Bibliografía.....	15

1. Introducción

En el presente estudio se analizará la rentabilidad de la planta de producción de acroleína a partir de la oxidación parcial del propileno. Un estudio de viabilidad económica debe ser realizado para cada proyecto de forma que sea posible verificar si es económicamente favorable su materialización.

Se emplearán los indicadores de Valor Actual Neto (VAN) y la Tasa Interna de Retorno (TIR) con el objetivo de determinar la rentabilidad de este proyecto. Asimismo, se calcularán los flujos de caja a través de los años de vida de la planta y se determinará el tiempo requerido para recuperar la inversión, *pay-back*.

Es imprescindible por lo tanto no solo tener en cuenta el presupuesto realizado en el *Documento IV: Presupuesto*, sino que además se calculará la inversión total, los costes anuales del proceso y los ingresos anuales generados mediante la venta del producto. Se considerará también la cantidad de la inversión proveniente de un préstamo a la entidad bancaria junto con las cuotas anuales de pago y sus respectivos intereses.

2. Inversión inicial

La inversión inicial corresponde al desembolso que se realiza para poder empezar la construcción de la planta. En la inversión total se tiene en cuenta el capital circulante requerido y los costes de capital fijo, donde se engloban los gastos de compra, entrega e instalación de los equipos, así como las tuberías, sistemas de control, edificios y costes de ingeniería y construcción, entre otras.

Las partidas que constituyen la inversión inicial se recogen en el *Documento IV: Presupuesto*. Siendo el monto total de las partidas de 8.644.774,74 euros.

Cabe destacar, que la inversión inicial corresponde, por lo tanto, al coste requerido en el año cero para el funcionamiento de la planta. Los demás costes, que se determinarán en el presente documento, corresponden a los gastos anuales para el funcionamiento de la misma.

Sin embargo, se le sumará a la inversión el precio de compra del helio requerido para el primer año. Como el precio del helio es elevado, resulta necesario incluirlo dentro del préstamo a la entidad bancaria. No obstante, este coste del helio solo debe ser considerado en la inversión, debido a que se compra una sola vez dado que la planta incluye una zona de tratamiento de gases *off-gas*, que no es objeto de estudio en el presente proyecto. Para este tratamiento se cuenta con membranas SEPURAN® para la separación y recirculación de este inerte, tal como se ha mencionado en el *Documento I: Memoria*. Se requieren aproximadamente 4.765 toneladas de helio al año, cuyo precio actual es de 1 € por m³. Siendo el coste total de adquisición del helio de 26.767.820,22 € (1-2).

Asimismo, debido a la alta vida útil del catalizador, este no requiere ser comprado anualmente sino solo 4 veces durante toda la vida útil de planta. Para estimar su coste, se empleará el precio encontrado en la bibliografía (3), de 41,3 euros el kg. Teniendo en cuenta que para la producción de acroleína se requieren 7.909,19 kg de catalizador (valor determinado en el *Anexo II: Cálculos justificativos. Parte B: Reactor R-201*) y que se debe cambiar entre 5 a 10 años (seleccionando su cambio cada 5 años), su coste es de 1.307.304,34 euros.

Resumiendo lo anteriormente dicho, se considerará la inversión inicial de 36.719.899,30 €, considerando los gastos del catalizador y del helio. Con este valor es posible determinar los costes previos a la puesta en marcha que incluye: organización, gestión de obras, licencias, permisos y

pruebas antes de la puesta en marcha. Estos costes previos suponen el 8% de la inversión inicial estipulada en el *Documento IV: Presupuesto*, siendo por lo tanto el desembolso inicial de 37.437.627,37 euros.

3. Financiación

Se requiere de un préstamo para disponer de la cuantía de dinero mostrada para la inversión inicial. Se solicitará un préstamo a una entidad bancaria que cubra en 70% de la inversión inicial. Siendo el porcentaje restante cubierto por capital privado mediante el aporte de socios e inversores del proyecto.

El préstamo solicitado se devuelve periódicamente durante los años útiles de la planta, establecido en 20 años, con su interés correspondiente. Se estimará el valor de las cuotas anuales que han de pagarse mediante el sistema de amortización francés (4).

Este sistema es comúnmente empleado en el territorio español y corresponde a la división del préstamo en cuotas iguales que se pagan periódicamente. El valor de la cuantía que ha de pagarse anualmente puede determinarse empleando la Ecuación [1] (5).

$$Cuota = \frac{Co \cdot [i \cdot (1 + i)^n]}{(1 + i)^n - 1} \quad [1]$$

Siendo Co el capital prestado, n los años a pagar, i la tasa de interés que el banco cobrará, que se ha establecido del 5% (6).

Sin embargo, esta cuota debe ser actualizada a lo largo de los años, concretamente el valor aumenta debido a la inflación como se muestra en la Ecuación [2].

$$Cuota \text{ Actualizada} = \text{Pago Préstamo} = Cuota \cdot (1 + i_f)^n \quad [2]$$

Siendo i_f la tasa de inflación. Esta tasa puede estimarse mediante el IPC. Dado que este valor fluctúa anualmente, se ha tomado para este proyecto el valor medio de los últimos años mostrados en la bibliografía (7), el que corresponde a un 1,6%.

La cuota anual que ha de pagarse es de 2.102.864,45 €, los resultados obtenidos para cada año se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Método francés para la financiación de la inversión.

Año	Capital vivo (€)	Interés (€)	Cuotas (€)	Amortización (€)
0	26.206.339,16			
1	25.413.791,66	1.310.316,96	2.102.864,45	792.547,50
2	24.581.616,79	1.270.689,58	2.102.864,45	832.174,87
3	23.707.833,17	1.229.080,84	2.102.864,45	873.783,62
4	22.790.360,38	1.185.391,66	2.102.864,45	917.472,80
5	21.827.013,94	1.139.518,02	2.102.864,45	963.346,44
6	20.815.500,18	1.091.350,70	2.102.864,45	1.011.513,76
7	19.753.410,74	1.040.775,01	2.102.864,45	1.062.089,45
8	18.638.216,82	987.670,54	2.102.864,45	1.115.193,92
9	17.467.263,21	931.910,84	2.102.864,45	1.170.953,61

Tabla 1 (Continuación). Método francés para la financiación de la inversión.

Año	Capital vivo (€)	Interés (€)	Cuotas (€)	Amortización (€)
10	16.237.761,91	873.363,16	2.102.864,45	1.229.501,29
11	14.946.785,55	811.888,10	2.102.864,45	1.290.976,36
12	13.591.260,37	747.339,28	2.102.864,45	1.355.525,18
13	12.167.958,94	679.563,02	2.102.864,45	1.423.301,44
14	10.673.492,43	608.397,95	2.102.864,45	1.494.466,51
15	9.104.302,60	533.674,62	2.102.864,45	1.569.189,83
16	7.456.653,27	455.215,13	2.102.864,45	1.647.649,32
17	5.726.621,48	372.832,66	2.102.864,45	1.730.031,79
18	3.910.088,10	286.331,07	2.102.864,45	1.816.533,38
19	2.002.728,05	195.504,41	2.102.864,45	1.907.360,05
20	0,00	100.136,40	2.102.864,45	2.002.728,05

4. Costes de producción

La estimación de los gastos de fabricación suele recibir menos atención en la literatura comparado con los requisitos de la inversión. Los gastos de fabricación se estiman a partir de la información de empresa y la inversión (8).

Estos gastos de producción están asociados a la operación diaria de la planta y engloban diversos costes como son la adquisición de materias primas, utilidades, mano de obra, entre otras cosas. Todos los costes de producción pueden clasificarse en tres partidas: costes de explotación, costes de gestión y coste de amortización del capital fijo.

En este apartado se presenta cada coste que constituye los gastos de producción anuales de la planta con una leve descripción y el método para estimar su valor. En la Tabla 7 se puede observar el resumen del coste total de producción de la planta.

4.1. Costes de explotación

Este coste está compuesto de 7 apartados que corresponden a los gastos de ejecución del proyecto. Estos se muestran en detalle a continuación.

4.1.1 Materias primas

La cantidad de materia prima que se debe comprar anualmente depende de la conversión en el reactor y la eficacia de los equipos para mantener una producción constante de acroleína. Este gasto suele ser el más elevado en la elaboración del producto.

El único compuesto que ha comprarse anualmente es el propileno cuyo requerimiento anual y coste, teniendo en cuenta que la planta opera 320 días al año, se muestra en la Tabla 2. Aunque también se considerará la compra de un porcentaje de helio que puede perderse mediante la recuperación (5%). Adicionalmente, para el almacenamiento de la acroleína se compra hidroquinona que permite prevenir la polimerización del compuesto. En concreto se compra un 0,15% de la acroleína producida. Los precios de estos compuestos fueron obtenidos de las bibliografías (9) y (2).

Tabla 2. Coste anual de materias primas.

Compuesto	Cantidad necesaria (t/año)	Precio (€/t)	Coste anual (€)
Propileno	13.178,42	954,54	12.579.400,15
Helio	238,23	5.617,98	1.338.391,01

4.1.2 Servicios generales

Los servicios generales forman parte fundamental de los costes de producción. Entre los servicios empleados destacan la electricidad, el agua de refrigeración, vapor, combustible, aire, etc. Si se aumenta los requisitos, el precio del servicio unitario disminuye, puede calcularse mediante balances los requerimientos de la planta y contactar con las empresas de servicio público para saber el coste de los servicios de la planta (8). Sin embargo, el cálculo de los costos de estos servicios puede ser bastante complicado, y el costo real de tales corrientes es difícil de determinar en una instalación grande.

Por consiguiente, se calculará como una estimación general como el 20% del coste total de los reactivos. Por otro lado, se considerará el coste de adquisición del vapor de agua y el agua de proceso, para la operación de las columnas *quench* T-301, de absorción T-302 y de desorción T-303.

Adicionalmente, para el almacenamiento de la acroleína se compra hidroquinona que permite prevenir la polimerización del compuesto, en concreto se compra un 0,15% de la acroleína producida. Estos costes se calcularán conociendo la cantidad requerida y sus costes como se muestra en la Tabla 3.

Tabla 3. Coste anual de las corrientes de proceso.

Compuesto	Cantidad necesaria (t/año)	Precio (€/t)	Coste anual (€)
Agua de proceso	335.865,34	0,70	235.105,74
Vapor de agua	61.632,00	5,00	308.160,00
Hidroquinona	15,40	5.000,00	77.015,30

4.1.3 Mano de obra directa e indirecta

Los salarios de los operadores y supervisores de la planta son un costo fijo a tomar en cuenta. Todas las plantas suelen operar por turno con por lo menos 5 operarios por turnos. Los operarios requeridos para la producción en continuo han sido estimados en el apartado 10.4. *Disponibilidad de mano de obra* del Documento I: *Memoria*, siendo en total para la mano de obra directa 75 empleados (5).

Por otro lado, el salario varía según la región y el nivel de experiencia del trabajador. Para España el salario de los operarios se estima entre 29.000 y 33.000 euros al año, por lo que se ha optado por el límite superior de 33 mil euros al año. Este se reparte en pagas de 2.360 euros al mes por operario con dos pagas extras en junio por verano y diciembre por navidad. Asimismo, se contemplará el gasto por seguridad social como el 30% de los salarios totales, como se muestra en la Tabla 4 (10).

Tabla 4. Coste anual de la mano de obra directa.

Parámetro	Valor	Coste por operario (€/operario)	Coste total (€/anual)
Operarios	75	33.040,00	2.478.00,00
Seguridad Social	+30%	9.912,00	743.400,00
		Total	3.221.40,00

Mientras, la mano de obra indirecta corresponde al personal no adscrito de forma directa al proceso de manufactura. Entre ellos están los encargados de la vigilancia (porteros), trabajadores encargados de la limpieza, y de prestar soporte TIC, etc. El coste de mano de obra indirecta se puede estimar entre el 15 y 30% de los costes totales de mano de obra directa. Para este proyecto se estima este coste como el 16% y teniendo en cuenta que hay 19 trabajadores estos ganarían 27.127,58 € al año (8).

4.1.4 Mantenimiento

Por otro lado, el mantenimiento de los equipos y de las instalaciones, que incluye los materiales requeridos y el gasto de la mano de obra, aumenta el coste anual de la planta. El coste de mantenimiento puede estimarse entre el 6 al 10% de los costes fijos de capital. Destacando que los procesos con más equipos que manejen partículas sólidas son los que requieren un mayor mantenimiento se ha seleccionado un 8% (8).

4.1.5 Coste de distribución

Este coste puede o no ser importante según la planta a considerar. Depende, por ejemplo, si los envases son retornables a la empresa y el tipo de envases para la distribución. Dado que puede tratarse de productos que se distribuyen mediante camiones cisterna, carro tanque o tuberías en vez de envases, este coste se estimará como el 2% de los costes fijos totales para el proyecto (11).

4.1.6 Seguro

Esta partida está constituida por los seguros sobre instalaciones y almacenes. Asimismo, contempla las campañas publicitarias y se estima como un 2% de los costes ISBL calculados en *Documento IV: Presupuesto* (5).

4.1.7 Costes ambientales

Toda persona y empresa debe de cuidar en general al medio ambiente. Cuidar el medio ambiente no solo es un deber moral pero hoy en día la mayoría de los países tienen leyes estrictas para asegurar la protección del medio ambiente y la preservación de la calidad del aire, agua y la tierra (5). Por consiguiente, la planta requiere vigilancia del proceso para garantizar que se cumplan las normas legales respecto al ambiente y continuar con investigaciones que permitan encontrar formas de disminuir el impacto ambiental del proyecto (5).

Este coste típicamente corresponde al 2% de los costes OSBL determinados en *Documento IV: Presupuesto* (5). A continuación de muestran los costes de cada partida que constituyen los costes de explotación en la Tabla 5.

Tabla 5. Importe de cada partida de los costes de explotación.

Costes de explotación	
Partida	Importe (€)
Materias primas	13,994,806.46
Servicios generales	3,326,823.97
Mano de obra directa	3,221,400.00
Mano de obra indirecta	515,424.00
Mantenimiento	639.368,52
Coste de distribución	172.895,49
Seguro	86.447,75
Costes ambientales	172.895,49
Total	22.130.061,68

4.2. Costes de gestión

Los costes de gestión se clasifican en tres partidas: gastos administrativos, comerciales y de investigación.

En los gastos administrativos se contemplan los sueldos de los gerentes, gastos de oficinas y costes de actividades similares. Estos serán asumidos como un 3% de los costes de explotación.

Por otro lado, los gastos comerciales están asociados a la venta del producto y se estima como el 10% del coste total de explotación.

Por último, el coste de investigación va dirigido al desarrollo y las actividades de investigación del proceso. Este gasto contempla salarios y suministros y puede estimarse como el 1% de los costes de explotación.

Habiendo calculado los costes de explotación previamente es posible obtener los costes de gestión los cuales se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6. Importe de cada partida de los costes de gestión.

Costes de gestión	
Partida	Importe (€)
Gastos administrativos	663.901,85
Gastos comerciales	2.213.006,17
Investigación	221.300,62
Total	3.098.208,64

4.3. Amortización

Ha de tenerse en cuenta que los equipos pierden valor con el tiempo, debido al desgaste químico o físico y el envejecimiento técnico. Es por ello que la amortización a efectos contables es obligatoria. La amortización permite reducir la cantidad de impuestos a pagar, dado que se considera el coste total del proyecto como una cantidad repartida equitativamente entre los periodos de la vida útil de la planta. Para este proyecto se considera una amortización lineal y como el terreno no pierde su valor con el paso de los años ha de descontarse y calcular la amortización siguiendo la Ecuación [3].

$$\text{Amortización} = \frac{\text{Inversión} - \text{Precio de la parcela}}{\text{Años de vida útil de la planta}} \quad [3]$$

Siendo 20 años la vida útil de la planta, 8.644.774,74 € la inversión y 2.302.178,10 € el precio de la parcela, el monto de amortización es de 317.129,83 €. Finalmente, se puede resumir los costes de producción en la Tabla 7.

Tabla 7. Costes totales de producción de la planta.

Costes de producción	
Partida	Importe (€)
Costes de explotación	22.130.061,68
Costes de gestión	3.098.208,64
Amortización	317.129,83
Total	25.545.400,15

5. Ingresos

El precio de la acroleína se ve afectado por el precio del propileno y el crudo de petróleo. Asimismo, el precio sufre de fluctuaciones debido a factores geo-climáticos, sequías graves o eventos impredecibles como el COVID-19 y la crisis del 2008 (12).

Teniendo en cuenta estas variables, estudios han generado la distribución estadística del precio de la acroleína. Basándose en datos históricos y con el juicio de expertos se puede ajustar el precio a una distribución logarítmica normal, que se muestra en la Figura 1 y Figura 2 según el tamaño de la planta (12).

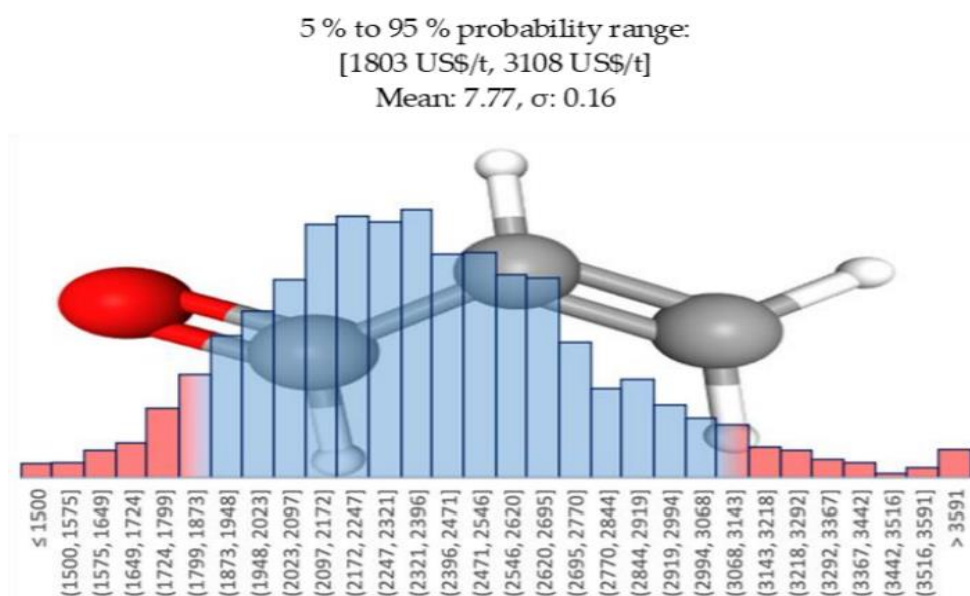


Figura 1. Distribución logarítmica normal del precio de la acroleína para grandes plantas (12).

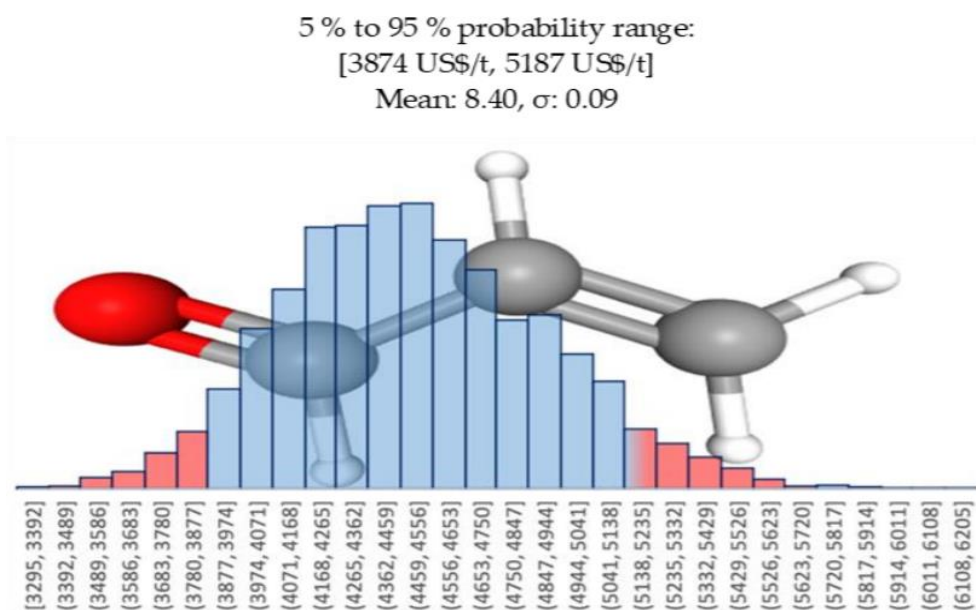


Figura 2. Distribución logarítmica normal del precio de la acroleína para pequeñas plantas (12).

Puede distinguirse al precio de la acroleína para cantidades de demanda superiores como puede ser 50 mil toneladas al año, mostradas en la Figura 1. Siendo más barato para mayores demandas. Sin embargo, las plantas pequeñas como la de este proyecto ya son ubicadas cerca de consumidores finales reduciendo el coste de proveedores, gastos de almacenamiento y transporte (altamente costosos para la acroleína). Por lo tanto, aunque el precio de la acroleína es mayor sigue siendo un precio competitivo debido a estas las ventajas que se ofrecen (12).

Como se observa en la Figura 2 el precio puede variar entre 3900 a 5200 US \$ por tonelada, por lo que se ha seleccionado un valor entre los costes elevados de la acroleína y los más económicos para ser realistas respecto el mercado. Por lo tanto, teniendo en cuenta que se trata de una planta pequeña, se selecciona un precio de 3600 US \$, valor que se ha de convertir a la divisa del país, euros (12).

La producción anual de acroleína en la planta se recoge en el *Anexo I: Balances de materia y energía*, y por lo tanto se muestra en la Tabla 8 los ingresos que se generan en la planta solo considerando como ingreso la venta de la acroleína.

Tabla 8. Ingresos por la venta de la acroleína.

Compuesto	Cantidad producida (t/añual)	Precio (€/t)	Ingreso anual (€)
Acroleína	10.268,71	3600,00	30.551.524,23

6. Flujos de caja

Una vez determinados los costes de producción, desglosados en el apartado 4. *Costes de producción*, ya se conoce la inversión inicial necesaria y los ingresos que se tendrán por la venta del producto. No obstante, se tiene que tomar en cuenta que el valor del dinero varía con el tiempo, por lo cual se tendrá que estimar una tasa de inflación. Siguiendo lo establecido por el IPC, y observando su variación con el tiempo, la tasa de inflación se fija en 1,60% (7).

Para posteriormente poder evaluar si el proyecto resulta rentable y si es correcto llevarlo a cabo, es necesario calcular los flujos de caja para el periodo de vida útil del proyecto, que es de 20 años.

Para ello, se seguirá el procedimiento explicado a continuación: conocidos los ingresos, los costes de producción y la cuota anual que hay que pagar por el préstamo, se suman los gastos totales que habrá que pagar anualmente. Luego se calcula el beneficio bruto como se expresa en la Ecuación [4], la cantidad de dinero que se paga en impuestos, asumiendo un porcentaje del 25%, como se establece en la Ecuación [5], y se puede obtener el beneficio neto, haciendo uso de la Ecuación [6]. A este valor de beneficio neto se le suma la amortización, obteniendo entonces el flujo de caja para el año n , CF_n , como se muestra en la Ecuación [7]. Posteriormente, se calculan los flujos de caja acumulados, CF_A , tal como se expone en la Ecuación [8].

$$\text{Beneficio bruto} = \text{Ingresos} - \text{Pagos totales} \quad [4]$$

$$\text{Impuestos} = \text{Beneficio bruto} \cdot 0,25 \quad [5]$$

$$\text{Beneficio neto} = \text{Beneficio bruto} - \text{Impuestos} \quad [6]$$

$$CF_n = \text{Beneficio neto} + \text{Amortización} \quad [7]$$

$$CF_A = -I_0 + \sum CF_n \quad [8]$$

A su vez, la inversión inicial se calcula empleando la Ecuación [9].

$$I_0 = D.I. - \text{Préstamo} \quad [9]$$

Donde:

- $D.I.$ es la cantidad de dinero necesaria para materializar el proyecto en el año cero.
- Préstamo hace referencia a la cantidad del $D.I.$ que se pide a una entidad financiera.

A continuación, en la Tabla 9 se muestran los flujos de caja obtenidos para los 20 años de vida útil para la planta de producción del presente proyecto.

Tabla 9. Flujos de caja calculados para el presente proyecto.

Año	Ingresos (€)	Costes de producción (€)	Cuota préstamo (€)	Pagos totales (€)	Beneficio bruto (€)	Impuestos (€)	Beneficio neto (€)	Amortización (€)	CF _n (€)	CF _A (€)
0										-11.231.288,21
1	31.040.348,61	25.954.126,55	2.136.510,29	28.090.636,84	2.949.711,78	737.427,94	2.212.283,83	317.129,83	2.529.413,66	-8.701.874,55
2	31.536.994,19	26.369.392,58	2.170.694,45	28.540.087,03	2.996.907,16	749.226,79	2.247.680,37	317.129,83	2.564.810,21	-6.137.064,34
3	32.041.586,10	26.791.302,86	2.205.425,56	28.996.728,42	3.044.857,68	761.214,42	2.283.643,26	317.129,83	2.600.773,09	-3.536.291,25
4	32.554.251,48	27.219.963,70	2.240.712,37	29.460.676,07	3.093.575,40	773.393,85	2.320.181,55	317.129,83	2.637.311,38	-898.979,86
5	33.075.119,50	27.655.483,12	2.276.563,77	29.932.046,89	3.143.072,61	785.768,15	2.357.304,46	317.129,83	2.674.434,29	1.775.454,42
6	33.604.321,41	28.097.970,85	2.312.988,79	30.410.959,64	3.193.361,77	798.340,44	2.395.021,33	317.129,83	2.712.151,16	4.487.605,58
7	34.141.990,56	28.547.538,39	2.349.996,61	30.897.535,00	3.244.455,56	811.113,89	2.433.341,67	317.129,83	2.750.471,50	7.238.077,09
8	34.688.262,40	29.004.299,00	2.387.596,56	31.391.895,56	3.296.366,85	824.091,71	2.472.275,14	317.129,83	2.789.404,97	10.027.482,05
9	35.243.274,60	29.468.367,79	2.425.798,10	31.894.165,89	3.349.108,72	837.277,18	2.511.831,54	317.129,83	2.828.961,37	12.856.443,42
10	35.807.167,00	29.939.861,67	2.464.610,87	32.404.472,54	3.402.694,46	850.673,61	2.552.020,84	317.129,83	2.869.150,67	15.725.594,10
11	36.380.081,67	30.418.899,46	2.504.044,64	32.922.944,10	3.457.137,57	864.284,39	2.592.853,18	317.129,83	2.909.983,01	18.635.577,11
12	36.962.162,98	30.905.601,85	2.544.109,36	33.449.711,21	3.512.451,77	878.112,94	2.634.338,83	317.129,83	2.951.468,66	21.587.045,77
13	37.553.557,58	31.400.091,48	2.584.815,11	33.984.906,58	3.568.651,00	892.162,75	2.676.488,25	317.129,83	2.993.618,08	24.580.663,85
14	38.154.414,50	31.902.492,94	2.626.172,15	34.528.665,09	3.625.749,41	906.437,35	2.719.312,06	317.129,83	3.036.441,89	27.617.105,74
15	38.764.885,14	32.412.932,83	2.668.190,90	35.081.123,73	3.683.761,40	920.940,35	2.762.821,05	317.129,83	3.079.950,89	30.697.056,62
16	39.385.123,30	32.931.539,75	2.710.881,96	35.642.421,71	3.742.701,59	935.675,40	2.807.026,19	317.129,83	3.124.156,02	33.821.212,65
17	40.015.285,27	33.458.444,39	2.754.256,07	36.212.700,46	3.802.584,81	950.646,20	2.851.938,61	317.129,83	3.169.068,44	36.990.281,09
18	40.655.529,84	33.993.779,50	2.798.324,17	36.792.103,67	3.863.426,17	965.856,54	2.897.569,63	317.129,83	3.214.699,46	40.204.980,55
19	41.306.018,31	34.537.679,97	2.843.097,35	37.380.777,32	3.925.240,99	981.310,25	2.943.930,74	317.129,83	3.261.060,57	43.466.041,12
20	41.966.914,61	35.090.282,85	2.888.586,91	37.978.869,76	3.988.044,84	997.011,21	2.991.033,63	317.129,83	3.308.163,46	46.774.204,58

7. Evaluación financiera

El indicador financiero por excelencia para la evaluación de proyectos, empleado y comprendido por inversores y financieros es el Valor Actual Neto. Es una herramienta para medir la rentabilidad, viabilidad y sensibilidad financiera de proyectos. No obstante, se suelen utilizar otros instrumentos, como la Tasa Interna de Retorno y el *Pay-back*, que resultan un buen complemento, y aportan información valiosa sobre el proyecto. A continuación, se procede a explicar los tres indicadores financieros mencionados (13).

7.1. Valor Actual Neto, VAN

El Valor Actual Neto, VAN, también conocido como NPV por las siglas en inglés de *Net Present Value*, es una medida económica que resulta muy útil para estudiar la rentabilidad de un proyecto debido a que permite estimar el valor del dinero en el tiempo, así como también la variación anual de gastos e ingresos (5).

Tal como se expresa en la Ecuación [10], el VAN de un proyecto es la suma de flujos de caja futuros, traídos a la fecha actual, empleando un interés determinado (5).

$$VAN = \sum_{n=1}^{n=t} \left(\frac{CF_n}{(1+i)^n} \right) - I_0 \quad [10]$$

Donde:

- CF_n hace referencia al flujo de caja del año n .
- t es el tiempo de vida útil del proyecto, en años.
- i es la tasa de interés.

Como se puede observar, el VAN se calcula en función a la tasa de interés utilizada y al periodo de tiempo estudiado. Cabe destacar que a la tasa de interés aplicada se le conoce como tasa de descuento aplicada (13).

Solo aquellos proyectos que tengan valores del VAN positivos serán rentables y resultará conveniente llevarlos a cabo (13).

En la Tabla 10 mostrada a continuación, se muestra el Valor Actual Neto, obtenido una vez realizado el cálculo, para la planta de producción de 2-propenal del presente proyecto. Cabe destacar que se ha aplicado una tasa de descuento del 15%.

Tabla 10. Valor Actual Neto del presente proyecto.

VAN (€)
5.877.663,84

Como se puede observar, el VAN resultante es una cantidad positiva, lo que significa que el proyecto es rentable y será beneficioso en términos económicos llevar a cabo el proyecto.

7.2. Tasa Interna de Retorno, TIR

La Tasa Interna de Retorno, TIR, también conocido como IRR por las siglas en inglés de *Internal Rate of Return*, es un indicador financiero muy utilizado a nivel empresarial, que corresponde a la rentabilidad obtenida con el proyecto, en términos porcentuales (14). Es la tasa de descuento que conduce a que el VAN del proyecto sea cero, por lo tanto, en este caso, la tasa de descuento

sería igual a la rentabilidad anual generada, y es posible calcularla aplicando la Ecuación [11] (13). Como se puede observar, se resta la inversión inicial, I_0 .

$$-I_0 + \sum_{n=1}^{n=t} \frac{CF_n}{(1 + TIR)^n} = 0 \quad [11]$$

Siguiendo esta línea, la TIR es un porcentaje visto como una medida del rendimiento esperado. Si la TIR resulta negativa, entonces llevar a cabo el proyecto significaría una pérdida de dinero. Sin embargo, no es suficiente que la TIR sea positiva, sino que además debe ser superior a la tasa de descuento aplicada en el cálculo del VAN (13).

En la Tabla 11 se puede observar la Tasa Interna de Retorno que se ha calculado para la planta de producción de 2-propenal del presente proyecto.

Tabla 11. Tasa Interna de Retorno del presente proyecto.

TIR (%)
23,49

Debido a que la TIR ha resultado positiva y superior a la tasa de descuento aplicada, del 15%, se puede concluir que el proyecto es aceptable en términos de rentabilidad.

7.3. Pay-back

El *pay-back* corresponde al plazo de recuperación de la inversión inicial de un proyecto. Para su cálculo, se debe restar el importe total que se ha invertido en el proyecto, e ir sumando los flujos de caja positivos que el proyecto va generando anualmente, hasta que compense lo inicialmente invertido, tal como se muestra en la Ecuación [12] (13).

$$Pay - back = CF_{n-1} + CF_n \quad [12]$$

Como se observa, esta herramienta resulta bastante simple de calcular, y es utilizada frecuentemente para estimar el retorno de la inversión del proyecto. No obstante, se recomienda que la información obtenida por el *pay-back* complemente al resultado del VAN del proyecto, pues al utilizarlo por sí solo no se estaría teniendo en cuenta el valor del dinero en el tiempo, y no se mediría la rentabilidad del proyecto (14).

Resulta conveniente que el *pay-back* sea lo más rápido posible. Un proyecto en el cual el *pay-back* de lo invertido se recupere muy tarde, da signos de que el proyecto es de alto riesgo (13).

En la Figura 3 mostrada a continuación, se han graficado los flujos de caja desde el año cero hasta el año 20, es decir, hasta el fin de la vida útil del proyecto.

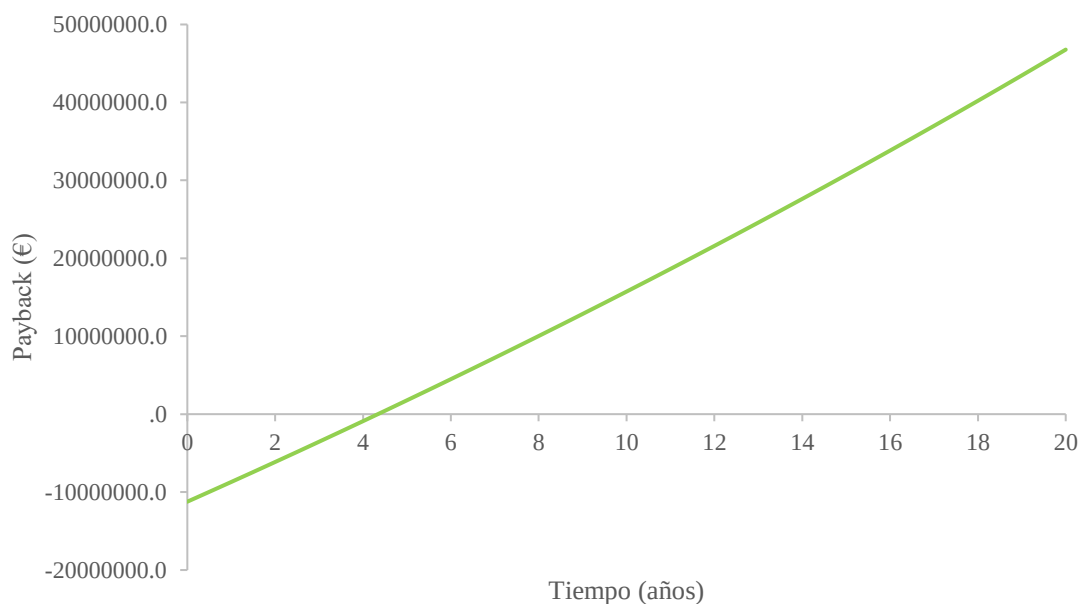


Figura 3. Pay-back del presente proyecto.

Tal como se puede apreciar, el *pay-back* de la planta de producción de 2-propenal del presente proyecto es de cinco años. Se puede decir que la inversión se recupera relativamente rápido, previamente a la mitad de la vida útil del proyecto, por lo tanto, nuevamente el proyecto se considera satisfactorio en términos económicos.

8. Análisis de sensibilidad

Resulta conveniente realizar diferentes análisis de sensibilidad para evaluar que tan afectada se puede ver la rentabilidad del proyecto al ser modificados diversos parámetros. Se concluirá si dichos parámetros resultan críticos o no, de acuerdo a los resultados de los indicadores financieros.

Variación en el precio del producto

Una variable importante es el precio de venta del producto del proceso. Hasta ahora, el precio de venta de la acroleína se ha fijado en un valor de 2.975,21 € (3.600 \$) por tonelada, tal como se ha explicado en el apartado 5. *Ingresos*. No obstante, en el presente análisis de sensibilidad el precio de venta de la acroleína se variará en $\pm 5\%$. En la Tabla 12 mostrada a continuación se presentan los valores de los indicadores financieros obtenidos para cada caso estudiado.

Tabla 12. Resultados obtenidos de los indicadores financieros al variar el precio de venta de la acroleína.

Indicador	-5% precio de venta acroleína	+5% precio de venta acroleína
VAN	-2.079.928,90	13.835.256,58
TIR	11,70%	34,23%
Pay-back	Año 8	Año 3

Se puede observar que, si el precio de venta de la acroleína se disminuye en un 5%, el VAN resulta una cantidad negativa, lo cual da signos de un proyecto no rentable. Además, la TIR obtenida resulta menor a la tasa de descuento aplicada para el cálculo del VAN, la cual se mantuvo en 15%. Por último, el *pay-back* asciende al año ocho, tardando mucho más tiempo en recuperar la inversión inicial.

Por otro lado, en el caso de aumentar en un 5% el precio de venta de la acroleína, el proyecto resulta rentable con una mejora en los resultados de los indicadores financieros con respecto a los que se tiene actualmente, debido a que tanto el VAN como el TIR son mayores, y el *pay-back* desciende.

Variación de la inversión estipulada en el Documento IV: Presupuesto

Como se mencionó en el Documento V el coste de la inversión del proyecto es solo una estimación que entra en la fase de ingeniería conceptual. Concretamente esta estimación entra según la *Association for the Advancement of Cost Estimating International* en la Clase IV, con una precisión del $\pm 30\%$. Por consiguiente, este parámetro es de vital importancia pues la variación podría impactar fuertemente al proyecto. La inversión estimada es de 8.644.774,74 € y a continuación se muestran los valores de los indicadores financieros obtenidos al variar este valor $\pm 30\%$.

Tabla 13. Resultados obtenidos de los indicadores financieros al variar el coste de inversión estimado.

Indicador	-30% del coste de inversión	+30% del coste de inversión
VAN	8.171.402,46 €	3.583.925,21 €
TIR	27,50%	19,93%
<i>Pay-back</i>	Año 4	Año 6

Como se puede observar, aunque puedan darse fluctuaciones en el coste de la inversión calculada el proyecto continúa siendo rentable, a mayor o menor nivel. El VAN aumenta notoriamente dos millones, asimismo, disminuye lo mismo al aumentar la inversión el 30%. Por otro lado, el TIR y el *pay-back* no varían de forma tan notable. Cambiando el TIR solo un 4% y el *pay-back* cambia un año respecto al calculado.

Variación en el precio de la materia prima

En este caso se variará el precio del propileno, ya que es una de las materias primas cruciales para la obtención de acroleína. Actualmente, se tiene fijado un precio de propileno de 954,55 € (1.155 \$) por tonelada, tal como se ha explicado en el apartado 5. *Ingresos*. Ahora bien, se aplicará una variación del $\pm 10\%$ en el precio de compra del propileno. En la Tabla 14 se muestran los valores de los indicadores financieros obtenidos para cada caso estudiado.

Tabla 14. Resultados obtenidos de los indicadores financieros al variar el precio de compra del propileno.

Indicador	-10% precio de compra propileno	+10% precio de compra propileno
VAN	14.842.138,65 €	-3.086.810,98 €
TIR	35,57%	10,01%
<i>Pay-back</i>	Año 3	Año 9

Se puede observar que, si el precio de compra del propileno se aumenta en un 10%, el VAN resulta una cantidad negativa, lo cual indica que el proyecto no es rentable. Además, la TIR obtenida resulta menor a la tasa de descuento aplicada para el cálculo del VAN, la cual se mantuvo en 15%. Finalmente, el *pay-back* asciende al noveno año, tardando mucho más tiempo en recuperar la inversión inicial.

Por otra parte, en el caso de disminuir en un 10% el precio de la compra del propileno, el proyecto resulta rentable con una mejora en los resultados de los indicadores financieros con respecto a los que se tiene actualmente, debido a que tanto el VAN como el TIR son mayores, y el *pay-back* desciende al tercer año.

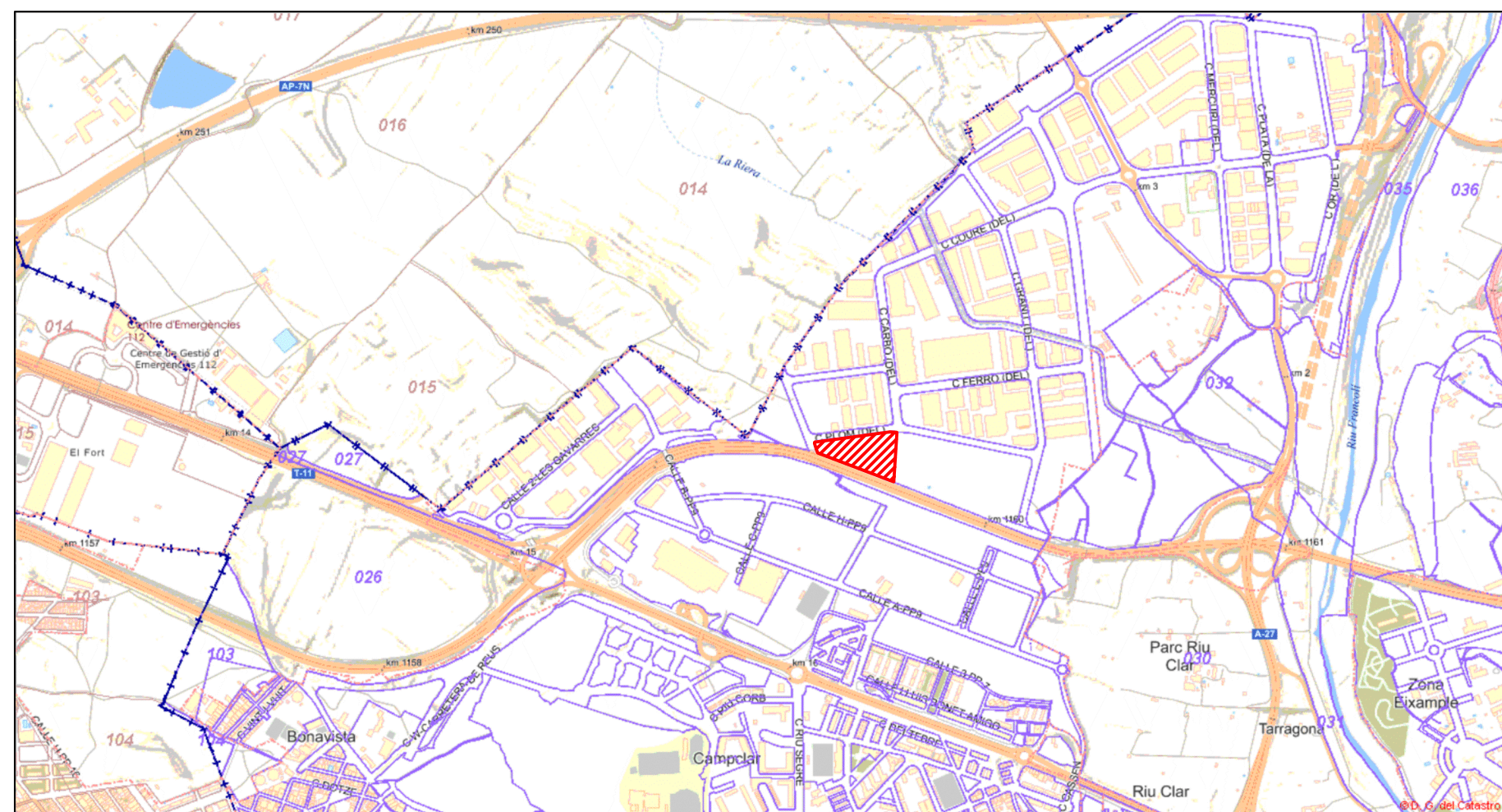
9. Bibliografía

1. **Evonik Corporation.** SEPURAN® Noble: Membrane Technology for Efficient Helium Recovery & Purification. [En línea] 2020. [Consultado en abril 2021]. Disponible en: <https://corporate.evonik.com/Downloads/membrane-separation/sepuran-noble-sellsheet.pdf>.
2. **BLENGINI, G., LATUNUSSA, C., et al.** *Study on the EU's list of Critical Raw Materials (2020), Factsheets on Non-critical Raw Materials*. Luxemburgo: Publications Office of the European Union, 2020. ISBN: 978-92-76-21052-8.
3. **LIU, L., YE, P. & BOZELL, J.** A comparative review of petroleum-based and bio-based acrolein production. *ChemSusChem*, 2012, 5, 1162-1180. DOI: 10.1002/cssc.201100447.
4. **ING.** En Naranja. ¿En qué consiste el sistema de amortización francés? [En línea] 2019. [Consultado en junio 2021]. Disponible en: <https://www.ennaranja.com/hipotecas/sistema-amortizacion-frances/#:~:text=El%20sistema%20de%20amortizaci%C3%B3n%20franc%C3%A9s%20es%20el%20que%20se%20utiliza,misma%20cantidad%20todos%20los%20meses..>
5. **TOWLER, G. & SINNOTT, R.** *Chemical Engineering Design*. Elsevier, Inc., 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1.
6. **LUTHI, B.** Nav. *The Average Business Loan Interest Rate in 2020*. [En línea] [Consultado en junio 2021]. Disponible en: <https://www.nav.com/blog/what-is-the-average-business-loan-interest-rate-37650/>.
7. **FERNÁNDEZ, R.** STATISTA. *Evolución de la variación de la media anual del índice de precios al consumo (IPC) en España de 2005 a 2020*. [En línea] 2021. [Consultado en junio 2021]. Disponible en: <https://es.statista.com/estadisticas/476953/tasa-de-inflacion-anual-en-espana/>.
8. **PERRY, R.** *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. Nueva York: McGraw-Hill, 1997.
9. **ECHEMI.** *Propylene Market Price & Analysis*. [Consultado en abril 2021]. Disponible en: https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Seven1855-propylene.html.
10. **elEconomista.** *Radiografía de los salarios en España: ¿En qué CCAA y en qué profesiones se cobra más?* [En línea] 2020. [Consultado en junio 2021]. Disponible en: <https://www.eleconomista.es/economia/noticias/10872390/11/20/Radiografia-de-los-salarios-en-Espana-Donde-y-en-que-profesiones-se-cobra-mas.html>.
11. **TURTON, R.** *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes*. Michigan: Prentice Hall, 2012. ISBN: 978-0-13-261812-0.
12. **FOLLIARD, V., TOMMASO, J. & DUBOIS, J.** Review on Alternative Route to Acrolein through Oxidative Coupling of Alcohols. *Catalysts*, 2021, 11, 229. [En línea]. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.mdpi.com/2073-4344/11/2/229>.
13. **GÓMEZ, D & JURADO, J.** *Financiación global de proyectos: Project Finance*. Madrid: ESIC Editorial, 2001. ISBN: 84-7356-280-1.
14. **TEICHOLZ, E.** *Facility Design and Management Handbook*. McGraw-Hill, 2001. ISBN: 9780071353946.

DOCUMENTO II: PLANOS

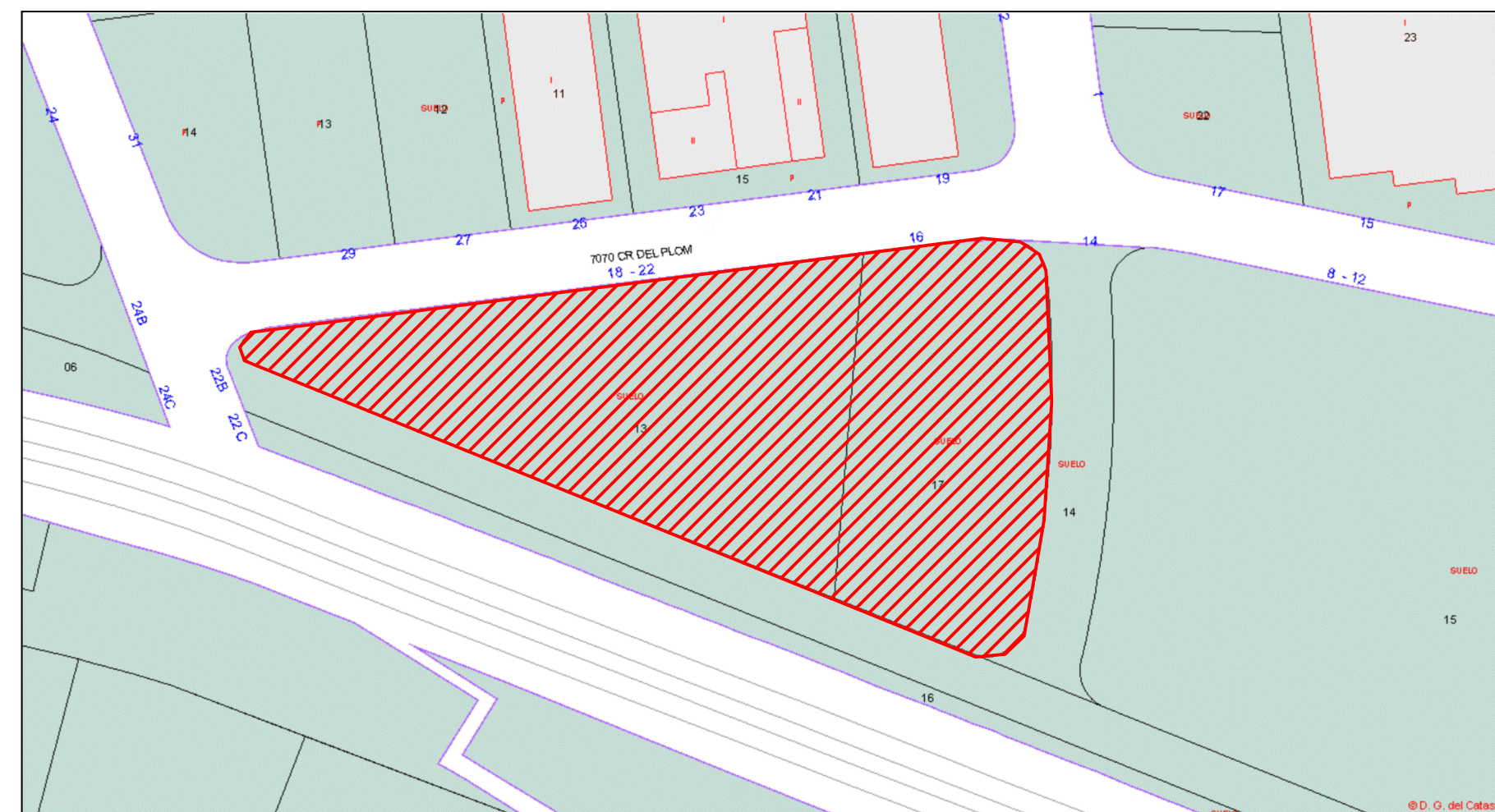
ÍNDICE

- 1. Plano de situación y emplazamiento**
- 2. Plano de implantación (*layout*)**
- 3. Diagrama de flujo del proceso**
- 4.1. Diagrama de instrumentación y control (P&ID #1)**
- 4.2. Diagrama de instrumentación y control (P&ID #2)**
- 5. Plano del diseño mecánico del reactor R-201**
- 6. Plano del diseño mecánico de la columna de absorción T-302**
- 7. Plano del diseño mecánico de la columna de destilación T-304**



PLANO DE SITUACIÓN
ESCALA: 1/20.000

Coordenadas de los extremos			
Esquina superior izquierda	347.322 ; 4.556.330	Esquina superior derecha	352.122 ; 4.556.330
Esquina inferior izquierda	347.322 ; 4.553.730	Esquina inferior derecha	352.122 ; 4.553.730



PLANO DE EMPLAZAMIENTO
ESCALA: 1/2.000

Coordenadas de los extremos			
Esquina superior izquierda	349.831 ; 4.555.045	Esquina superior derecha	350.311 ; 4.555.045
Esquina inferior izquierda	349.831 ; 4.554.785	Esquina inferior derecha	350.311 ; 4.554.785

N

LEYENDA

Parcela seleccionada

Espacio libre

Espacio ocupado por otra empresa

DATOS DE LA PARCELA SELECCIONADA

Referencia catastral: 0345913CF5505S
Superficie: 20.018,94 m³
Polígono: Riu Clar
Municipio: Constantí
Provincia: Tarragona

USC

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA- ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA

GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO

ETSE

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE 2-PROPENAL A PARTIR DE PROPILENO

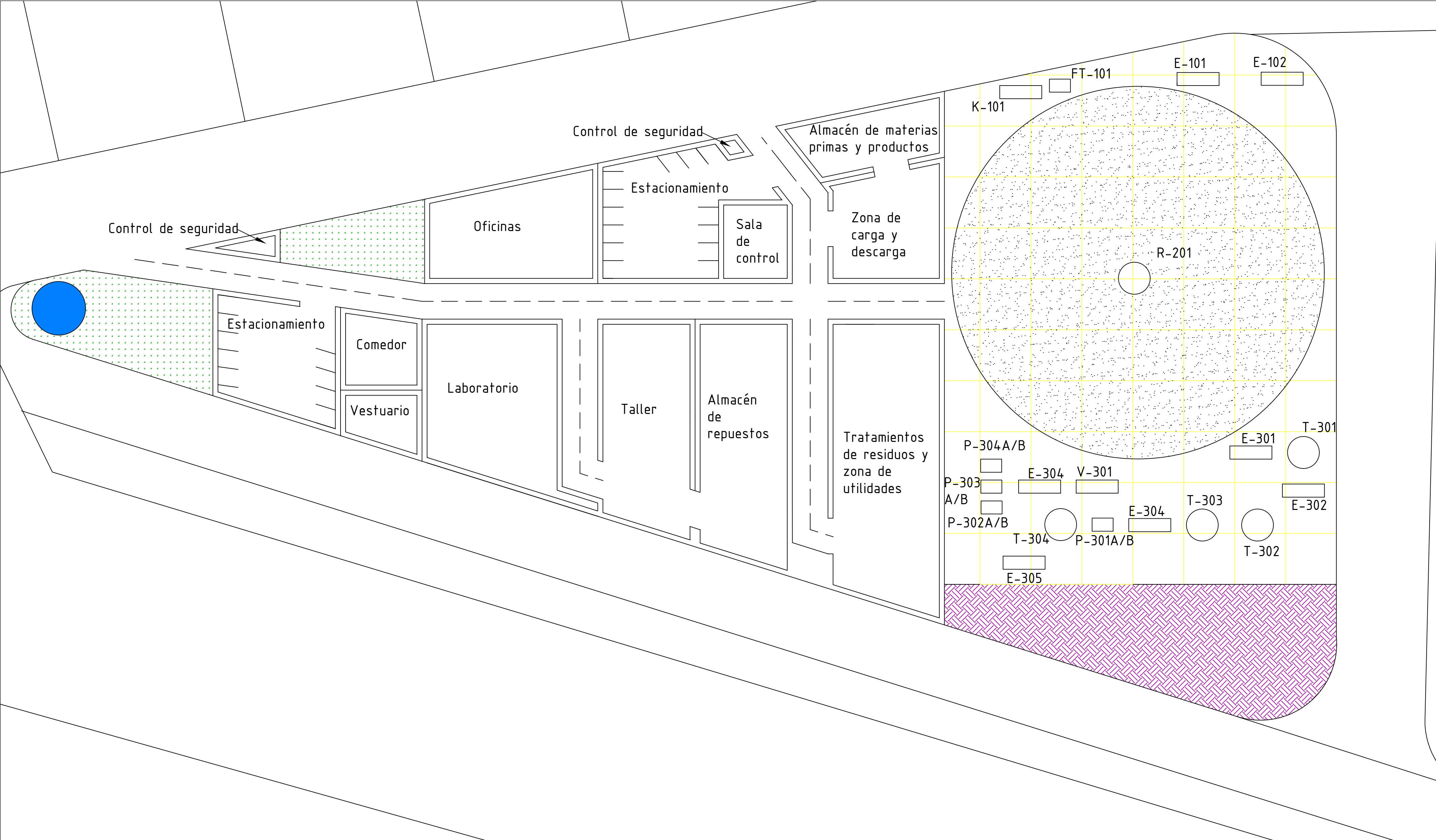
AUTORES: Fernández Soto, Andrea Estefanía
Jauregui Rodríguez, Alejandro José
Marques Cosme, Andrea Paola

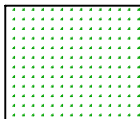
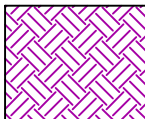
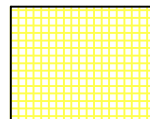
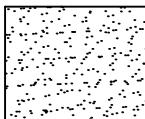
SINATURAS:

ESCALA: Variable

PLANO DE SITUACIÓN Y EMPLAZAMIENTO

PLANO Nº
1



	LEYENDA			NOTAS		 UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO 					
				Los equipos presentes en el plano no se encuentran representados en sus dimensiones reales		PLANTA DE PRODUCCIÓN DE 2-PROPENAL A PARTIR DE PROPILENO					
						AUTORES: Fernández Soto, Andrea Estefanía Jauregui Rodríguez, Alejandro José Marques Cosme, Andrea Paola		SINATURAS:   		ESCALA: 1:500 JUNIO 2021	
						PLANO DE IMPLANTACIÓN		PLANO Nº 2			
 FUENTE  ZONA VERDE  ZONA DE EXPANSIÓN  MALLA EQUIVALENTE A 10 METROS  ÁREA DE EXPOSICIÓN EN CASO DE INCENDIO O EXPLOSIÓN											

VLV-101
Válvula

K-101
Compresor

FT-101
Filtro

E-101
Intercambiador de calor

E-102
Intercambiador de calor

R-201
Reactor

E-301
Intercambiador de calor

T-301
Columna quench

E-302
Intercambiador de calor

T-302
Columna de absorción

VLV-301
Válvula

T-303
Columna de desorción

E-303
Intercambiador de calor

P-301
A/B
Bombas

T-304
Columna de destilación

E-304
Condensador total

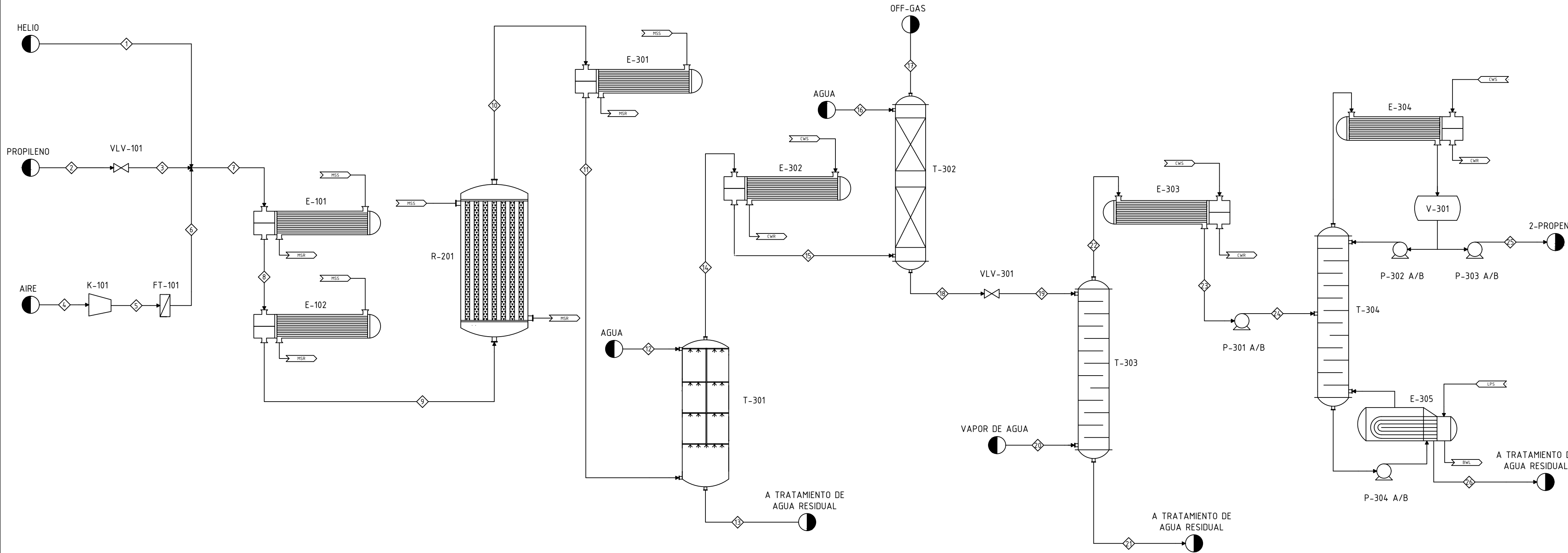
V-301
Tambor de reflujo

P-302
A/B
Bombas

P-303
A/B
Bombas

P-304
A/B
Bombas

E-305
Caldera parcial



Corrientes	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
Temperatura (°C)	30,00	20,00	-30,86	25,00	92,58	92,58	28,44	189,22	350,00	350,00	120,00	5,00	74,88	48,09	20,00	10,00	10,85	16,03	16,03	110,00	99,24	90,92	53,30	53,30	51,99	94,75
Presión inicial (bar)	2,05	15,01	2,05	1,01	2,15	2,05	2,05	2,03	2,02	1,91	1,90	1,62	1,90	1,60	1,57	1,57	1,55	1,57	1,09	1,18	1,18	1,09	1,07	1,14	1,03	1,14
Presión final (bar)	2,05	15,00	2,05	1,01	2,15	2,05	2,05	2,03	2,00	1,90	1,90	1,60	1,70	1,60	1,57	1,55	1,55	1,57	1,09	1,18	1,18	1,09	1,07	1,12	1,01	1,14
Fracción de vapor	1,00	0,00	0,28	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,00	0,00	1,00	1,00	0,00	1,00	0,00	0,00	1,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Caudal másico (kg/h)	620,40	1715,94	1715,94	10100,50	10100,50	10100,50	12436,84	12436,84	12436,84	12436,84	12436,84	5000,00	5368,18	12068,66	12068,66	38732,47	9852,83	40948,30	40948,30	8025,00	46644,94	2328,36	2328,36	2328,36	1395,26	933,10
Caudal molar (kmol/h)	155,00	40,78	40,78	350,13	350,13	350,13	545,91	545,91	545,91	548,52	548,52	277,54	283,35	542,70	542,70	2150,00	3,07	2220,59	2220,59	445,46	2587,84	78,21	78,21	78,21	26,74	51,47
Caudales másicos por componentes (kg/h)																										
Helio	620,40	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	620,40	620,40	620,40	620,40	620,40	0,00	0,00	620,40	620,40	0,00	620,40	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Propileno	0,00	1715,94	1715,94	0,00	0,00	0,00	1715,94	1715,94	1715,94	51,48	51,48	0,00	0,01	51,47	51,47	0,00	51,47	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Oxígeno	0,00	0,00	0,00	2346,71	2346,71	2346,71	2346,71	2346,71	2346,71	368,34	368,34	0,00	0,00	368,34	368,34	0,00	368,34	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrógeno	0,00	0,00	0,00	7753,79	7753,79	7753,79	7753,79	7753,79	7753,79	7753,79	7753,79	0,00	0,04	7753,75	7753,75	0,00	7753,75	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Acroleína	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1652,88	1652,88	0,00	112,83	1540,05	1540,05	0,00	172,21	1367,84	1367,84	0,00	22,11	1345,73	1345,73	1345,73	1337,07	8,66
Agua	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	930,63	930,63	5000,00	5003,80	926,83	926,83	38732,47	103,18	39556,12	39556,12	8025,00	46608,94	972,18	972,18	972,18	47,74	924,44
Dióxido de carbono	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	708,50	708,50	0,00	0,15	708,35	708,35	0,00	707,03	1,32	1,32	0,00	0,00	1,32	1,32	1,32	1,32	0,00
Monóxido de carbono	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	76,45	76,45	0,00	0,00	76,45	76,45	0,00	76,45	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Ácido acrílico	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	241,30	241,30	0,00	232,37	8,93	8,93	0,00	0,00	8,93	8,93	0,00	8,93	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Acetaldehído	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	20,11	20,11	0,00	6,42	13,69	13,69	0,00	0,00	13,69	13,69	0,00	4,56	9,13	9,13	9,13	9,13	0,00
Ácido acético	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	12,96	12,96	0,00	12,56	0,40	0,40	0,00	0,00	0,40	0,40	0,00	0,40	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

UTILIDADES

MSS:

Molten salt supply (suministro de sales fundidas)

MSR:

Molten salt return (retorno de sales fundidas)

CWS:

Cooling water supply (suministro de agua de refrigeración)

CWR:

Cooling water return (retorno de agua de refrigeración)

LPS:

Low pressure steam (vapor a baja presión)

BWL:

Low pressure boiling water (agua en ebullición a baja presión)

USC

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA

GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO

ETSE

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE 2-PROPENAL A PARTIR DE PROPILENO

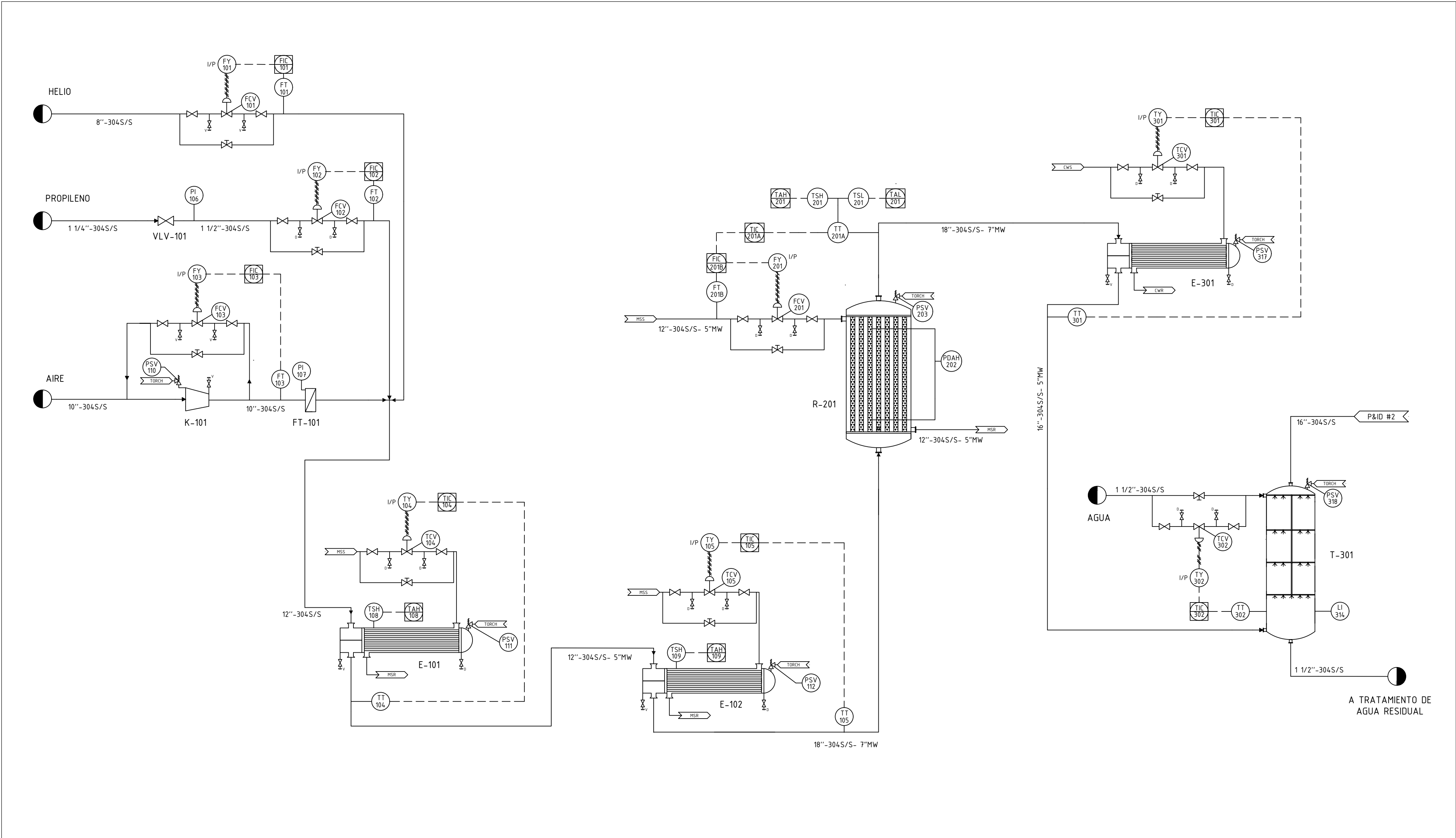
AUTORES: Fernández Soto, Andrea Estefanía
Jauregui Rodríguez, Alejandro José
Marques Cosme, Andrea Paola

SINATURAS:

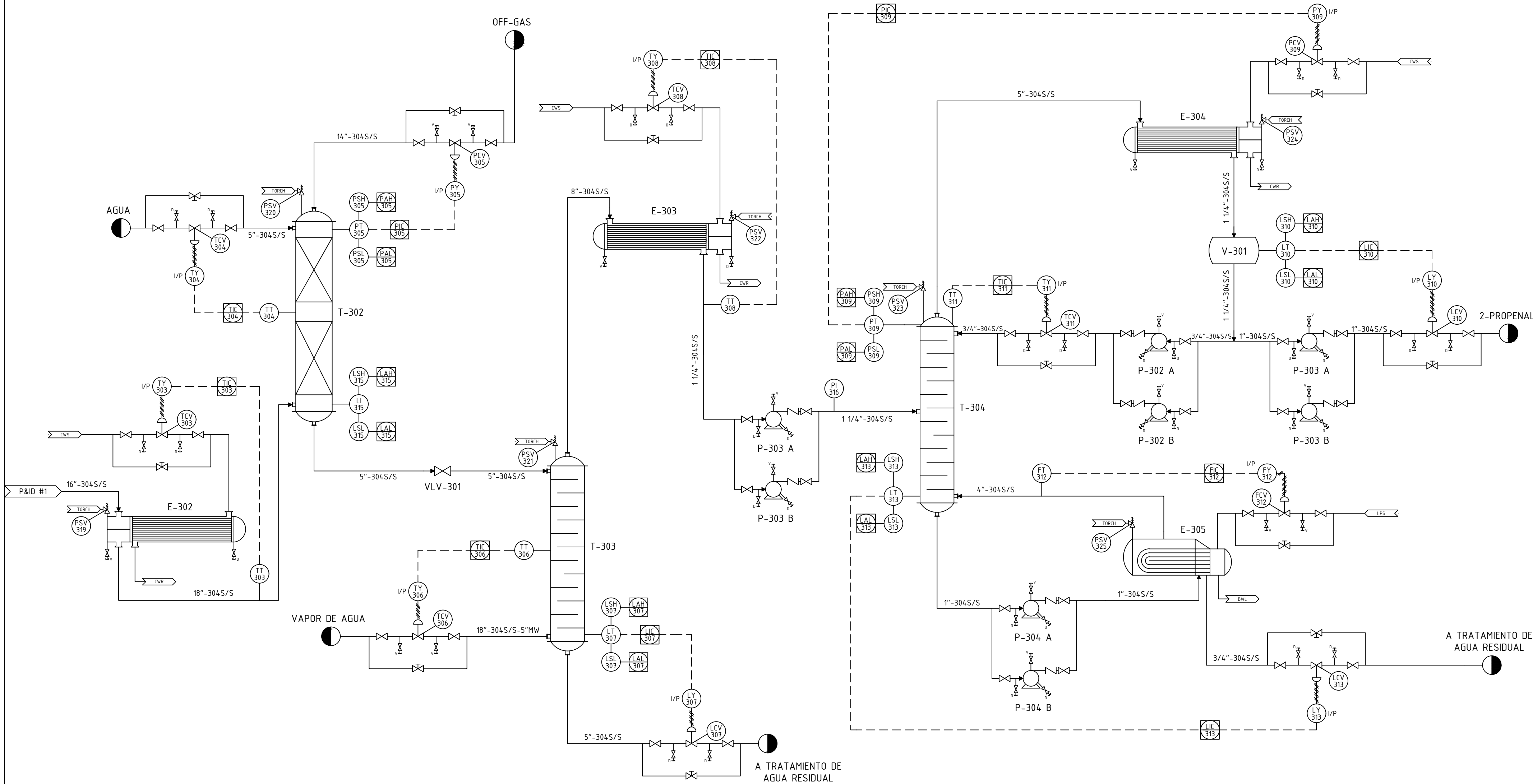
ESCALA: S/E
JUNIO 2021

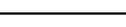
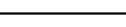
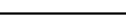
DIAGRAMA DE FLUJO

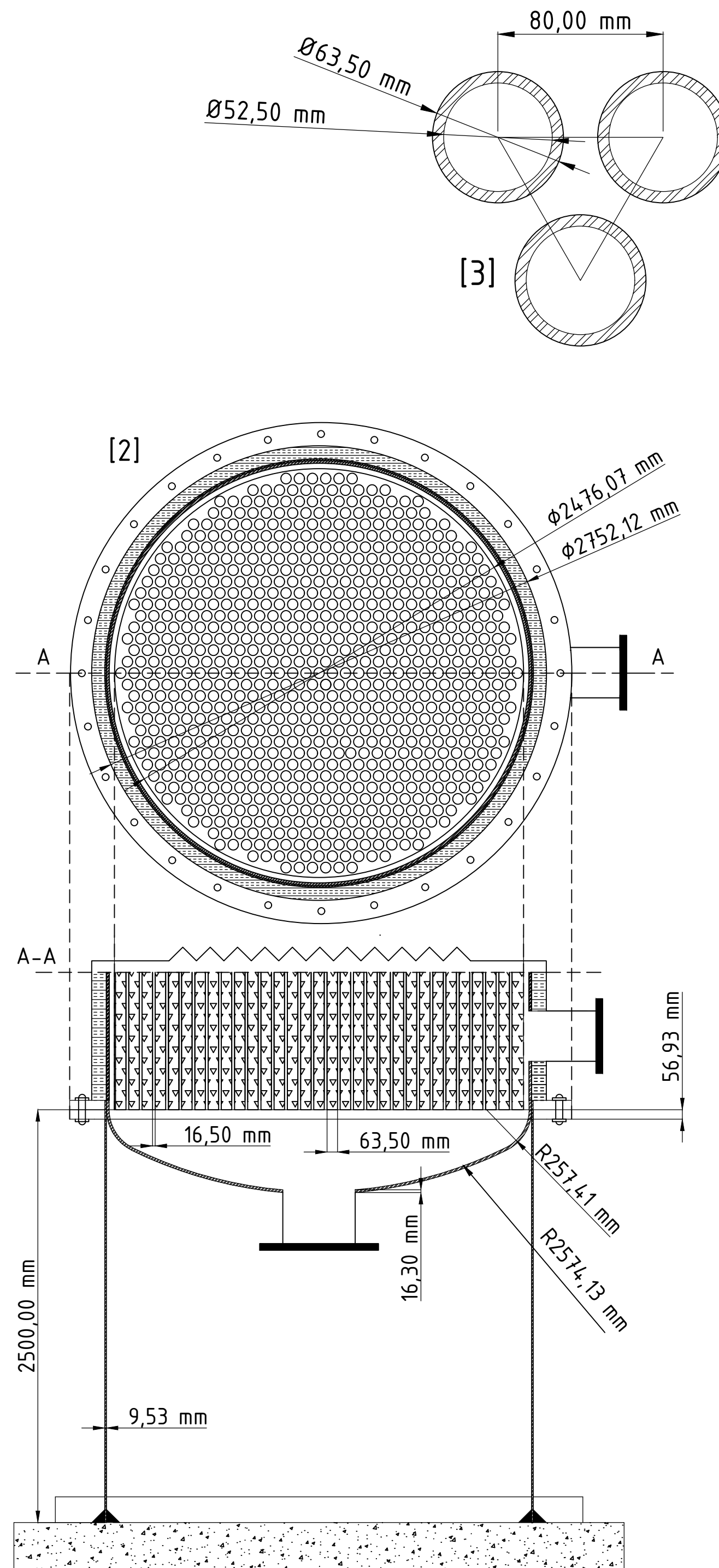
PLANO Nº
3

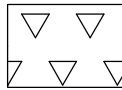
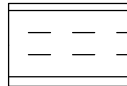


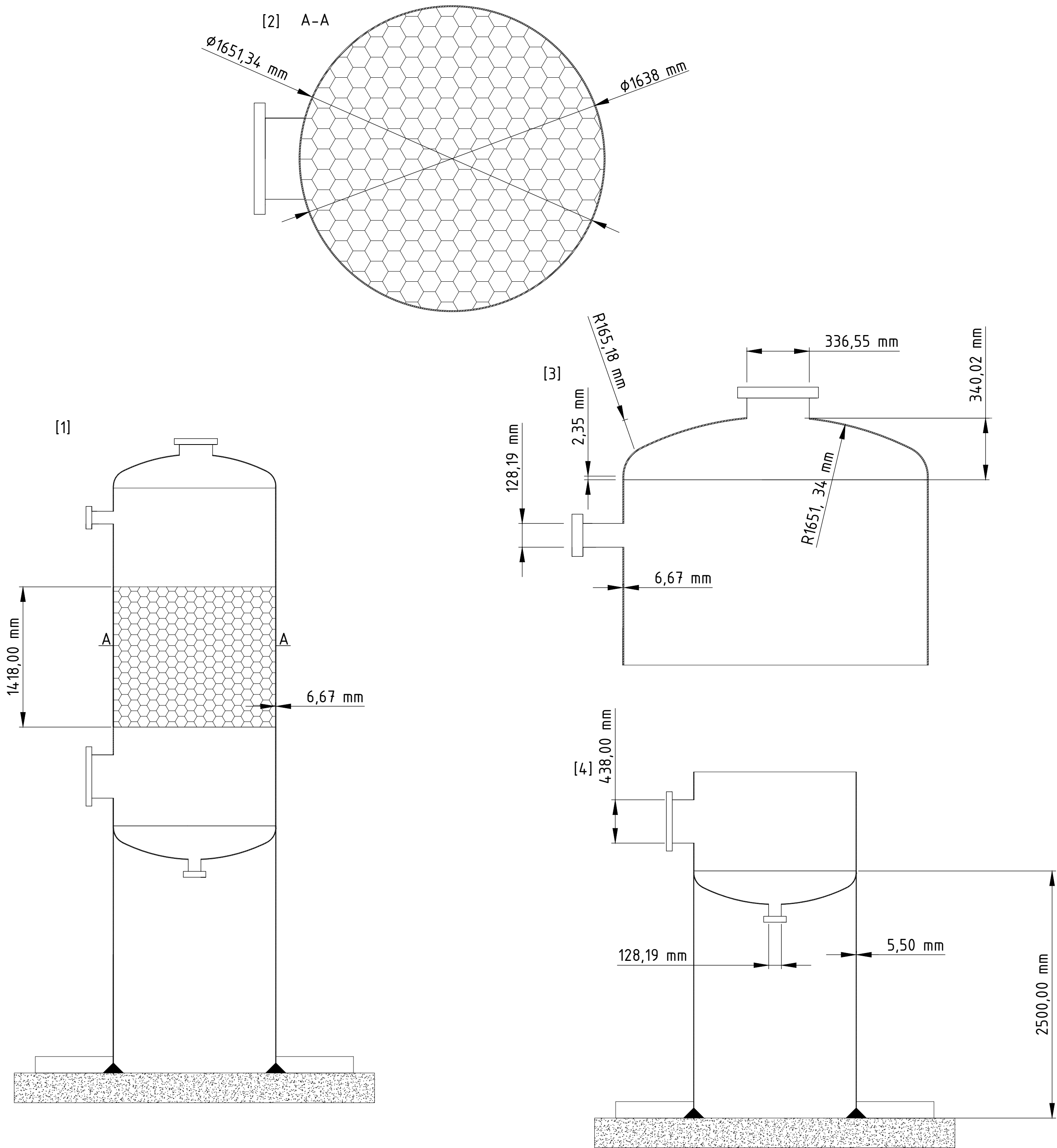
NOMENCLATURA						VÁLVULAS		SEÑALES		SIMBOLOGÍA DE LOS INSTRUMENTOS				ABREVIATURAS		UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO			
A: Sección del lazo BB: Nº del lazo																			
Primera letra (X)		Letras sucesivas (YY)				Válvula no especificada		Líneas de proceso		Según función		Según localización		TORCH: antorcha		PLANTA DE PRODUCCIÓN DE 2-PROPENAL A PARTIR DE PROPILENO			
F	Flujo	A	Alarma	L	Bajo	Válvula de control		Señal eléctrica		Elemento discreto		En campo		MSS: suministro de sales fundidas					
T	Temperatura	T	Transmisor	Y	Conv. señal	Válvula de control manual		Señal neumática		Elemento que realiza la función de control		En sala de control		MSR: retorno de sales fundidas		AUTORES: Fernández Soto, Andrea Estefanía Jauregui Rodríguez, Alejandro José Marques Cosme, Andrea Paola		SINATURAS: 	



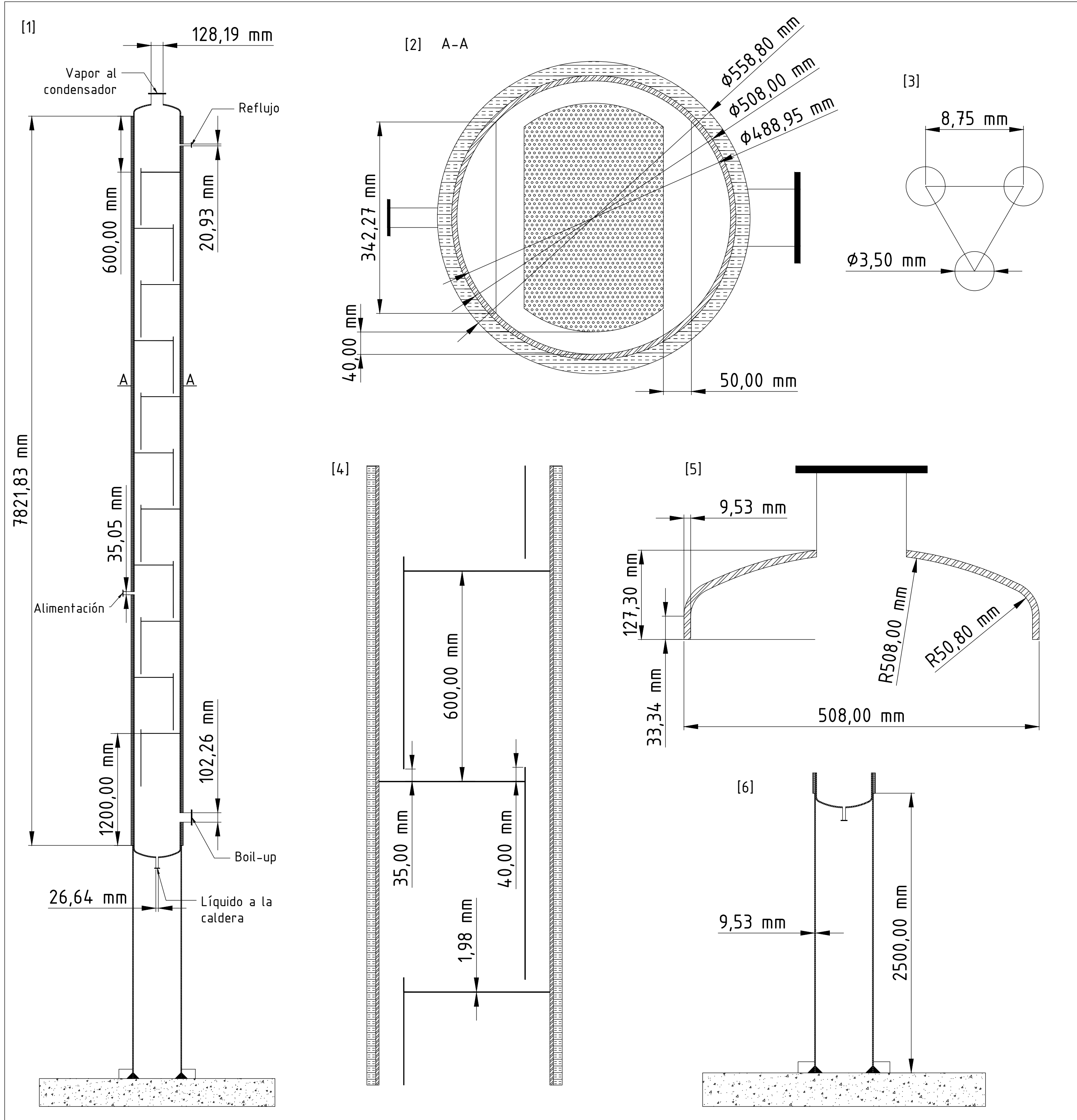
NOMENCLATURA						VÁLVULAS		SEÑALES	SIMBOLOGÍA DE LOS INSTRUMENTOS		ABREVIATURAS	UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO				
A: Sección del lazo BB: Nº del lazo																
Primera letra (X)		Letras sucesivas (YY)				 Válvula no especificada		 Líneas de proceso	Según función		Según localización		TORCH: antorcha	PLANTA DE PRODUCCIÓN DE 2-PROPENAL A PARTIR DE PROPILENO		
F	Flujo	A	Alarma	L	Bajo	 Válvula de control		 Señal eléctrica	 Elemento discreto	 En campo		MSS: suministro de sales fundidas	AUTORES: Fernández Soto, Andrea Estefanía Jauregui Rodríguez, Alejandro José Marques Cosme, Andrea Paola			
T	Temperatura	T	Transmisor	Y	Conv. señal	 Válvula de control manual		 Señal neumática	 Elemento que realiza la función de control	 En sala de control		MSR: retorno de sales fundidas				SINATURAS:   
D	Diferencial	I	Indicador	V	Válvula	 Venteo						CWS: suministro de agua de refrigeración	ESCALA: S/E			
L	Nivel	C	Controlador	S	Interruptor	 Drenaje						CWR: retorno de agua de refrigeración				JUNIO 2021
P	Presión	H	Alto			 Válvula de alivio										
						 Válvula antirretorno										BWL: agua en ebullición a baja presión
																MW: aislante de lana mineral

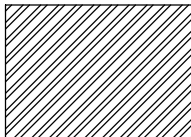
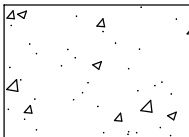
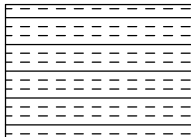


DATOS DE DISEÑO		
Código de diseño	ASME BPV Sec. VIII Div. 1	
Nombre	Reactor catalítico de lecho fijo	
Etiqueta	R-201	
Tipo	Cilíndrico	
Orientación	Vertical	
Material de construcción	Acero inoxidable 304	
Aislante	Fibra de vidrio	
Número de tubos	816	
Número de baffles	6	
Diámetro del catalizador	4,50 mm	
Masa de catalizador	7909,19 kg	
Fluido refrigerante	Sales fundidas	
Calidad de la alimentación	Gas	
Caudal alimentado	12436,86 kg/h	
Temperatura de diseño	377,78 °C	
Presión de diseño	3,72 bar	
Caída de presión	0,09 bar	
LEYENDA		
 Acero inoxidable 304	 Catalizador	
 Fibra de vidrio	 Concreto	
NOTAS		
[1] Reactor, escala 1:25 [2] Interior del reactor y soporte, escala 1:25 [3] Pitch triangular, escala 1:2		
 UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO 		
PLANTA DE PRODUCCIÓN DE 2-PROPENAL A PARTIR DE PROPILENO		
AUTORES:	SINATURAS:	
Fernández Soto, Andrea Estefanía		ESCALA: VARIABLE
		JUNIO 2021
REACTOR R-201		
PLANO Nº		
5		



DATOS DE DISEÑO	
Código de diseño	ASME BPV Sec. VIII Div. 1
Nombre	Columna de absorción
Etiqueta	T-302
Tipo	Cilíndrico
Material de construcción	Acero inoxidable 304
Tipo de columna	Columna de relleno
Relleno	Monturas de Berl
Diámetro de relleno	25 mm
Material del relleno	Cerámica
Tipo de soporte	Falda recta
Caudal de líquido alimentado	38732,47 kg/h
Caudal de gas alimentado	12068,65 kg/h
Temperatura de diseño	20 °C
Presión de diseño	1,57 bar
Caída de presión	0,19 bar
LEYENDA	
	Acero inoxidable 304
	Concreto
	Relleno de columna
NOTAS	
[1] Columna de absorción, escala 1:30	
[2] Corte de relleno, escala 1:16	
[3] Cabezal torisférico, escala 1:16	
[4] Soporte de la columna, escala 1:30	
UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO	
PLANTA DE PRODUCCIÓN DE 2-PROPENAL A PARTIR DE PROPILENO	
AUTORES: Jauregui Rodríguez, Alejandro José	SINATURAS:
ESCALA: VARIABLE	
JUNIO 2021	
COLUMNA DE ABSORCIÓN T-302	
PLANO Nº 6	



DATOS DE DISEÑO	
Código de diseño	ASME BPV Sec. VIII Div. 1
Nombre	Columna de destilación
Etiqueta	T-304
Tipo	Cilíndrico
Material de construcción	Acero inoxidable 304
Aislante	Fibra de vidrio
Número de platos	11
Tipo de platos	Perforados
Número de orificios en el plato	1558
Tipo de soporte	Falda recta
Calidad de la alimentación	Líquido saturado
Caudal alimentado	2328,36 kg/h
Temperatura de diseño	122,53 °C
Presión de diseño	2,86 bar
Caída de presión	0,13 bar
LEYENDA	
	Acero inoxidable 304
	Concreto
	Fibra de vidrio
NOTAS	
[1] Columna de destilación, escala 1:30 [2] Plato perforado, escala 1:5 [3] Pitch triangular, escala 4:1 [4] Bajante, escala 1:8 [5] Cabezal torisférico, escala 1:4 [6] Soporte de la columna, escala 1:25	
USC UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO ET SE	
PLANTA DE PRODUCCIÓN DE 2-PROPENAL A PARTIR DE PROPILENO	
AUTORES:	SINATURAS:
Marques Cosme, Andrea Paola	Andrea Paola Marques Cosme
	ESCALA: Variable
	JUNIO 2021
COLUMNA DE DESTILACIÓN T-304	
	PLANO Nº 7

**DOCUMENTO III:
ESTUDIOS CON
ENTIDAD PROPIA**

ÍNDICE

ESTUDIO DE IMPACTO AMBIENTAL

1. Objeto	1
2. Descripción del proyecto	1
2.1. Emisiones generadas	4
2.2. Ubicación de la planta.....	5
3. Examen de alternativas	5
3.1. Justificación de la alternativa seleccionada	7
4. Inventario ambiental	8
4.1. Clima	8
4.2. Calidad del aire	10
4.3. Edafología e hidrología	11
4.4. Molestias por ruido	13
4.5. Flora y fauna.....	14
4.6. Población y empleo.....	15
4.7. Uso del suelo.....	16
4.8. Paisaje y patrimonio	16
5. Identificación y valoración de impactos	16
5.1. Matriz de Leopold	18
6. Repercusiones en la Red Natura 2000	20
7. Medidas para reducir, eliminar o compensar los impactos	20
7.1. Buenas practicas.....	20
7.2. Medidas para la fase de construcción.....	21
7.3. Medidas para la fase de explotación.....	21
7.4. Medidas para la fase de desmantelamiento	22
8. Programa de vigilancia y seguimiento ambiental	22
9. Documento de síntesis	24
10. Bibliografía	25

ESTUDIO DE IMPACTO AMBIENTAL

1. Objeto

El Estudio de Impacto Ambiental consiste en un documento elaborado por el promotor que acompaña al proyecto. Este es requerido para cada proyecto con el objetivo de identificar, cuantificar y analizar los posibles impactos ambientales derivados de las fases de ejecución, explotación y desmantelamiento de la planta. Por consiguiente, será posible determinar las medidas preventivas necesarias a aplicar, junto con las medidas para corregir y compensar los posibles impactos.

Asimismo, en el documento se analizarán las alternativas existentes del proceso que sean viables, justificando la alternativa seleccionada. De forma que este estudio permite responder a la responsabilidad ética y legal que toda empresa tiene con la comunidad, tanto para asegurar la salud y bienestar de los trabajadores, como para prevenir accidentes y preservar la calidad del aire, agua y la tierra (1).

Además, teniendo en cuenta que todo proceso químico conlleva cierto grado de peligro, este estudio es fundamental, permitiendo determinar cuáles son las mejores técnicas de ingeniería que minimizan los riesgos de la puesta en marcha del proyecto. Asegurándose asimismo que estos se encuentren en niveles aceptables (1).

Cabe destacar, que el Estudio Ambiental del presente proyecto será desarrollado siguiendo la estructura marcada por la Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental. La finalidad de esta ley es garantizar que en todo el territorio español se cumpla con un elevado nivel de protección ambiental, así como promover el desarrollo sostenible. En el artículo 7 de la ley se recoge su ámbito de aplicación. Siendo “Proyectos sometidos a la evaluación ambiental ordinaria regulada en el título II, capítulo II, sección 1.ª” aquellos pertenecientes al Anexo I.

Concretamente, el proyecto de estudio, la planta de producción de 2-propenal, pertenece al Grupo 5 del Anexo I que corresponde a los proyectos de “Industria química, petroquímica, textil y papelería”. Así pues, los apartados mostrados a continuación corresponden a la estructura detallada en el Anexo VI de la Ley 21/2013, de 9 de diciembre.

2. Descripción del proyecto

El Estudio Ambiental se realiza al presente proyecto de producción de 2-propenal con una capacidad de 10.000 toneladas anuales. La operación se realiza en continuo durante 320 días al año, las 24 horas del día. Empleando el resto de los días para mantenimiento y limpieza. El proceso se divide en tres secciones: sección 100 de acondicionamiento de materias primas, sección 200 de reacción y sección 300 dedicada a la separación y purificación del 2-propenal. El funcionamiento de estas secciones será resumido a continuación.

• Sección 100: Acondicionamiento de las materias primas

El objetivo de esta sección es acondicionar las corrientes de materias primas, de forma que se encuentren en las condiciones óptimas para su entrada al reactor R-201. Concretamente, se unen las corrientes de helio, aire y propileno, ya todas con una presión de 2,05 bar. Cabe destacar, que el aire es pasado por el filtro FT-101 para evitar la entrada de impurezas al sistema, y el propileno para por la válvula VLV-101 para disminuir su presión dado que se almacena líquido a 15,01 bar.

La corriente resultante, cuya composición de propileno es menor al 7,5% molar, debido a su límite de inflamabilidad, es calentada hasta 350 °C para ser posteriormente llevada al reactor.

- **Sección 200: Reacción**

Esta sección está constituida por el reactor R-201 donde tiene lugar la oxidación parcial del propileno para la formación de 2-propenal y subproductos. Se trata de una reacción catalítica heterogénea que se lleva a cabo en el interior de diversos tubos del reactor empleando partículas esféricas de molibdato de bismuto multicomponente soportado en alúmina como catalizador. Asimismo, dado que las reacciones presentes en el reactor son exotérmicas, en la carcasa del reactor circulan sales fundidas con el objetivo de retirar el calor generado y mantener un sistema isotérmico en el reactor. El calor generado por las múltiples reacciones es de 6.290,04 kW requiriendo por lo tanto 138 kg/s del fluido refrigerante para operar a 350 °C y 2 bar con una caída de presión de 0,1 bar.

El propileno tiene una conversión del 97%, siendo oxidado parcialmente para producir el 2-propenal y el subproducto acetaldehído con una selectividad del 83 y 1,7% respectivamente. A su vez una cantidad del 2-propenal, también conocido como acroleína, y el acetaldehído reaccionan con el oxígeno para formar los ácidos acrílico y acético. No obstante, el resto de propileno se oxida completamente formando óxidos de carbono.

Por consiguiente, la corriente de salida del reactor tiene una composición másica del 13,3% acroleína; 2% de ácido acrílico; 0,6% monóxido de carbono; 5,7% dióxido de carbono; 0,2% acetaldehído; 0,1% de ácido acético; 7,5% agua; 0,4% propileno; 3% oxígeno; 62,3% nitrógeno y un 4,9% de helio. Debido a la variedad de compuestos en la corriente de salida, esta es llevada a la sección de separación y purificación, con el fin de separar las impurezas de la acroleína.

- **Sección 300: Separación y purificación**

En esta sección del proceso se engloban cuatro equipos de separación, con el fin de cumplir con las especificaciones de calidad exigidas para la venta de la acroleína. Siendo estas referidas a la composición másica: una pureza entre el 95% y 97%, y un contenido de impurezas de bajo punto de ebullición y agua menor al 2% y 4%, respectivamente.

Los cuatro equipos de separación empleados en esta sección son: columna *quench* T-301, columna de absorción T-302, columna de desorción T-303 y columna de destilación T-304. Asimismo, se sitúa antes de la entrada de cada uno de estos equipos (exceptuando la columna de desorción) un intercambiador de calor para obtener la corriente en condiciones óptimas.

En el primer equipo, la columna *quench* T-301, se separan los ácidos acético y acrílico mediante el lavando la corriente gaseosa proviniendo del reactor con agua fría. Estos ácidos junto con el agua, acroleína y pequeñas cantidades de los gases de reacción que también son lavados, salen por colas del equipo, y son llevados a un tratamiento de aguas residuales. Por otro lado, la salida gaseosa del *quench*, que contiene mayoritariamente los gases de reacción, así como la acroleína formada y los subproductos que no se lavaron, es llevada a la columna de absorción T-302.

El principal objetivo de la columna T-302 es absorber la acroleína en el agua, separándola así de la corriente gaseosa que sale por cabezas de este equipo. La corriente gaseosa contiene mayoritariamente las materias primas que no reaccionaron, los óxidos de carbono y los gases inertes de la reacción, con trazas de acroleína y acetaldehído. Esta corriente gaseosa se dirige a una estación de tratamiento de *off-gas*, que no es objeto de estudio en el presente proyecto, en el cual se separará el helio de los demás compuestos gaseosos, para su posterior reutilización.

No obstante, la corriente líquida que contiene la acroleína, después de disminuirle la presión, es llevada al tercer equipo, la columna de desorción T-303. En este equipo se consigue eliminar una

cantidad considerable de agua junto a las trazas de ácidos que no habían sido eliminados en la columna *quench*. De esta manera, mientras que por colas sale el agua con trazas de ácidos para el tratamiento de aguas residuales, por cabezas del equipo se consigue una corriente de vapor de agua que contiene a la acroleína.

Esta última corriente, después de pasar por el intercambiador de calor, se introduce a la columna de destilación T-304. El principal objetivo de la columna de destilación es enriquecer la corriente de producto en acroleína, de manera que se cumplan con los requerimientos de pureza exigidos para su venta. De esta, por colas se obtiene una corriente líquida, compuesta mayoritariamente por agua con trazas de acroleína. Parte de esta corriente se recircula en fase vapor a la columna, al pasar por la caldera parcial, mientras que la otra parte corresponde al líquido saturado que es llevado al tratamiento de aguas residuales.

Asimismo, se obtiene por cabezas de la columna T-304 una corriente de vapor que es llevada a un condensador total y luego a un tambor de reflujo. Del tambor de reflujo se obtiene la corriente de reflujo que se introduce nuevamente a la columna, y la corriente de destilado con el producto deseado con una pureza del 95,83% en peso.

Para llevar a cabo el correcto funcionamiento de la planta se consumen diversos recursos y utilidades. Lo principal es obtener las materias primas, siendo requeridas para el proyecto el propileno, el aire y el helio. No obstante, el aire no será comprado y el helio es recuperado y recirculado a la planta, siendo de mayor importancia por lo tanto el propileno.

Asimismo, se requiere el catalizador de molibdato de bismuto multicomponente, pero dado su alta vida útil solo se comprará cada 5 años. Además, se utilizan unos elevados caudales de agua para la operación de las columnas *quench* y de absorción, siendo este 278 y 2.150 kmol/h respectivamente. Mientras que, para la columna de desorción se requiere un caudal de vapor de agua de 446 kmol/h.

Del mismo modo, se emplea agua de refrigeración, sales fundidas y vapor de agua de baja presión en los distintos intercambiadores presentes en la planta. En total, los caudales requeridos para este proyecto son de 70,67; 184,17 y 15,75 kg/s, respectivamente.

Por otro lado, las aguas residuales generadas son llevadas a su respectivo tratamiento, siendo la suma de estas: 52.946,22 kg/h con una composición másica de 99,23% agua, 0,46% ácido acrílico, un 0,27% acroleína y otros compuestos en trazas minoritarias. El agua residual proviene de la salida líquida por colas de las columnas *quench*, de desorción y de destilación.

Es fundamental considerar también los gastos energéticos debido a la electricidad que se requiere para el funcionamiento de las bombas, el compresor del aire, así como las luces de los diversos edificios de la planta. Sin embargo, el Estudio del Impacto Ambiental no solo se realiza al funcionamiento de las secciones de la planta. Por consiguiente, se identificarán los impactos ocasionados por las diversas fases del proyecto: de construcción, de explotación y de desmantelamiento.

En la fase de construcción se incluirá el acondicionamiento del terreno, la cimentación, las estructuras y la instalación de la planta. Sin embargo, ha de destacarse que las acciones para esta fase se minimizan dado que se localiza la planta en una parcela industrial con el terreno ya casi acondicionado y con sistemas de comunicaciones ya presentes.

Por otro lado, en la fase de explotación se ha de considerar el funcionamiento regular de la planta, que cuenta con las tres secciones descritas anteriormente, así como los demás departamentos para investigaciones y controles de seguridad. Esto incluye la generación de aguas residuales, las emisiones a la atmósfera y el tránsito de vehículos.

Por último, la fase de desmantelamiento se lleva a cabo después de los 20 años estimados como tiempo de vida útil del proyecto. El desmantelamiento se hace por lo tanto ante la inactividad de la planta para la eliminación de esta o su acondicionamiento para un nuevo proyecto.

2.1. Emisiones generadas

Los principales factores ambientales que se van a considerar en las fases mencionadas anteriormente son las emisiones gaseosas, la generación aguas residuales, residuos y del ruido. Las cuales se exponen con más detalle a continuación.

- **Emisiones gaseosas:** Para todas las fases de estudio se considera un aumento en las emisiones gaseosas debido a diversas razones. En la fase de construcción las emisiones son debidas mayoritariamente al acondicionamiento del terreno, incluyendo las emisiones de polvos al mover las tierras, y la maquinaria empleada para la instalación de la planta. Sin embargo, el mayor impacto se genera en la fase de explotación, como se mencionó anteriormente la única salida gaseosa del proceso se debe a la salida por cabezas del absorbedor. Esta corriente, que contiene He, H₂O, N, O₂, C₃H₆, CO y CO₂ es llevada al tratamiento *off-gas*, que la hace pasar por las membranas SEPURAN® para recuperar el helio separándolo de los demás compuestos mediante su permeabilidad. La recuperación es el 99,99% de helio, pero los demás compuestos deben continuar un tratamiento antes de ser vertidos a la atmósfera (2).

Entre los compuestos que continúan para el tratamiento *off-gas*, el nitrógeno no representa un peligro para la atmósfera, al ser un gas inerte ya presente en el aire, pero los demás requieren tratamiento, como ser introducidos a un incinerador. Todos los compuestos presentes en esta corriente pueden ser oxidados hasta dióxido de carbono, como se ha mostrado en la Figura 1 del Anexo II: Cálculos justificativos. Parte B: Reactor R-201.

No obstante, hay que considerar que los óxidos de carbono se encuentran listados como contaminantes atmosféricos por la Ley 34/2007, de 15 de noviembre. Esto implica buscar la solución más viable, entre incineración, tecnologías de eliminación biológicas u otras tecnologías de tratamiento para contaminantes gaseosos, que minimicen el impacto ambiental y permitan la emisión de dicha corriente cumpliendo con la legislación pertinente. Sin embargo, como se ha mencionado anteriormente, el tratamiento *off-gas* no es objeto de estudio en el presente proyecto, asumiendo por lo tanto que esta corriente es tratada correctamente. Concretamente, se ha optado por asumir, a falta de un estudio más detallado, el empleo de antorchas (3-4).

Además, en menor magnitud, hay que considerar las emisiones de gases provenientes de las válvulas de alivio del proceso. Estas emisiones entran como contaminación atmosférica y son dirigidos a antorcha antes de emitirse.

- **Generación de aguas residuales:** La generación de agua residual se ve afectada mayoritariamente en la fase de explotación. Concretamente, las corrientes de aguas son empleadas en el *quench* y en la torre de absorción. Estas corrientes son posteriormente sacadas del sistema desde el *quench*, las columnas de desorción y destilación.

Estas corrientes deben ser enviadas a la red de tratamiento de aguas residuales del polígono para ser adecuadamente manejadas antes de verterlas, siempre cumpliendo con las especificaciones del Real Decreto Legislativo 1/2001, de 20 de julio, que aprueba el texto refundido de la Ley de Agua (5).

Asimismo, también se generan aguas residuales por otras acciones como pueden ser los baños y las oficinas que deben ser enviadas a tratamiento como aguas residuales urbanas.

- **Generación de residuos:** El presente proyecto solo genera un tipo de residuo peligroso, siendo este el catalizador al final de su vida útil. El resto de los residuos son inertes, los cuales se generan en todas las fases, siendo mayor la generación en las fases de construcción y desmantelamiento. Aunque al ser no peligrosos, los residuos que se generan podrán ser tratados sin complicaciones mediante la propia planta si se decide disponer de una planta de

tratamiento de residuos aumentando la inversión económica. Sin embargo, por la disponibilidad de terreno, se empleará la propia planta de tratamientos de residuos del polígono.

- **Generación de ruido:** Este factor se ve afectado por el tránsito de vehículos pesados, así como por la operación de los diversos equipos de la planta, destacando bombas, compresores y transformadores. La emisión de ruido está limitada por la Ley 37/2003 así como por el Decreto 176/2009. La actividad de la planta cumplirá por lo tanto las exigencias de la zona y al tratarse de una zona industrial las emisiones de ruido deben ser inferiores a 70 dB (6).

2.2. Ubicación de la planta

Para la selección de la ubicación de la planta se han empleado los datos del estudio de mercado mostrado en el *Documento I: Memoria* de este proyecto. Concluyendo de forma general que su emplazamiento debe ser España, dada la demanda y el elevado coste de transporte. Más concretamente se ha seleccionado el polígono Riu Clar en la ciudad de Tarragona.

En Tarragona se elabora el 25% de la producción química nacional y cuenta por lo tanto con una gran red de comunicaciones y servicios. Sin embargo, su selección se debe a una estrategia para disminuir los costes de transporte, dado que se encuentra cerca de la empresa Sonatrach, que suministrará el helio a la planta, y en este mismo polígono se encuentra el Complejo Petroquímico de Repsol, estando presente en Tarragona además BASH Sonatrach, ambos capaces de administrar el propileno requerido. Asimismo, se cuenta con el puerto de Tarragona para la exportación del producto (7).

Desde el polígono también se cuenta con acceso a las ciudades más importantes de España mediante las autopistas y autovías AP-7, A-7 y las AP-2, A-2, las cuales también pueden emplearse para llegar otros países como Reino Unido o Francia. Este además se encuentra a 10,3 km del aeropuerto Reus y solo a 7 km de la ciudad de Barcelona, disponiendo por lo tanto del aeropuerto Prat si fuera necesario (8).

Por último, también se tuvo en cuenta para la ubicación consideraciones políticas y el impacto ambiental. Se quiso seleccionar un polígono industrial que ayude a minimizar los impactos ambientales, teniendo en Riu Clar por ejemplo Red de Vigilancia y Previsión de la Contaminación Atmosférica (XVPCA). Esto muestra una iniciativa hacia un futuro más sostenible, verificando in situ que en el terreno cumple las normativas pertinentes respecto a los niveles de la contaminación atmosférica (9). El polígono también forma parte de la Asociación Empresarial Química de Tarragona (AEQT), que pueden asistir en temas como logística, seguridad, cambios legislativos e infraestructuras. Contando con mano de obra disponible, un clima propicio y sin riesgos por sismos (10).

3. Examen de alternativas

La alternativa seleccionada para la producción de la acroleína ha sido la oxidación parcial del propileno dado que presenta diversas ventajas respecto a las otras alternativas disponibles. A continuación, se resumen las tres alternativas estudiadas para la producción de acroleína justificando por último la seleccionada.

- **Deshidratación de glicerina:**

Esta alternativa ha sido estudiada desde hace años, sin embargo, no se consideró viable por el elevado coste de obtención de la glicerina hasta los inicios del siglo XXI, donde su precio empezó a disminuir. La acroleína puede producirse mediante la deshidratación de la glicerina tanto en fase

liquida como en fase gas. No obstante, por diversas limitaciones se considera viable solo la deshidratación en fase gas (11-12).

El proceso es similar al requerido para la oxidación de propileno, siendo primero necesario acondicionar las materias primas a las condiciones óptimas para el reactor (275 °C y 1 atm). La materia prima requerida es la glicerina, que es calentada con vapor a alta temperatura. Cabe destacar, que si se tratase de glicerina cruda el pretratamiento sería más exigente dado que se deben eliminar sales, ácidos grasos y materia orgánica presente en la corriente.

La reacción se logra en presencia de un catalizador ácido, consiguiendo una conversión completa de la glicerina, pero solo con un rendimiento del 70% hacia la acroleína. Siendo el resto de los compuestos acetaldehído, propionaldehído, ácidos acético y acrílico entre otros (13). La corriente de salida del reactor se lava con agua fría para eliminar los compuestos de alto punto de ebullición. Posteriormente, la corriente de proceso se lleva a un absorbedor, para separar los gases no condensables, y en una columna de desorción para obtener la acroleína cruda. Finalmente, esta se purifica pasando por una columna de extracción y por una columna de destilación.

- **Acoplamiento oxidativo de alcoholes:**

Esta alternativa surgió por la búsqueda de un proceso de producción de acroleína que disminuya la huella de carbono del proceso. El objetivo de esta alternativa es llevar a cabo la reacción de oxidación del metanol y del etanol en un mismo reactor, disminuyendo así el coste de capital requerido para otras alternativas consideradas hoy en día no viables, como la condensación de formaldehído y acetaldehído (13).

Por lo tanto, el proceso emplea como materias primas el etanol, metanol y el aire. Las corrientes de estos compuestos son acondicionadas llevándolas a temperaturas superiores a 200 °C y a una presión de entre 2 o 3 bar. Posteriormente, son introducidas a un reactor multitubular, que emplea sales fundidas para el control de la temperatura. El catalizador recomendado para este proceso es de hierro-molibdato, sin embargo, aun así, el rendimiento alcanzado respecto a la acroleína es entorno al 50%. Formándose por lo tanto una alta variedad de subproductos, como por ejemplo el acetaldehído y el formaldehído.

La sección de purificación del proceso no es muy diferente a la descrita en la alternativa de deshidratación de glicerina. Siendo el primer equipo un *quench*, para el enfriamiento rápido y la separación de algunos subproductos, seguido de unas columnas de absorción, desorción y destilación, respectivamente. Aunque, al requerir aire en el reactor esta alternativa cuenta con una recirculación de este, separándolo del resto de gases que salen por cabezas del absorbedor que son purgados a un incinerador catalítico (13).

- **Oxidación parcial de propileno:**

Esta alternativa ha sido empleada desde 1958, contando con el propileno y el aire como materias primas. Sin embargo, también se requiere un elevado caudal de inerte que permita operar de forma segura manteniendo el propileno fuera de sus límites de inflamabilidad. De forma general, la entrada del proceso es por lo tanto aire, propileno y el inerte, y al igual que en las demás alternativas estos son acondicionados para su entrada al reactor. El reactor es catalítico multitubular y opera a una temperatura entre 300 y 400 °C, y una presión de 1,5 a 2,5 bar. En este reactor también se debe disponer de un fluido refrigerante para retirar el calor generado por las reacciones que son altamente exotérmicas (14).

Una gran ventaja que presenta este proceso es que, debido a tantos años de estudio, se han desarrollado catalizadores que permiten una alta conversión del propileno, mayor al 96%, con alta selectividad respecto a la acroleína, superior al 75%. Esto ha permitido disminuir la formación de subproductos notoriamente, llegando hasta a eliminar por completo la formación de ciertos subproductos como el formaldehído.

Por otro lado, después del reactor los equipos empleados para la purificación de la acroleína son los mismo que se han descrito en la alternativa de alcoholes. Siguiendo por lo tanto el orden de: un *quench*, una columna de absorción, con un tratamiento *off-gas* para la recirculación del inerte, y las columnas de desorción y destilación.

3.1. Justificación de la alternativa seleccionada

Para la esta decisión se debe considerar las ventajas y desventajas que presentan las diversas alternativas estudiadas, las cuales se resumen a continuación.

Primeramente, respecto a la alternativa de deshidratación de la glicerina, esta es una alternativa bio que consigue altos rendimientos comparables con la oxidación parcial del propileno. Sin embargo, debido a la ausencia de oxígeno se forman grandes acumulaciones de coque, que conlleva a la rápida desactivación del catalizador (13). Ahora bien, actualmente se sabe que el agotamiento de los recursos fósiles es un hecho indiscutible, es por ello que se están tomando medidas para emplear nuevos recursos renovables y avanzar hacia tecnologías menos contaminantes. Por consiguiente, la selección de glicerina (la cual es obtenida mayoritariamente del biodiesel) es muy tentadora, permitiendo convertir el residuo de las pequeñas plantas de biodiesel en un producto aprovechable (15).

Sin embargo, el mercado del biodiesel no ha crecido tanto como se había propuesto años atrás. El volumen de biocombustible producido hoy en día en Europa dificulta emplear la glicerina a gran escala. Esto se hace más visual al observar las toneladas requeridas de biodiesel, y glicerina para la producción de acroleína propuesta en este proyecto. Y es que aun considerando un rendimiento molar del 70%, se requieren 2,3 toneladas de glicerina, que supondría el consumo de 23 toneladas de biodiesel, para producir tan solo una tonelada de acroleína. Esto implicaría que para una planta de 10 mil toneladas de acroleína habría que consumir 250 mil toneladas de biodiesel (13).

Ha de tenerse en cuenta que en el año 2018 la producción anual de biodiesel no alcanzó las 200 mil toneladas en España, siendo este país de los tres primeros países productores de este combustible en la Unión Europea (liderando la producción las plantas ubicadas en Andalucía, Valencia y Galicia) (16).

Por consiguiente, para la capacidad de producción deseada de acroleína lo más razonable sería considerar una planta de producción de biodiesel y glicerina. De esta forma se podría tener la seguridad de disponer de la cantidad necesaria de materia prima. No obstante, esto aumenta considerablemente el coste de inversión y de producción anual, así como puede aumentar los impactos ambientales, requiriendo de un terreno con mayor superficie y aumentando las emisiones generadas. Se concluye por lo tanto que esta alternativa es un desafío a futuro, no viable para el presente proyecto, pero recomendada para plantas más pequeñas.

Por otro lado, la alternativa de acoplamiento oxidativo de alcoholes se sigue estudiando, pero no ha sido posible obtener datos reales de la escalada a plantas industriales. Asimismo, esta aun requiere mejorar el desarrollo del catalizador, ya que de no ser así, se aumentaría la generación de residuos tóxicos debido a la baja vida útil del catalizador. Además, se puede estimar un mayor coste de inversión dado que los equipos deberán tener un mayor tamaño por el bajo rendimiento

que se obtiene. Siendo también más contaminadas las aguas residuales, ya que contienen una concentración más alta de subproductos.

De modo que, la alternativa seleccionada es la oxidación parcial de propileno. Esta alternativa ha sido investigada durante muchos años y por lo tanto el alto rendimiento que ofrece los catalizadores permiten minimizar la formación de subproductos, costes de producción e inversión. Cabe destacar, que el único inconveniente de esta alternativa ambientalmente es el uso del propileno, compuesto derivado del petróleo. Sin embargo, este proceso está considerado como Grupo C según el Anexo IV de la Ley 34/2007, de 15 de noviembre, siendo los pertenecientes al Grupo A los que requieren mayor control en cuanto a emisiones (4). Se puede considerar este proceso respetuoso con el medio ambiente e invertir parte del dinero que se ahorra empleando esta alternativa en investigaciones para un mejor tratamiento de los efluentes y la optimización del mismo.

Hay que mencionar, además, que la planta puede operar siguiendo las Mejores Técnicas Disponibles (MTD), las que se encuentran en el ámbito europeo recogidas en el documento de *Best Available Techniques Reference Document* (BREF). Según la Directiva 2010/75/UE, de 24 de noviembre, en estos documentos se reúnen las tecnologías más eficaces para alcanzar un elevado nivel de protección del medio ambiente, contemplando las condiciones económicas y su viabilidad. Para el diseño de la planta de producción de acroleína no existe un BREF específico, sin embargo, se puede aplicar el correspondiente a *Large Volume Organic Chemical Industry*. En este documento se incluyen sistemas de gestión y fundamentos generales válidos para plantas de producción a gran escala (17).

Entre las técnicas descritas en este documento, destacan para este proyecto las referidas al tratamiento del agua residual, donde se muestra el beneficio de reducir las cargas contaminantes del agua para poder reutilizarla. Así como las correspondientes a la eficiencia energética para optimizar el proceso. Asimismo, se muestran también técnicas para minimizar el consumo de materias primas destacando las técnicas de almacenamiento. Estas técnicas son fundamentales para prevenir accidentes, aplicando los sistemas adecuados de gestión, programas de detección y reparación de fugas, así como el uso de espacios cerrados para eludir los efectos del viento.

4. Inventario ambiental

Teniendo en cuenta lo exigido por la Ley 21/2013, específicamente en el Anexo VI, apartado 3, se llevará a cabo un estudio del lugar donde se ubicará la planta de producción de 2-propenal del presente proyecto, y de sus condiciones ambientales previas a las fases de construcción y de operación de la planta. A continuación, se analizarán los aspectos ambientales mencionados en el Artículo 35 de la misma ley, Ley 21/2013, que puedan sufrir alteraciones.

4.1. Clima

El clima es uno de los aspectos a considerar, característico de la región a estudiar. Tal como se expuso en el *Documento I: Memoria*, la planta del presente proyecto estará ubicada en una parcela del polígono industrial Riu Clar, municipio de Constantí, provincia de Tarragona, ubicada en el sur de la comunidad autónoma de Cataluña.

Es conveniente conocer los valores históricos climatológicos de la región, de modo que se tenga una noción de su comportamiento, y saber si las tendencias seguidas se repiten a lo largo de los años. Para el caso concreto de la planta del presente proyecto, se buscarán los valores climatológicos de la estación meteorológica de Reus-Aeropuerto, cercana al Polígono Industrial

Riu Clar. Se conocen los datos históricos, del periodo 1981-2010, publicados por la Agencia Estatal de Meteorología. En la Figura 1 se muestra un gráfico donde se aprecian las temperaturas medias, máximas y mínimas, y las precipitaciones de la región, por mes.



Figura 1. Valores climatológicos en Reus-Aeropuerto, periodo 1981-2010. Elaboración propia, a partir de (18).

Donde:

- R corresponde a la precipitación mensual/anual media, en mm.
- T es la temperatura media mensual/anual, en °C.
- TM es la media mensual/anual de las temperaturas máximas diarias, en °C.
- Tm es la media mensual/anual de las temperaturas mínimas diarias, en °C.

Se puede observar claramente que el clima varía según las estaciones del año, siendo los meses más calurosos junio, julio, agosto y septiembre, coincidiendo con el inicio y fin del verano. Las temperaturas mínima y máxima en esa época rondan los 17 y 29 °C, respectivamente. Por el contrario, los meses más fríos corresponden a los de invierno, en donde las temperaturas mínima y máxima están en torno a 4 y 14 °C.

También, se puede apreciar que los meses más lluviosos son septiembre y octubre, y los meses menos lluviosos corresponden a julio y junio. De hecho, según la clasificación climática de Köppen, el clima en Tarragona se clasifica como Csa, que correspondería a climas templados y húmedos con estación seca en verano y temperatura superior a 22 °C en el mes más cálido. Es decir, encaja en la clasificación de climas mediterráneos, marcados por una sequía estival (19-20). Asimismo, en la Tabla 1 se recogen los valores climatológicos extremos absolutos, teniendo en cuenta datos desde el año 1945 hasta el 2021.

Tabla 1. Valores climatológicos en Reus-Aeropuerto, periodo 1945-2021. Elaboración propia, de (18).

Variable	Anual
Máx. número de días de lluvia en el mes	20 (may. 2008)
Máx. número de días de nieve en el mes	2 (mar. 2010)
Máx. número de días de tormenta en el mes	9 (ago. 2002)
Precipitación mensual más alta (l/m ²)	330,8 (oct. 1987)
Precipitación mensual más baja (l/m ²)	0,0 (dic. 1988)
Racha máx. viento: velocidad y dirección (km/h)	Vel 148, Dir 290 (13 mar. 1976 15:00)
Temperatura media de las máx. más alta (°C)	32,6 (ago. 2003)
Temperatura media de las mín. más baja (°C)	0,0 (ene. 2005)
Temperatura media más alta (°C)	27,1 (jul. 2015)
Temperatura media más baja (°C)	5,5 (ene. 1985)

4.2. Calidad del aire

Para la planta de producción del presente proyecto, serán de aplicación la Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera, y el Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire. Por ser un recurso vital, es una obligación respetar la atmósfera, y es por ello que, la calidad del aire es un aspecto prioritario en lo que se refiere a la legislación ambiental. La Ley 34/2007, de 15 de noviembre, pretende establecer ciertas bases respecto a la contaminación de la atmósfera, para evitar o disminuir los efectos provocados en los seres humanos y en el medio ambiente (4).

En el Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, se fijan los límites permitidos de los contaminantes atmosféricos mencionados en el Anexo I de la Ley 34/2007, entre los que se incluyen dióxido de azufre, dióxido de nitrógeno y óxidos de nitrógeno, partículas, plomo, benceno, monóxido de carbono, ozono, arsénico, cadmio, níquel y benzo(a)pireno (21). El Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, ha sido modificado por el Real Decreto 678/2014, de 1 de agosto, y por el Real Decreto 39/2017, de 27 de enero (22-23). En este último, se establecen los métodos de referencia para evaluar las concentraciones de los contaminantes atmosféricos (23).

Cabe resaltar que, el Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico desarrolló el Índice Nacional de Calidad del Aire, ICA, con el objetivo de comprobar en tiempo real la calidad del aire medida en las estaciones de la red nacional de vigilancia. Este índice considera los siguientes contaminantes atmosféricos: partículas en suspensión (PM_{10} y $PM_{2,5}$), ozono troposférico, dióxido de nitrógeno y dióxido de azufre (24). En la Figura 2 se puede observar que en las estaciones cercanas a la ubicación del Polígono Industrial Riu Clar donde se ubicará la planta de producción del presente proyecto, presentan una calidad del aire buena (puntos azules) y razonablemente buena (punto verde).

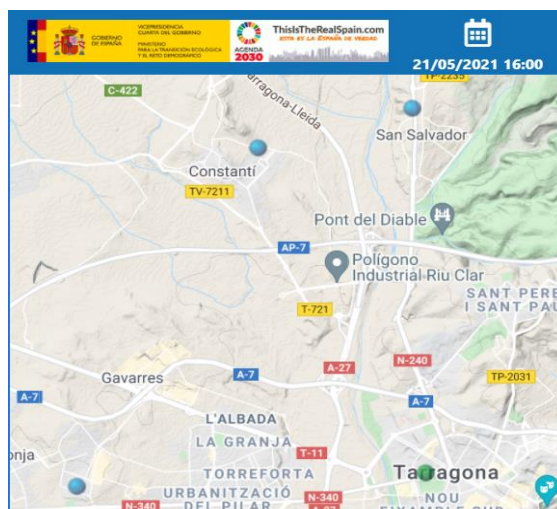


Figura 2. Calidad del aire de la zona medida en tiempo real, según el ICA (24).

Asimismo, en Tarragona, la Red de Vigilancia y Previsión de la Contaminación Atmosférica (XVPCA) cuenta con equipos manuales y automáticos mediante los cuales se miden los niveles de contaminantes, de manera que se pueda determinar la calidad del aire (25). El plan de vigilancia es llevado a cabo por el Departamento de Territorio y Sostenibilidad de la Generalitat de Catalunya. Gracias a esto, es posible conocer la calidad del aire, medida en las estaciones más cercanas de la localización de la planta de producción del presente proyecto, tal como se muestra en la Figura 3.

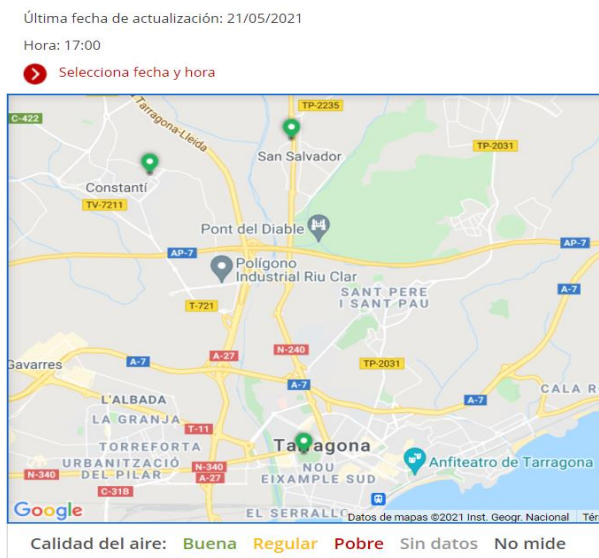


Figura 3. Calidad del aire de la zona medida en tiempo real, según la XVPCA (25).

Se puede observar que la calidad del aire en las estaciones más próximas al Polígono Industrial Riu Clar se clasifica como buena.

4.3. Edafología e hidrología

En la Figura 4 se puede observar la división del territorio catalán en comarcas. Cabe notar que la planta de producción de 2-propenal del presente proyecto se encuentra ubicada en el ámbito funcional territorial Camp de Tarragona, específicamente en la comarca Tarragonès.



Figura 4. Comarcas catalanas (26).

En el Camp de Tarragona el suelo se encuentra cultivado en casi su totalidad en los sectores llanos, lo que ha provocado una evolución edáfica. Esto es, los suelos han sufrido cambios como resultado de la acción humana sobre ellos. En general, hay cuatro clasificaciones del suelo en el Camp de Tarragona, las cuales serán mencionadas a continuación (27):

- Orden Entisoles: son suelos poco evolucionados, pobres en materia orgánica. Se incluyen en esta clasificación los regosoles arenosos, litosoles y los suelos aluviales sin evolucionar. Corresponde a un 24% del suelo del Camp de Tarragona.

- Orden Inceptisoles: corresponden a los suelos de texturas medias a arcillosas. Tienen una relevancia cuantitativa en Tarragona, debido a que representan un 60% del suelo comarcal.
- Orden Aridisoles: son suelos pobres en materia orgánica y con la superficie endurecida debido a las condiciones climáticas favorecedoras de procesos de evaporación intensa. En sí, debido al clima de Tarragona, la mayoría de los sectores llanos podrían considerarse Aridisoles, sin embargo, debido a la acción humana (regadíos) se favorece la formación de Inceptisoles.
- Orden Molisoles: corresponden a los suelos ricos en materia orgánica y saturados de calcio. Representan un 16% de la superficie edáfica total del Camp de Tarragona.

Con respecto a la hidrología de la región, el territorio de Cataluña se encuentra dividido en dos ámbitos: cuencas hidrográficas internas y cuencas hidrográficas intercomunitarias (28). En la Figura 5 se aprecia lo comentado, y se pueden observar los principales ríos que las integran.

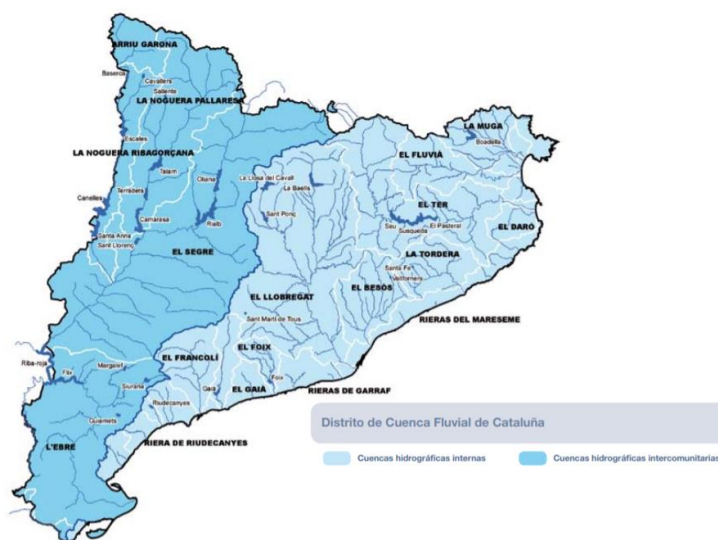


Figura 5. División del territorio catalán en dos ámbitos hidrográficos (28).

En lo que respecta a la comarca Tarragonès, donde se ubica la planta del presente proyecto, se incluyen en la Demarcación Hidrográfica de las Cuencas Internas de Cataluña. Se incluyen las cuencas y subcuencas que drenan las aguas superficiales hacia los ríos de la región, y las de las rieras costeras y torrentes (29). Entre los ríos existentes, se destacará en el Estudio de Impacto Ambiental del presente proyecto el río Francolí, debido a su paso por el municipio Constantí, donde se ubica el Polígono Industrial Riu Clar. En el mapa de la Figura 6 se puede apreciar lo comentado. El río Francolí presenta una extensión lineal de alrededor de 60 km, proviniendo gran parte de su caudal de otros ríos, como el Brugent y Glorieta (30).

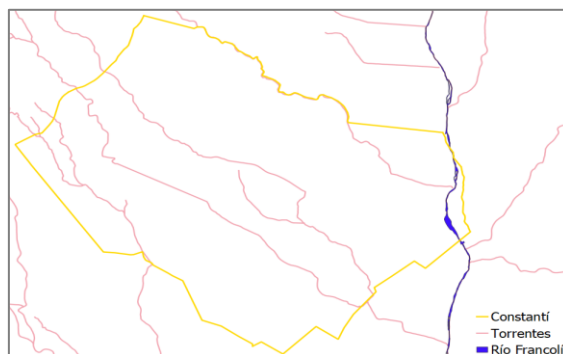


Figura 6. Paso del río Francolí por el municipio Constantí. Elaboración propia en QGIS, a partir de (31).

La Agencia Catalana del Agua, ACA, es la entidad que lleva a cabo controles para determinar el estado de las masas de agua, tanto de forma cualitativa como cuantitativa. Se realiza un seguimiento y control, y una vez contrastados los resultados con los umbrales de calidad establecidos, se determina el estado del agua (32). A continuación, en la Figura 7 se muestra el estado de las masas de agua incluidas en este análisis. Se puede observar que, para la zona de interés, las aguas subterráneas, imagen derecha, están más afectadas que las aguas superficiales, imagen izquierda.

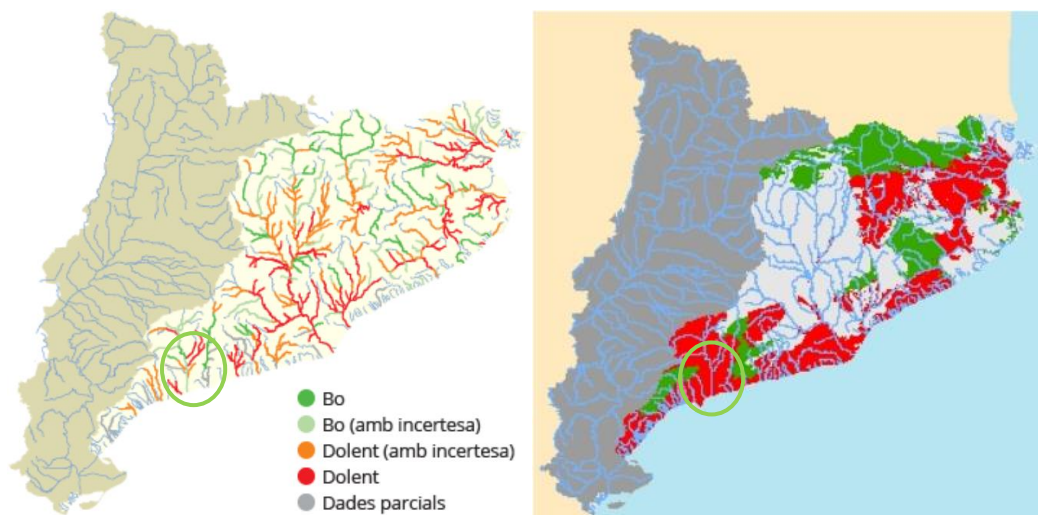


Figura 7. Estado de las masas de agua superficiales y subterráneas de la Demarcación Hidrográfica de las Cuencas Internas de Cataluña (32).

Los factores contaminantes son diversos, entre los que se encuentran prácticas agrícolas, usos de fertilizantes en prácticas ganaderas y actividades industriales. No obstante, lo que corresponde a contaminación por la industria, se refiere a vertidos, fugas, escorrentías e infiltraciones sin la aplicación de medidas correctoras. Esto se traduce en efectos negativos que impactan a un 6,70% de los ríos, 2,90% de las aguas costeras y 64,20% de las aguas subterráneas (28).

4.4. Molestias por ruido

Múltiples emisiones sonoras repercuten en el ambiente, llevando a que se alcancen niveles de contaminación acústica que repercuten en las personas, en su bienestar y productividad. Será de aplicación la Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido, que surge para prevenir, vigilar y reducir la contaminación acústica, de modo que se eviten consecuencias que afecten a la salud humana, los bienes o el medio ambiente. En el Artículo 12 de la presente ley, se establece que los valores límite de emisión de ruido serán fijados por el Gobierno (33).

En lo que se refiere a la legislación aplicable en la comunidad autónoma de Cataluña, se encuentra vigente la Ley 16/2002, de 28 de junio, de protección contra la contaminación acústica, el Decreto 245/2005, por el que se fijan los criterios para la elaboración de los mapas de capacidad acústica, y el Decreto 176/2009, por el que se aprueba el Reglamento de la Ley 16/2002, de 28 de junio, de protección contra la contaminación acústica, y se adaptan sus anexos (34).

La Ley 16/2002, de 28 de junio, tiene por objetivo regular y corregir la contaminación acústica originada por ruidos y vibraciones, y determinar un régimen de intervención administrativa que se aplique en todo el territorio catalán (35).

En el Decreto 176/2009 se fijan los valores límite de ruido, clasificando los espacios en zonas de sensibilidad acústica alta, moderada o baja. Dentro de cada clasificación, a su vez se desglosan otras categorías, según el uso o actividad del lugar. En lo que se refiere a zonas de usos industriales, entra en la clasificación de zona de sensibilidad acústica baja, y corresponde a la clasificación C2 (36). En la Tabla 2 se resumen los valores de ruido máximos permitidos en dichas zonas. Cabe resaltar que la A que acompaña a dB corresponde al tipo de filtro con el que se miden.

Tabla 2. Valores de ruido máximos permitidos (36).

	Valores límite de ruido [dB(A)]		
	Día (7h-21h)	Tarde (21h-23h)	Noche (23h-7h)
Zonas de uso industrial	70	70	60

En la Figura 8 se puede observar que los niveles de ruido en el Polígono Industrial Riu Clar se encuentran cerca de los valores máximos permitidos.

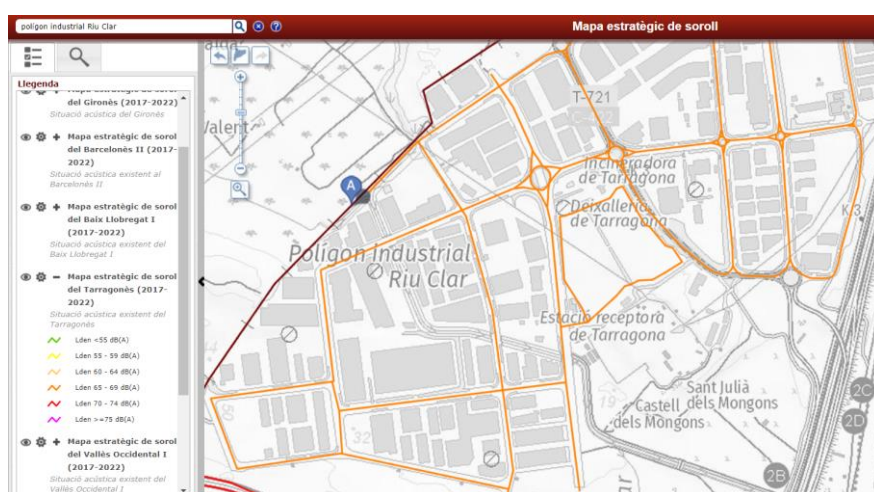


Figura 8. Mapa de ruido del Polígono Industrial Riu Clar (37).

4.5. Flora y fauna

Tarragona presenta parajes naturales definidos por la vegetación mediterránea, con influencia submediterránea y eurosiberiana. La vegetación se reparte en los dominios de las encinas y el carrascal. En las zonas bajas se pueden encontrar pinos blancos y en las más elevadas, pinos silvestres. También se encuentran malezas calcícolas, matorrales, bojedaes, prados y prados secos. En depresiones húmedas y riberas existen fragmentos de robles, y bosques de ribera (38).

La Serra de Montsant, el Parque Natural del Delta del Ebro y el Parque Natural Dels Ports, son espacios naturales protegidos presentes en la provincia de Tarragona, caracterizados por su gran biodiversidad, y en donde habitan una gran cantidad de especies (39). Entre ellas se encuentran pájaros como el trepador azul, y ciertos reptiles como la culebra lisa meridional (38).

En la provincia de Tarragona existen comunidades de predadores, numerosas especies de carnívoros, como la nutria, el turón, el gato montés, la garduña, la comadreja, el tejón, la gineta, el zorro, entre otros. Así como también, una gran cantidad de aves, entre las que se incluyen el águila real, perdicera y culebrera, el azor, el gavián, el halcón peregrino, el alcotán, el cernícalo común, la collalba negra y el roquero solitario. En los ríos se pueden encontrar peces como el barbo común, la madrilla, el bagre, entre otros. Asimismo, también se encuentran animales invertebrados como el cangrejo de río europeo, que se localizan cerca de los cursos fluviales (38).

Tal como se expuso, en la provincia de Tarragona hay una multitud de especies de flora y fauna. No obstante, la planta de producción de acroleína del presente proyecto se propone construir en un espacio destinado a la industria, por lo tanto, no representaría un peligro ni para la flora ni para la fauna de la provincia. Cabe destacar que el agua residual generada en el proceso de producción pasaría por una EDAR para su correcto tratamiento, antes de su descarga a las masas de agua.

4.6. Población y empleo

Según los datos publicados por el Instituto de Estadística de Cataluña, la provincia de Tarragona presenta una superficie de 6.308,20 km² y una población total para el año 2020 de 818.702 habitantes. Con lo cual, la densidad poblacional de la provincia es de 130 habitantes/km². En el gráfico de la Figura 9 se puede apreciar la evolución de la población en la provincia de Tarragona, observando una tendencia de aumento muy marcada desde el año 1960 (40).

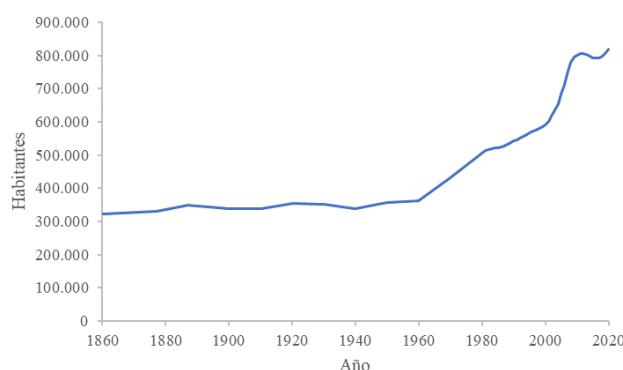


Figura 9. Evolución de la población en la provincia de Tarragona. Elaboración propia, a partir de (40).

Asimismo, también se conocen datos de la comarca del Tarragonès, donde se encuentra el municipio Constantí, en el cual se ubica el Polígono Industrial Riu Clar donde se pretende construir la planta de producción del presente proyecto. La comarca del Tarragonès, cuenta con una población total de 262.488 habitantes, y teniendo una superficie de 319,37 km², presenta entonces una densidad poblacional de 822 habitantes/km². Estos datos son los publicados más recientemente, para el año 2020 (40). En la Figura 10 se muestra la distribución de la población en la comunidad autónoma de Cataluña, y señalando donde se ubica el municipio Constantí, que tiene una población numerosa con respecto a otros lugares de la región.

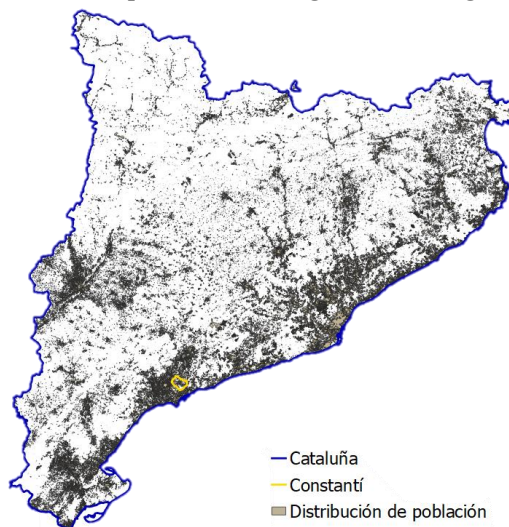


Figura 10. Distribución de la población en Cataluña. Elaboración propia en QGIS, a partir (31).

En lo referente a aspectos económicos, en el año 2019, la comunidad autónoma de Cataluña registró un PIB de 236.814 millones de euros, estableciéndose como la segunda economía de España por volumen de PIB. Cabe destacar también que el PIB per cápita en Cataluña fue de 31.119 €, superior a los 23.690 € de PIB per cápita nacional. Esto se traduce a un muy buen nivel de vida, ocupando el cuarto lugar en el ranking de PIB per cápita a nivel autonómico (41).

Con respecto a la participación del sector industrial, se puede apreciar en la Figura 11, que tiene un importante aporte en el PIB de Tarragona, como en el de Cataluña y en el nacional, estando en los tres casos, en segundo lugar. Asimismo, se observa que el PIB en porcentaje del sector económico industrial en Tarragona y en Cataluña es mayor que el correspondiente a nivel nacional. Por lo tanto, se puede resumir que el sector industrial es de gran relevancia, en lo que se refiere a la economía de la provincia de Tarragona y la comunidad autónoma de Cataluña.

Sector económico	Datos absolutos. Miles de €			Porcentaje		
	Tarragona	Cataluña	España	Tarragona	Cataluña	España
Agricultura	313.067	2.104.778	30.096.000	1,47	1,08	2,97
Industria	5.639.160	41.844.364	178.470.000	26,42	21,56	17,59
Construcción	1.121.907	9.932.244	59.563.000	5,26	5,12	5,87
Servicios	14.271.302	140.180.220	746.710.000	66,86	72,23	73,58
Total	21.345.436	194.061.606	1.014.839.000	100,00	100,00	100,00

Figura 11. PIB por ámbito geográfico y sector económico, año 2017 (42).

Otro aspecto que resulta interesante comentar es la tasa de paro en la provincia de Tarragona. Para el año 2019 era de 13,23%, para el año 2020 era de 16,39%, y en abril del presente año 2021, está en 16,34% (43). Es razonable pensar que debido a la crisis económica generada por la pandemia de COVID-19, la tasa de paro en 2020 aumentó respecto al año anterior. Por consiguiente, la instalación de una planta de producción en Tarragona origina nuevos empleos en la zona, tanto directos como indirectos, lo que contribuye a disminuir la cantidad de personas que se encuentran desempleadas.

4.7. Uso del suelo

Como ya se ha comentado anteriormente, la planta de producción de acroleína del presente proyecto se instalará en el Polígono Industrial Riu Clar. Debido a esto, el suelo disponible de la parcela elegida se destina justamente para un uso industrial. Por lo tanto, no existirá un mayor impacto sobre el entorno, en lo que a utilización del suelo se refiere.

4.8. Paisaje y patrimonio

Siguiendo la misma línea de lo comentado en el apartado anterior, 4.7. *Uso del suelo*, en el Polígono Industrial Riu Clar se encuentran construidas diversas instalaciones correspondientes al sector industrial y comercial. Por lo tanto, la implantación de la planta de producción de acroleína del presente proyecto no influye negativamente en el paisaje de la zona, ni genera un impacto visual negativo. Asimismo, al ubicarse la planta en un polígono industrial, no se encuentra ningún patrimonio cultural en los alrededores de la zona, que pueda verse afectado.

5. Identificación y valoración de impactos

Con cada uno de los aspectos mencionados y explicados en el apartado anterior, 4. *Inventario ambiental*, se evaluarán los impactos que la planta de producción de acroleína del presente proyecto pueda provocar, clasificándolos de manera puramente cualitativa en: compatibles, moderados, severos o críticos.

Como ya se ha comentado con anterioridad, la planta de producción de acroleína se implantará en una parcela del Polígono Industrial Riu Clar, ubicado en el municipio Constantí, comarca del Tarragonès, provincia de Tarragona. Se trata de un polígono habilitado para actividades industriales, cuyos alrededores se encuentran adaptados a ello. Por lo tanto, en lo que se refiere al clima, uso del suelo, paisaje y patrimonio, el impacto que pueda conllevar la planta, en sus fases de construcción, operación y desmantelamiento se clasifica en compatible.

La calidad del aire es un aspecto que se verá afectado negativamente con la implantación de la planta de producción, tanto en la fase de construcción, como en la de operación y desmantelamiento. En la primera y en la última fase, la calidad del aire puede verse afectada por la manipulación del terreno, no obstante, es temporal la realización de estas actividades, por lo que se puede clasificar como compatible.

Durante la fase de operación de la planta, el proceso cuenta con una salida de *off-gas*. Sin embargo, esta salida de gases no se emite directamente a la atmósfera, sino que se trata previamente, disminuyendo de forma considerable el impacto a la calidad del aire. Una vez separado el helio de esta corriente de *off-gas*, los gases restantes se conducen a antorcha, donde al final de la combustión completa únicamente se tendrá dióxido de carbono y vapor de agua. Asimismo, en los casos de sobrepresión, cuando las válvulas de alivio se abran, los gases serán conducidos a antorcha antes de su emisión del medio ambiente. Por otro lado, la calidad del aire se puede ver afectada indirectamente por las emisiones existentes en la generación de utilidades necesarias para el funcionamiento de la planta, sin embargo, es un impacto mínimo. Se puede decir entonces que el impacto sobre la calidad del aire puede clasificarse como moderado, pues si bien en el Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, no se han fijado límites de emisión de los gases producidos en antorcha, tanto el dióxido de carbono como el vapor de agua son gases de efecto invernadero, que se acumulan en la atmósfera y favorecen el calentamiento global (44).

Con respecto a la edafología, es posible pensar que el suelo del lugar corresponde al orden Inceptisol, por ser el orden mayoritario en la comarca, o Aridisol, debido a las condiciones climáticas del lugar. No obstante, el sitio se encuentra talado, en uso en sus alrededores, y que gracias la acción humana haya pasado a considerarse Inceptisol. Con la instalación de la planta de producción, es cierto que el suelo sufrirá erosión permanentemente, no solo por la acción humana sobre él sino también por acciones climáticas. Estos cambios se pueden pensar como irreversibles, pero debido a que la planta se encuentra en un terreno destinado a actividades industriales, este impacto se puede considerar como compatible.

Es cierto que en la fase de operación de la planta del presente proyecto se genera una gran cantidad de aguas residuales, no obstante, estas se conducen a un tratamiento en la EDAR del polígono. Por lo tanto, en operación regular de la planta no existirán vertidos directos a masas de agua que afecten su estado. Debido a esto el impacto sobre la hidrología se clasifica como compatible. Ahora bien, en operación irregular de la planta, si existiera alguna fuga o vertidos accidentales que lleguen a las masas de agua, superficiales o subterráneas, el impacto se clasificaría como crítico, debido que llegarían compuestos tóxicos que afectarían su estado. Con respecto a las fases de construcción y desmantelamiento no se pronostica que existan impactos sobre la hidrología.

En lo que al ruido se refiere, es razonable pensar que siempre existirá, desde la fase de construcción, hasta la de operación y desmantelamiento. En la primera y en la última fase será provocado por maquinarias y tránsito de vehículos pesados, mientras que en la fase de operación el ruido será generado mayoritariamente por equipos presentes, como bombas y compresores. Asimismo, en el apartado 4.4. *Molestias por ruido*, en la Figura 8, se muestra el mapa de ruido

del Polígono Industrial Riu Clar, donde es notorio que el ruido en la zona es considerable, estando próximo a los valores límite permitidos. Por lo tanto, se puede pensar que el ruido generado por la planta de producción del presente proyecto será similar al generado por las industrias presentes actualmente. Al ser este considerable, y de carácter temporal, el impacto se puede clasificar como moderado.

Con respecto a la flora y la fauna existente en el polígono industrial donde se ubicará la planta del presente proyecto, esta se verá afectada negativamente durante la fase de construcción de la planta. No obstante, durante la fase de operación, ya no se prevé mayores impactos. De todas maneras, cabe destacar que, al tratarse de un polígono industrial, no corresponde a un hábitat importante para muchas especies, por lo tanto, el impacto puede clasificarse como compatible.

Para llevar a cabo la implantación de la planta, su puesta en marcha, así como también su desmantelamiento al final de su vida útil, serán necesarios recursos humanos. Es decir, durante las tres fases de la planta del presente proyecto será necesario buscar personal para llevar a cabo las actividades correspondientes. Esta generación de empleo es un impacto muy positivo en cuanto a la economía de la región, y favorece a la disminución de la tasa de paro. Asimismo, puede que el personal contratado sea de la zona o puede que no, y en este último caso, conllevaría a que las personas migren al entorno cercano a la ubicación de la planta. Los empleos generados serán directos como indirectos, y con respecto a su duración, en la primera y última fase del proyecto se pueden considerar como temporales, no obstante, durante la operación de la planta, serán permanentes.

5.1. Matriz de Leopold

La Matriz de Leopold es una técnica ampliamente utilizada para evaluar el impacto ambiental de diversos proyectos. Se trata de una matriz de doble entrada, mediante la cual se pueden constituir relaciones de causa-efecto, en función de las características del proyecto a evaluar. Las columnas estarán referidas a las acciones proyectadas, mientras que las filas corresponderán a los factores ambientales que son susceptibles de verse afectados por el proyecto. Siguiendo esta línea, se puede establecer el impacto que la planta en cuestión puede provocar en los distintos aspectos ambientales incluidos (45).

Para proceder a registrar los impactos, se tendrán dos columnas: M e I. En las columnas M se marca la magnitud de los impactos con valores entre -5 y 5, y en las columnas I se indica la importancia de los impactos, que toma valores entre 0 y 5. Mientras mayor sea el número, mayor será la magnitud y la importancia, respectivamente, y el signo del número, positivo o negativo, indica si el impacto es beneficioso o perjudicial, respectivamente.

Para el caso particular de la planta de producción del presente proyecto, las columnas se establecerán de acuerdo a las acciones analizadas de las fases de construcción, de explotación y de desmantelamiento de la planta. Mientras que las filas corresponderán a los aspectos ambientales, incluyendo en factores físicos, biológicos y socioeconómicos.

En la Figura 12 se muestra la Matriz de Leopold mediante la cual se han evaluado los impactos ambientales de la planta de producción de acroleína del presente proyecto. Se puede observar en la última columna de la misma que el impacto total del proyecto es positivo, con lo cual se puede deducir que los impactos positivos, relacionados con factores socioeconómicos, superan a los impactos negativos, relacionados con factores físicos y biológicos.

ACCIONES DEL PROYECTO FACTORES AMBIENTALES			FASE DE CONSTRUCCIÓN										FASE DE EXPLOTACIÓN										FASE DE DESMANTELAMIENTO				Nº INDICADORES POSITIVOS	Nº INDICADORES NEGATIVOS	IMPACTO POR SUBCOMPONENTE	IMPACTO POR COMPONENTES	IMPACTO TOTAL DEL PROYECTO
			Acondicionamiento del terreno		Cimentación y estructuras		Instalaciones de obra		Tránsitos de vehículos pesados		Operación regular de la planta		Generación de aguas residuales		Emisiones a la atmósfera		Tránsito de vehículos		Investigación		Tránsito de vehículos pesados		Demolición y generación de residuos de obra								
			M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I							
Criterios de Valoración			M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I							
FÍSICO	SUELO	Tasa de erosión	-4	2	-3	2	-1	1	-3	2						-2	2			-3	2	-4	2	0	7	-39	-181	45			
		Estructuras	-2	1	-3	3	-1	1	-2	1						-1	1			-2	1	-2	1	0	7	-19					
	ATMOSFERA	Calidad del aire	-3	2	-2	1	-1	1	-3	2	-2	2	-1	1	-3	2	-2	2			-3	2	-4	3	0	10			-48		
		Ruido	-2	1	-3	1	-2	1	-3	1	-4	1				-1	1			-3	1	-4	1	0	8	-22					
	AGUA	Turbidez	-3	1	-2	1	-1	1	-1	1			-3	3							-1	1	-3	1	0	7			-20		
		Toxicidad			-1	1							-4	3											0	2			-13		
	PAISAJE	Calidad	-3	2	2	1	-2	2	-1	1	2	1	-3	2	-2	1	-2	1			-1	1	-2	1	2	8			-20		
BIOLÓGICO	FLORA	Estructura y composición	-2	1	-1	1							-3	1										0	3	-6	-38				
		Habitat	-3	2	-2	1							-3	1	-2	1			2	1				1	4	-11					
	FAUNA	Habitat	-3	2	-2	2	-3	2	-1	1			-2	1	-2	1			2	1	-1	1	-1	1	1	8			-21		
SOCIO ECONÓMICO	POBLACIÓN	Migración	3	2	3	2	3	2			5	4	-2	1					3	4			3	2	6	1	54		264		
	TERRITORIO	Uso de la Tierra	4	3	2	1	1	1			4	3							1	1					5	0	28				
	ECONOMÍA	Generación de Empleo	5	4	5	4	5	4	3	3	5	5	2	4	1	4			5	5	3	3	4	4	10	0	156				
	CULTURA	Ciencia y Arqueología	2	2							4	3							5	2					3	0	26				
INDICADORES con MAGNITUD POSITIVA			4		4		3		1		5		1		1		0		6		1		2		28						
INDICADORES con MAGNITUD NEGATIVA			9		9		7		7		2		8		4		5		0		7		7			65					
SUMA DE PRODUCTOS (M x I)			1		0		11		-11		63		-30		-8		-12		52		-11		-10				45				

Figura 12. Matriz de Leopold simplificada para la evaluación del impacto ambiental de la planta de producción de 2-propenal a partir de propileno. Elaboración propia.

6. Repercusiones en la Red Natura 2000

La Red Natura 2000 corresponde a la red ecológica europea de espacios naturales protegidos. Tiene el objetivo de garantizar la supervivencia de las especies y los hábitats en el continente europeo, evitando la pérdida de la biodiversidad y conservando la naturaleza (46). En el territorio español, la Red Natura 2000 incluye 1.468 Lugares de Importancia Comunitaria, LIC, aprobados por la Comisión Europea, y por 658 Zonas de Especial Protección para las Aves, ZEPA. En total, la Red comprende una superficie total de 222.000 km², de los cuales 138.000 km² corresponden a superficie terrestre y 84.300 km² de superficie marina (47).

En lo que se refiere a la provincia de Tarragona, en la Figura 13 se puede observar los espacios LIC y ZEPA presentes. Asimismo, se puede ver que el municipio Constantí, donde se ubica la planta de producción de acroleína del presente proyecto, no se engloba dentro de los espacios naturales protegidos. No obstante, debido a su cercanía con algunos de ellos, debe existir un especial cuidado en todas las fases del proyecto, construcción, operación y desmantelamiento, de modo que se respeten y se mantenga protegida la biodiversidad de la región.

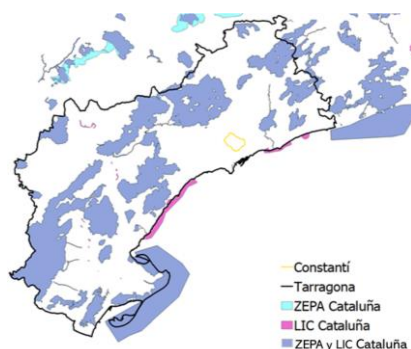


Figura 13. Áreas de la Red Natura 2000 en la provincia de Tarragona. Elaboración propia en QGIS, a partir de datos obtenidos de (31, 48).

7. Medidas para reducir, eliminar o compensar los impactos

En este apartado se mencionarán las medidas previstas para mitigar los impactos que han sido mencionados anteriormente. El objetivo es prevenir los posibles impactos que se generan en las distintas fases del proyecto. Sin embargo, también se aplicarán acciones para corregir o compensar los impactos negativos, de manera que la ejecución del proyecto se lleve a cabo dañando lo menos posible al medioambiente.

7.1. Buenas prácticas

Al emplear buenas prácticas durante las distintas fases del proyecto se puede reducir los residuos generados, así como mitigar emisiones contaminantes a la atmósfera, al suelo y al agua. Entre estas prácticas se encuentran distintas acciones, como puede ser la prevención de fugas o vertidos mediante la examinación de accidentes que hayan ocurrido en el pasado. Concretamente, para este proyecto se pueden examinar los 13 accidentes a nivel mundial enlistados en la bibliografía (49) que involucran a la acroleína. Se puede estudiar con detalles que ha ocasionado estos accidentes, los cuales ya se encuentran clasificados según la actividad implicada. Esto permite evaluar adecuadamente los riesgos de cada operación.

Asimismo, ha de realizarse un correcto mantenimiento de los equipos de forma que se pueda evitar derrames de fluidos o pérdida de eficacia en estos. Es indiscutible que la limpieza en los

equipos se relaciona con la seguridad, pero es que además al realizarse se debe gestionar los residuos obtenidos, buscando disminuir los impactos que estos puedan generar. Siendo fundamental el uso de maquinarias certificadas, y si es posible maquinarias incluidas en los BREF, ya que minimizan los contaminantes gaseosos.

Otro parámetro importante, son los trabajadores de la planta. Las buenas prácticas recomiendan formarlos mediante diversos programas, de esta manera se minimizan el riesgo de incidencias. También se debe controlar las existencias de la planta y verificar la calidad del aire para evadir pérdidas de los compuestos. Del mismo modo, durante excavaciones u otras actividades que conlleven la emisión de partículas a la atmósfera, se recomienda que se realicen durante los días con mayor estabilidad meteorológica.

Por último, entre las buenas prácticas para el presente proyecto, está la selección de contratistas y suministradores adecuados. Para esta selección ha de tenerse en cuenta criterios medioambientales, seleccionando los que ofrezcan mayor garantía en su gestión ambiental o posean certificados. Asimismo, en cada fase del proyecto, se debe contar con un responsable medioambiental encargado de vigilar si ocurren incidencias para su posterior registro (50). Además, respecto a los vínculos sociales y económicos, se debe mantener un canal de comunicación entre la comunidad y la empresa, para evitar reticencias. Mejorando la relación con la comunidad mediante la transparencia, contratos a la mano de obra local y programas de prácticas e investigación con universidades u otras empresas. Estos son solos algunos de los ejemplos de buenas prácticas que se han de seguir, con el objetivo de prevenir molestias a la comunidad, aumentar la seguridad y promover el desarrollo de proyectos ambientalistas.

7.2. Medidas para la fase de construcción

En esta primera fase los equipos más voluminosos son las maquinarias empleadas para el acondicionamiento del terreno, su cimentación y la posterior instalación de la obra. Por consiguiente, la tecnología empleada para esta fase está relacionada con el impacto ambiental que se genere. Por lo tanto, ha de optarse, como se mencionó anteriormente, por maquinarias certificadas que reduzcan las emisiones, bajo supervisión y cumpliendo con su mantenimiento.

Sin embargo, las emisiones en esta fase no son muy significativas, teniendo en cuenta que las mayores molestias ocasionadas podrían deberse al ruido de los equipos empleados. Es por ello, que, aunque se trate de una zona industrial no residencial, se deberán medir las emisiones de ruido y emplear los equipos más silenciosos posibles para minimizar las molestias y las vibraciones, siempre verificando el cumplimiento del Real Decreto 524/2006, de 28 de abril.

Para la protección del suelo ha de retirarse las capas necesarias de forma que sea posible la posterior revegetación. Contando con una planificación correcta de los movimientos de tierra, y una revegetación rápida para evadir la erosión. Se colocará la mayor cantidad de espacios verdes posible al finalizar las obras y se emplearán colores que permitan el camuflaje de las estructuras buscando una inclusión en el paisaje. Por último, en vista de que se generarán grandes cantidades de residuos en esta fase, estos residuos deben ser clasificados y tratados adecuadamente según su naturaleza, esto será aplicado también a las siguientes fases del proyecto.

7.3. Medidas para la fase de explotación

En esta fase han de tenerse en cuenta muchos factores dado que se estará operando en continuo, consumiendo utilidades, generando aguas residuales y emitiendo gases a la atmósfera durante

toda la duración de la fase. Asimismo, esta fase es crucial en cuanto al impacto que ocasiona el proyecto en el ambiente, dado que se trata de una fase mucho más duradera que las otras dos.

En consecuencia, además de las medidas mencionadas anteriormente (mantenimiento adecuado de los equipos, mitigar el ruido generado por ejemplo por las bombas y compresores empleando de ser necesario aislamiento acústico, así como el tratamiento adecuado de los residuos destacando en esta fase el catalizador) se ha incluido un control de las emisiones del *off-gas* y medidas que permitan disminuir el impacto sobre el agua.

Para el control de emisiones no solo se cuenta con las medidas de la planta, sino que además el propio polígono verifica el Real Decreto 102/201, de 28 de enero, constantemente. De hecho, cuenta con una página web para verificar la calidad del aire en la zona a tiempo real. Asimismo, la Asociación Empresarial Química de Tarragona AEQT tiene como uno de sus objetivos la mejora de la calidad del aire, por lo que podrían aportar nuevas ideas para el desarrollo de un mejor tratamiento.

Por otro lado, una de las medidas a adoptar para minimizar el impacto en el agua, es que se emplearán espesores adecuados en todos los equipos para evitar derrames que puedan afectar el agua subterránea, o al suelo. Del mismo modo, las corrientes de agua residual generadas en el proceso serán llevadas a la planta de tratamiento del polígono. En dicha planta se lleva a cabo el tratamiento de diversas aguas de procedencia industrial, cumpliendo con la calidad requerida para no alterar la composición del río Francolí al verter. Esto es de gran importancia, dado que la magnitud de contaminación que se podría producir al no tratar correctamente estas aguas, afectaría a todo el ecosistema de la zona.

7.4. Medidas para la fase de desmantelamiento

Esta corresponde a la última fase del proyecto, donde se realizan las acciones necesarias para desinstalar la planta. Estas acciones conllevan unos impactos negativos parecidos a los propuestos en la fase de construcción, dado que las fases son similares. Destacando altos ruidos debido a la demolición y el tránsito de vehículos pesados, estos trabajos deberán realizarse en horarios que minimice las molestias al entorno, tratando de minimizar los ruidos generados y la duración de la actividad sin comprometer la seguridad de la misma.

Sin embargo, el mayor impacto se asocia a la generación de residuos. Estos residuos deberán ser clasificados, buscando siempre su reutilización de ser posible, aunque de lo contrario deberán reciclarse o desecharlos en función del tipo de material. Verificando en todo momento que sean llevados al tratamiento correcto, teniendo en cuenta que algunos de estos residuos podrán ser clasificados como peligrosos. Por último, durante esta fase, para llevar a cabo un desmantelamiento apropiado se agilizará la comunicación con la comunidad, siguiendo el control y el plan establecido para el cese del proyecto y la limpieza de la zona.

8. Programa de vigilancia y seguimiento ambiental

El objetivo de este apartado es mostrar el plan de vigilancia que ha de seguirse en la planta para garantizar el cumplimiento de las medidas preventivas, correctoras y compensatorias, que han sido expuestas anteriormente. Siguiendo el Anexo VI de la Ley 21/2013, de 9 de diciembre de evaluación ambiental, el programa se realiza concretamente para las fases de construcción y explotación. La finalidad de este programa en la fase de construcción es detectar desviaciones, o imprevistos y corregirlos, así como determinar si es necesario aplicar nuevas medidas. Por otro lado, en la fase de explotación el objetivo es verificar que mediante las medidas empleadas se

cumplan los objetivos por medio de seguimientos a la evolución ambiental en el entorno de la planta. Por consiguiente, para la ejecución del programa de vigilancia se debe disponer de medios humanos y materiales.

Para los medios humanos, la planta ha de contar con un personal encargado del ámbito ambiental, con experiencia y conocimientos de la planta. Mientras que, para los medios materiales, el equipo de trabajo deberá contar con todos los medios que puedan requerir, como son recipientes para las muestras, equipos de fotografías, sonómetro, equipo de vigilancia para mediciones de caudales, temperaturas etc. y en caso de requerirlo se deberá contar con laboratorios acreditados para análisis específicos que no se realicen en la planta (50). Cabe destacar, que se elaborarán diversos documentos para cumplir con el programa de vigilancia y seguimiento, siendo estos: diario de seguimiento ambiental, un archivo de medios materiales, resúmenes periódicos e informes anuales de las medidas empleadas.

En el diario de seguimiento se recopilarán los archivos que describan las incidencias que se hayan presentado junto con la acción que las causó y el nivel de cumplimiento de las medidas, de forma que pueda ser consultado por las autoridades ambientales. En el archivo de medios materiales se contemplarán todos los materiales empleados, así como sus garantías, información técnica y calibrados realizados. En los resúmenes periódicos se redactarán las observaciones que se consideren pertinentes junto con recomendaciones, con una periodicidad de un mes. Por último, en los informes anuales se debe reflejar la eficiencia de las medidas correctoras y el grado de cumplimiento de estas, incluyendo además nuevas propuestas si las empleadas son insuficientes.

Cabe destacar, que, para el control del impacto climático además de los datos recopilados en la planta, se cuenta con los datos proporcionados por AEMET. Asimismo, para el control de la calidad del aire además de los controladores de emisiones en planta, se tiene la red de rastreo de contaminantes del polígono.

Para la calidad del agua, la planta encargada del tratamiento debe controlar el vertido verificando que sus parámetros no afecten al medio. Sin embargo, en planta se debe verificar las propiedades de las aguas residuales generadas garantizando que se encuentren dentro de los límites permitidos por la planta de tratamiento, así como controlar el volumen generado. Por último, se tendrá en cuenta los niveles acústicos mediante sonómetros, sobre todo en la fase de construcción y en las cercanías de bombas y compresores de la planta. En la Tabla 3 se muestran las actividades de seguimiento que se emplearán en el proyecto junto con la periodicidad del control y su ubicación.

Tabla 3. Resumen del programa de vigilancia del proyecto.

Parámetro a vigilar	Objetivo	Medidas a controlar	Ubicación del control	Periodicidad
Clima	Recoger información pertinente para la interpretación de datos para asegurar que el proyecto no afecte este parámetro.	Temperatura y precipitaciones	En la planta y en sus proximidades	Semanalmente
Calidad del aire	Garantizar que las emisiones no lo perjudiquen y se cumplan los límites legales.	Emisiones	En la planta y en sus proximidades	Diariamente

Tabla 3 (Continuación). Resumen del programa de vigilancia del proyecto.

Parámetro a vigilar	Objetivo	Medidas a controlar	Ubicación del control	Periodicidad
Ruido	Evitar molestias por ruido.	Decibelios emitidos	En planta	Diariamente
Calidad del agua	Garantizar la calidad del agua.	La carga contaminante en los vertidos	En planta	Semanalmente

9. Documento de síntesis

En el presente documento se ha elaborado un Estudio de Impacto Ambiental para la planta de producción de acroleína del presente proyecto, con el objetivo de identificar y evaluar todos los impactos, tanto positivos como negativos, que pueden derivarse por la implantación de la planta, desde su fase de construcción, explotación, hasta su desmantelamiento al final de su vida útil. Se ha empezado este estudio recalando su propósito y mencionando la ley a partir de la cual se estructura su contenido, que corresponde a la Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental.

El proceso de producción de acroleína se ha descrito exhaustivamente, explicando con detalle las tres secciones existentes en la planta. Asimismo, se ha comentado la localización de la planta y la razón por la cual se ha seleccionado dicha ubicación. Posteriormente, se han expuesto todas las alternativas consideradas para la producción de acroleína, y se ha justificado la alternativa seleccionada, considerándola como respetuosa con el medio ambiente.

Se ha realizado un inventario ambiental, considerando una variedad de aspectos ambientales que pueden sufrir impactos por la construcción, operación y desmantelamiento de la planta, entre ellos, aspectos físicos, biológicos y socioeconómicos. Mediante el inventario ambiental se expone la situación actual de todos los aspectos considerados. Posteriormente, se ha procedido a identificar, evaluar y valorar los impactos sobre cada uno de los aspectos ambientales considerados, clasificando de manera cualitativa los impactos en compatibles, moderados, severos y críticos. Además, se ha realizado la Matriz de Leopold, que corresponde a una matriz causa-efecto para evaluar el impacto ambiental del proyecto en cuestión, obteniendo como resultado que los impactos positivos superan a los negativos. Debido a esto, se puede considerar el proyecto viable desde el punto de vista medioambiental, siendo este respetuoso con el medio ambiente.

Cabe resaltar que también se ha comentado sobre la Red Natura 2000, y en cuanto a lo que se refiere a la provincia de Tarragona, se expuso que el municipio Constantí, donde se ubica la planta del presente proyecto, no se encuentra englobado dentro de los espacios protegidos. Por esta razón, en principio se puede comentar que no habrá mayores repercusiones en estos espacios de gran importancia ambiental. Sin embargo, en la provincia de Tarragona existen Lugares de Importancia Comunitaria, LIC, y Zonas de Especial Protección para las Aves, ZEPA, por lo tanto, siempre se debe garantizar que la biodiversidad se encuentre protegida.

Por último, se han expuesto diferentes medidas para reducir, eliminar o compensar los impactos existentes sobre los factores ambientales estudiados, en las tres fases del proyecto. Asimismo, se ha elaborado un programa de vigilancia y seguimiento ambiental, de modo que se mantengan supervisados los impactos identificados, y reducir siempre que sea posible los impactos negativos sobre el medio ambiente.

10. Bibliografía

1. **TOWLER G. & SINNOTT R.** *Chemical Engineering Design*. Elsevier Inc., 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1.
2. **Evonik Corporation.** SEPURAN® Noble: Membrane Technology for Efficient Helium Recovery & Purification. [En línea] 2020. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://corporate.evonik.com/Downloads/membrane-separation/sepuran-noble-sellsheet.pdf>.
3. **KIELY, G.** *Environmental Engineering*. Boston: Mc-Graw Hill, 1998. ISBN: 0-07-709127-2.
4. **Boletín Oficial del Estado, BOE.** Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera. [En línea] 2007. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.boe.es/buscar/pdf/2007/BOE-A-2007-19744-consolidado.pdf>.
5. **Boletín Oficial del Estado, BOE.** *Real Decreto Legislativo 1/2001, de 20 de julio, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley de Aguas*. Boletín Oficial del Estado, 2001, no 176, p. 26791-26817.
6. **GÓMEZ, J.** *Contaminación acústica: Sanciones Administrativas y Responsabilidad Patrimonial*. 2021.
7. **ABC Cataluña.** Complejo de Tarragona el Mayor Polo Petroquímico De España. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: https://www.abc.es/espana/catalunya/abci-complejo-tarragona-mayor-polo-petroquimico-espana-202001142000_noticia.html?ref=https:%2F%2Fwww.google.com%2F.
8. **ENTERAT.** Mapas De Carreteras y Autopistas De Peaje España 2021. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.enterat.com/servicios/mapa-carreteras-autopistas-espana.php>.
9. **DEPARTAMENTO DE TERRITORIO Y SOSTENIBILIDAD.** Datos E Informes De La Calidad Del Aire En Tarragona. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: http://mediambient.gencat.cat/es/05_ambits_dactuacio/atmosfera/qualitat_de_laire/qa-camp-tgn/dades/.
10. **BASH.** Cluster Químico. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.basf.com/es/es/who-we-are/BASF-en-Espan-a/Ubicaciones/Tarragona/El-complejo-quimico-mas-grande-del-sur-de-Europa.html>.
11. **TALEBIAN, A., SAIDINA N. & HEZAVEH, H.** Glycerol for renewable acrolein production by catalytic dehydration. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2014, 40, 28-59. ISSN 1364-0321.
12. **LIU, L., YE, P. & BOZELL, J.** A comparative review of petroleum-based and bio-based acrolein production. *ChemSusChem*, 2012, 5, 1162-1180. DOI: 10.1002/cssc.201100447.
13. **FOLLIARD, V., TOMMASO, J. & DUBOIS, J.** Review on Alternative Route to Acrolein through Oxidative Coupling of Alcohols. *Catalysts*, 2021, 11, 229. [En línea]. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.mdpi.com/2073-4344/11/2/229>.
14. **ULLMAN, F.** *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*. 5º ed. Michigan: VCH, 1988. ISBN: 3527201114.
15. **POLICH, N.** *Glicerol, Residuo de la Producción de Biodiesel: Posibles Alternativas Como Materia Prima Para Productos de Mayor Valor Agregado*. Argentina: Universidad Nacional del Litoral, 2019.
16. **SOLEY, R.** Bioenergía en España: ¿Es realmente una alternativa? *Ecologistas en Acción*. [En línea] 2019. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.ecologistasenaccion.org/131920>.
17. **FALCKE, H.** Best Available Techniques (BAT) reference document for the production of large volume organic chemicals. Publications Office of the European Union: Luxembourg, 2017.
18. **Agencia Estatal de Meteorología, AEMET.** Valores climatológicos normales. Reus Aeropuerto. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.aemet.es/es/serviciosclimaticos/datosclimatologicos/valoresclimatologicos?l=0016A&k=undefined>.

19. **Climate-Data.org**. Tarragona clima (España). [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://es.climate-data.org/europe/espana/cataluna/tarragona-1565/>.
20. **Tutiempo Network, S.L.** Clasificación climática mundial según Köppen. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.tutiempo.net/meteorologia/clasificacion-climatica-mundial.html>.
21. **Boletín Oficial del Estado, BOE**. Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire. [En línea] 2011. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.boe.es/boe/dias/2011/01/29/pdfs/BOE-A-2011-1645.pdf>.
22. **Boletín Oficial del Estado, BOE**. Real Decreto 678/2014, de 1 de agosto, por el que se modifica el Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire. [En línea] 2014. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.boe.es/boe/dias/2014/08/25/pdfs/BOE-A-2014-8898.pdf>.
23. **Boletín Oficial del Estado, BOE**. 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. [En línea] 2017. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.boe.es/boe/dias/2017/01/28/pdfs/BOE-A-2017-914.pdf>.
24. **Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico**. Índice de Calidad del Aire. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/atmosfera-y-calidad-del-aire/calidad-del-aire/ICA.aspx>.
25. **Departamento de Territorio y Sostenibilidad**. Datos e informes de la calidad del aire en Tarragona. [En línea] Generalitat de Catalunya, 2021. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: http://mediambient.gencat.cat/es/05_ambits_dactuacio/atmosfera/qualitat_de_laيرة/qa-camp-tgn/dades/.
26. **Guía España**. Mapas de Catalunya. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.guiaespana.net/mapas-espa%C3%B1a/mapas-catalunya/>.
27. **Universitat Tarraconensis**. Los suelos del Camp de Tarragona. [En línea] *Revista de Geografia, Història i Filosofia, Publicacions Universitat Rovira i Virgili*, 3, 1979-1980. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.raco.cat/index.php/UTGHF/article/download/356519/448442/>. ISSN 2604-2096.
28. **Agencia Catalana del Agua**. El Agua en Cataluña: Diagnòsis y propuestas de actuación. [En línea] 2008. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: https://aca-web.gencat.cat/aca/documents/ca/publicacions/aigua_a_catalunya/aigua_a_catalunya_es.pdf.
29. **Fondo Español de Garantía Agraria, FEAGA**. Listado de Confederaciones Hidrográficas. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: https://www.fega.es/sites/default/files/imported/PwfGcp/imagenes/es/Fega_Conf_Hidrog.pdf.
30. **Mare Terra Fundació Mediterrània**. Reproductor de vídeo. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.mare-terra.org/custodia-y-vigilancia/>.
31. **Centro Nacional de Información Geográfica (CNIG)**. Información geográfica de referencia. [En línea] Gobierno de España. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <http://centrodedescargas.cnig.es/CentroDescargas/catalogo.do?Serie=CAANE>.
32. **Agència Catalana de l'Aigua**. Estat de les masses d'aigua. [En línea] Generalitat de Catalunya. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <http://aca.gencat.cat/ca/laigua/estat-del-medi-hidric/estat-de-les-masses-daigua/>.
33. **Boletín Oficial del Estado, BOE**. LEY 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido. [En línea] 2003. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.boe.es/boe/dias/2003/11/18/pdfs/A40494-40505.pdf>.
34. **Departamento de Territorio y Sostenibilidad**. Legislación. [En línea] Generalitat de Catalunya. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: http://mediambient.gencat.cat/es/05_ambits_dactuacio/atmosfera/contaminacio_acustica/normativa/legislacio/.

35. **Portal Jurídic de Catalunya.** LLEI 16/2002, de 28 de juny, de protecció contra la contaminació acústica. [En línea] Generalitat de Catalunya. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://portaljuridic.gencat.cat/eli/es-ct/l/2002/06/28/16>.
36. **DECRET 176/2009**, de 10 de novembre, pel qual s'aprova el Reglament de la Llei 16/2002, de 28 de juny, de protecció contra la contaminació acústica, i se n'adapten els annexos. [En línea] Generalitat de Catalunya. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://portaljuridic.gencat.cat/eli/es-ct/d/2009/11/10/176>.
37. **Departamento de Territorio y Sostenibilidad.** Mapa estratègic de soroll. [En línea] Generalitat de Catalunya. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://sig.gencat.cat/visors/soroll.html>.
38. **Departament de Territori i Sostenibilitat.** Biodiversitat. [En línea] Generalitat de Catalunya, 2014. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: http://mediambient.gencat.cat/ca/05_ambits_dactuacio/patrimoni_natural/senp_catalunya/espais_sistema/camp_de_tarragona/mst/biodiversitat/.
39. **Mas Corbella.** La vegetación en Tarragona. [En línea] 2020. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.mascorbella.com/es/la-vegetacion-en-tarragona/>.
40. **Instituto de Estadística de Cataluña.** Cifras de población. [En línea] Generalitat de Catalunya. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.idescat.cat/pub/?id=aec&n=245&lang=es>.
41. **Datosmacro.com.** Economía de las comunidades autónomas: Cataluña. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://datosmacro.expansion.com/ccaa/cataluna#:~:text=Su%20PIB%20es%20de%20236.814,PIB%20per%20c%C3%A1pita%20en%20Espa%C3%B1a>.
42. **Servicio Público de Empleo Estatal, SEPE.** Informe del Mercado de Trabajo de Tarragona, Datos del 2018. [En línea] Observatorio de las Ocupaciones, 2019. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.sepe.es/dctm/informes/09019ae3819f316a/SU5GT1JNRVM=/3244-1.pdf>.
43. **Datosmacro.com.** Paro por municipios: Tarragona - (Tarragona). [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://datosmacro.expansion.com/paro/espana/municipios/cataluna/tarragona/tarragona>.
44. **Fundación AQUAE.** Los gases de efecto invernadero. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: https://www.fundacionaquae.org/los-gases-de-efecto-invernadero/?gclid=CjwKCAjw-qeFBhAsEiwA2G7Nl33zbQ3xi9TJ7XjQmeUx9_YjEXYASaThnSpQEXQsRCUioCT4WykCAhOCsQAQAvD_BwE.
45. **BENGOCHEA, A., MUÑOZ, M., CUESTA, M.** *Dimensión medioambiental de la RSC*. La Coruña: Netbiblio, D. L., 2010. ISBN: 978-84-9745-511-4.
46. **Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico.** Red Natura 2000. [En línea] Gobierno de España. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000/default.aspx>.
47. **La Red Natura 2000 en España.** [En línea] Gobierno de España. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000/rn_espana.aspx.
48. **Red Natura 2000.** [En línea] Gobierno de España. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/servicios/banco-datos-naturaleza/informacion-disponible/red_natura_2000_inf_disp.aspx.
49. **FACTS.** Chemical Accidents with Acrolein. *Hazardous Materials Accidents Knowledge Base*. [En línea] [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: http://www.factsonline.nl/accidents/%205405/91092_ACROLEIN/chemical-accidents-with-acrolein.
50. **ACOLEQ QUIMICOS, S.L.** *Estudio de Impacto Ambiental*. Bilbao: IDOM, 2007.

DOCUMENTO IV:

PRESUPUESTO

ÍNDICE

1.	Introducción	1
2.	Método para estimar el precio de los equipos	1
3.	Factores de corrección de los costes	2
4.	Actualización de costes y cambio de divisa.....	3
5.	Coste de equipos de la planta.....	3
6.	Inversión de capital fijo.....	4
6.1.	Verificación de los resultados.....	5
7.	Desglose de las partidas.....	6
8.	Presupuesto Total	8
9.	Bibliografía.....	9

1. Introducción

Lo que se busca al implementar una nueva planta química es obtener una ganancia, siendo necesario para ello estimar la inversión y los costes de producción para poder evaluar su rentabilidad (1). El presente documento tiene como objetivo proporcionar un valor numérico como referencia del coste total del proyecto de producción de acroleína a partir del propileno.

La estimación de costes es fundamental para decidir entre las diversas alternativas del proyecto, y puede servir para ubicar que diseños deben ser optimizados, mostrando las partes de la planta que más afectan a la rentabilidad. Sin embargo, la precisión del resultado depende de la cantidad de especificaciones de diseño conocidas para el proyecto, y la exactitud con la que se obtuvieron dichos valores (1).

Por consiguiente, en las primeras fases de un proyecto se requiere solo una estimación aproximada del presupuesto, debido a la cantidad de información disponible. Concretamente, según la clasificación de la *Association for the Advancement of Cost Estimating International* (AACE International) la estimación del coste que se realizará para el presente proyecto se encuentra dentro de la Clase IV. En esta clase se ubican las estimaciones preliminares con una precisión de $\pm 30\%$, correspondiente a la fase de ingeniería conceptual. Esta estimación se basa en costes y detalles de diseño limitados (1).

El método empleado se basa en la determinación del coste de los equipos principales de la planta. Posteriormente, mediante este se obtendrán las demás partidas que componen el presupuesto empleando un método factorial. Asimismo, se comparará el resultado empleando el método histórico de datos, para verificar que este se encuentre en un rango lógico.

2. Método para estimar el precio de los equipos

Dado que el método factorial requiere el coste de los equipos adquiridos de la planta, su correcta estimación es un parámetro crucial. Para proyectos que no cuentan con softwares especiales o costes definidos que permitan realizar esta estimación se puede emplear la Ecuación [1] (1).

$$C_e = a + b \cdot S^n \quad [1]$$

Siendo:

- C_e es el coste de compra del equipo, en \$ para el año 2007.
- a , b y n son constantes de cada equipo que se recogen en la Tabla 1.
- S es el parámetro de diseño empleado como base para el cálculo, en las unidades que correspondan según el equipo. (El cual debe estar dentro del rango inferior y superior que se muestran).

Tabla 1. Valores empleados en el método factorial para calcular el coste de los equipos (1).

Equipo, parámetro de diseño	S inferior	S superior	a	b	n
Intercambiador de calor, área de intercambio en m^2	10,00	1.000,00	24.000,00	46,00	1,20
Caldera parcial, área de intercambio en m^2	10,00	500,00	25.000,00	340,00	0,90
Compresores, potencia en kW	93,00	16.800,00	220.000,00	2,30	0,75
Recipiente a presión 304S vertical, masa en kg	120,00	250.000,00	15.000,00	68,00	0,85

Tabla 1 (continuación). Valores empleados en el método factorial para calcular el coste de los equipos (1).

Equipo, parámetro de diseño	S inferior	S superior	a	b	n
Recipiente a presión 304S horizontal, masa en kg	120,00	50.000,00	11.000,00	63,00	0,85
Platos perforados, diámetro del plato en m	0,50	5,00	110,00	380,00	1,20
Bombas, caudal en L/s	0,20	126,00	6.900,00	206,00	0,90
Relleno, volumen en m ³	0,00	0,00	0,00	1.800,00	1,00

Cabe destacar, que una vez calculado C_e , este debe ser corregido en el caso de que el equipo opere a condiciones atípicas como se mostrará a continuación. Asimismo, para las válvulas y el filtro de aire no se empleará la Ecuación [1] para estimar su coste pues serán obtenidos mediante los catálogos del proveedor.

3. Factores de corrección de los costes

Un error común en el método factorial es no corregir los costes de los equipos con los factores correspondientes a sus condiciones de operación. Hay tres variables importantes que se deben considerar en el coste, la temperatura, la presión y el material de construcción (1).

Los valores de la Tabla 1 son una estimación para equipos construidos en acero al carbono, exceptuando los recipientes a presión, que corresponden a acero inoxidable 304. Por lo tanto, al emplear otro material ha de multiplicarse el valor obtenido por su correspondiente factor de corrección de material. En la Figura 1 se puede observar el valor de dicho factor para diversas aleaciones, de la cual se selecciona el correspondiente a acero inoxidable 304 (1).

Material	f_m
Carbon steel	1.0
Aluminum and bronze	1.07
Cast steel	1.1
304 stainless steel	1.3
316 stainless steel	1.3
321 stainless steel	1.5

Figura 1. Factor de corrección según el material de construcción (1).

Por otro lado, según la bibliografía (2) se aplicará un factor de 1,6 en los equipos cuya temperatura supere los 100 °C y un factor de 2,1 cuando este supere los 300 °C. Sin embargo, no es necesario aplicar un factor de corrección de presión, dado que siempre se opera dentro de los valores de presión de 0,5 y 7 bar.

Dichos factores se aplican cuando sea necesario siguiendo la Ecuación [2].

$$C_e^* = C_e \cdot f_{material} \cdot f_{temperatura} \quad [2]$$

4. Actualización de costes y cambio de divisa

Como se mencionó anteriormente, los costes por equipo son obtenidos en dólares para el año 2007. Por consiguiente, primero se actualizará el precio al año actual (2021) y luego se realizará la conversión al euro.

Debido a la inflación cada año el valor del dinero va fluctuando, por lo que se emplea la Ecuación [3] con el objetivo de actualizar los costes mediante índices publicados.

$$C_{eAÑO A} = C_{eAÑO B} \cdot \frac{Indice_{AÑO A}}{Indice_{AÑO B}} \quad [3]$$

El índice del año B ha sido obtenido junto a los datos de la Tabla 1 en la bibliografía (1), cuyo valor es 509,7. Mientras que el índice del año A puede ser extrapolado de uno de los índices publicados, o seleccionado entre los índices más recientes. Dado que la inflación es difícil de pronosticar se ha optado por seleccionar el índice publicado por la revista *Chemical Engineering*. Siendo el valor más reciente encontrado para el mes de julio del 2020 con un valor de 593,5.

Por otro lado, el valor actualizado debe ser convertido a la moneda del país en el que se materializará el proyecto, siendo este España, se cambiará a euros. El cambio se realiza mediante la divisa pertinente, la cual ha sido obtenida el día 11 de mayo del 2020 como (3):

$$1 \text{ EUR (€)} = 1,21 \text{ USD ($)}$$

5. Coste de equipos de la planta

En la Tabla 2 se muestran los resultados obtenidos al aplicar el método explicado anteriormente, ya corregido por los factores pertinentes y actualizado en euros. Asimismo, destacar que los parámetros de diseño requeridos para el cálculo de estos costes han sido previamente calculados en el *Anexo II: Cálculos justificativos. Parte E: Dimensionamiento básico de equipos*.

Tabla 2. Costes de adquisición de los distintos equipos de la planta corregidos y actualizados al año 2020.

	Equipos	Coste (€)
	Compresor K-101	275.410,51
	Filtro FT-101	1.500,00
Válvulas	VLV-101	5.000,00
	VLV-301	1.000,00
	E-101	67.230,80
	E-102	80.056,65
Intercambiadores de calor	E-301	60.116,17
	E-302	37.276,28
	E-303	38.721,67
	E-304	35.528,79
	Caldera parcial E-305	58.849,77
	P-301 (2 unidades)	18.499,55
Bombas	P-302 (2 unidades)	17.811,25
	P-303 (2 unidades)	18.109,28
	P-304 (2 unidades)	18.021,24

Tabla 2 (continuación). Costes de adquisición de los distintos equipos de la planta corregidos y actualizados al año 2020.

	Equipos	Coste (€)
	Reactor R-201	151.971,41
	Columna <i>quench</i> T-301	83.166,85
Recipientes a presión	Columna de absorción T-302	28.361,07
	Columna de desorción T-303	67.141,09
	Columna de destilación T-304	39.536,14
	Tambor de reflujo, V-301	14.599,47
	Suma total	1.117.907,99

6. Inversión de capital fijo

El coste de la inversión de capital fijo es el precio total requerido para la planta. Este coste incluye por lo tanto los costes de diseño, acondicionamiento del terreno, construcción e instalación. Asimismo, esta inversión puede dividirse en cuatro partidas:

- 1) El coste de la planta de por sí. Llamada también ISBL por sus siglas en inglés para inversión de límites internos de batería.
- 2) Acondicionamiento del terreno, conocida como OSBL u *off-site*.
- 3) Costos de construcción e ingeniería
- 4) Coste por contingencias

A mayores ha de considerarse el precio de adquisición de la parcela.

Para el cálculo de estos costes se emplea el método factorial. Para ello, se emplea el coste total de equipos obtenido y se multiplica por un factor, correspondiente para cada partida. Estos factores se muestran en la Tabla 3 junto con su respectiva partida.

Tabla 3. Factores para el cálculo de las partidas mediante el método factorial.

Partida	Valor del factor
Coste de ISBL:	
Adquisición de los equipos	$C_{e\,total}^*$
Instalación del equipo, f_{er}	0,30
Conducciones, f_p	0,80
Instrumentación y control, f_i	0,30
Electricidad, f_{el}	0,20
Costes civiles, f_c	0,30
Estructuras y edificios, f_s	0,20
Revestimientos y pintura, f_l	0,10
<i>Off-sites</i> (OS)	0,30
Costos de construcción e ingeniería (D&E)	0,30
Coste por contingencias (X)	0,10

Como se puede observar el coste total de la partida ISBL se calcula como la suma de diversos costes. Sin embargo, es importante resaltar que para la partida de conducciones se emplea el valor de $C_{e\,total}^*$ el cual esta corregido por los factores de material y temperatura. Este cálculo se realiza por lo tanto como se muestra en la Ecuación [4].

$$C_{ISBL} = C_{e_{total}} \cdot (1 + f_p) + C_{e_{total}} \cdot (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l) \quad [4]$$

Por otro lado, el coste de *off-site*, construcción e ingeniería y el de contingencias es calculado a partir el coste de ISBL por su factor de la tabla. Es decir, se emplea el C_{ISBL} en vez de C_e . Es por ello que, en las primeras fases del proyecto, es fundamental calcular con prudencia el alcance de ISBL, ya que otros costos son estimados a partir de este. El presupuesto general del proyecto puede calcularse erróneamente si valor de ISBL no es correcto.

Por otro lado, para determinar la inversión de capital fijo, conocido comúnmente como capital inmovilizado, se emplea la Ecuación [5].

$$C_{FC} = C_{ISBL} \cdot (1 + OS) \cdot (1 + D\&E + X) + \text{Coste de parcela} \quad [5]$$

Siendo C_{FC} el capital inmovilizado y *Coste de parcela* el precio de adquisición que se ha de pagar por la parcela seleccionada (dicho precio ha sido proporcionado en el apartado 10.2. *Disponibilidad de parcela y utilidades* en el Documento I: Memoria).

Por último, se estima el capital circulante. Este capital es el dinero adicional requerido para ejecutar la planta hasta que comience a generar ingresos. En él se incluyen otros gastos distintos a los calculados anteriormente, como pueden ser los costes de inventario, efectivo disponible y crédito para cuentas por pagar. Su valor se determina como un porcentaje de la suma de las partidas de ISBL y la *off-site*. Normalmente, se trata de un 10 a un 20% de este por lo que se ha seleccionado un 15%.

La suma de todas las partidas mencionadas anteriormente representa la inversión total.

6.1. Verificación de los resultados

Los resultados obtenidos pueden ser comparados con los costes requeridos históricamente para la instalación de planta del mismo producto.

Para una verificación del C_{ISBL} se empleará el método de datos de costos históricos. Una estimación rápida del coste de la planta puede realizarse escalando su magnitud a partir de datos conocidos de plantas que emplean la misma tecnología para producir el mismo producto. Se utiliza por lo tanto para este método la Ecuación [6].

$$C_2 = C_1 \cdot \left(\frac{S_2}{S_1}\right)^n = a \cdot S_2^n \quad [6]$$

Siendo:

- C_2 el coste ISBL de una planta con una capacidad S_2 .
- C_1 el coste ISBL de una planta con una capacidad S_1 .
- n es una constante que depende del proceso realizado por la planta.
- a es el parámetro propuesto para el proceso mediante la revista *Hydrocarbon Processing*.

De la bibliografía (1) se han obtenidos los datos requeridos para esta estimación del coste ISBL con el objetivo de compararlo al calculado mediante los equipos de la planta y verificar que se encuentra dentro de los rangos típicos.

Tabla 4. Parámetros para el cálculo del ISBL para una planta de acroleína.

Proceso	Unidad de la capacidad	α	n
Producción de acroleína a partir de propileno empleando el catalizador Bi/Mo	MMlb/año	6,81	0,60

Al aplicar la Ecuación [6] se obtiene un coste en millones de dólares americanos correspondientes para el año 2006. Este coste debe ser actualizado con su índice CE, 478,6 mediante la Ecuación [3]. Asimismo, antes de compararlo con el valor calculado de ISBL ha de ser convertido a euros mediante el cambio de divisas.

Cabe destacar, que el método está restringido para unos límites de capacidad entre 30 y 150 MMLb/año. Siendo la producción de este proyecto inferior, se ha calculado con el umbral mínimo como referencia entendiendo que el valor de C_{ISBL} debe estar muy por debajo.

Por otro lado, también se tiene de referencia la inversión total requerida para dos plantas de producción de acroleína con capacidades similares. La primera, sacada de la bibliografía (4), es para una producción de 10 mil toneladas en el año 2011, siendo su inversión total 15,7 millones de dólares que equivale a 12,9 millones de euros. Mientras que la segunda hace referencia a una planta de producción de 36 mil toneladas en el año 2003, cuya inversión estimada es de 65 millones de dólares, extrapolando a una capacidad menor serían 14,9 millones de euros (5).

7. Desglose de las partidas

Las partidas anteriores pueden clasificarse en costes directos e indirectos. En la Tabla 5 se recogen los costes directos del proyecto.

Tabla 5. Partidas pertenecientes a los costes directos.

Ítem	Descripción	Medición	Coste, €
ISBL	Coste de la planta	Partida alzada	3.347.016,70
Coste de los equipos	Adquisición de los equipos del proceso	Partida alzada	1.117.907,99
Instalación de los equipos	Instalación, Estructura y mano de obra	Partida alzada	286.024,78
Conducciones	Instalación de la red de tuberías de la planta	Partida alzada	894.326,39
Control e instrumentación	Instalación y puesta en marcha del sistema de control automático del proceso	Partida alzada	286.024,78
Electricidad	Materiales necesarios y montaje de la red eléctrica	Partida alzada	190.683,19

Tabla 5 (continuación). Partidas pertenecientes a los costes directos.

Ítem	Descripción	Medición	Coste, €
Estructura y edificios	Edificación de oficinas, comedor, laboratorio...	Partida alzada	286.024,78
Civil	Carreteras, desagües...	Partida alzada	190.683,19
Revestimientos y pintura	Aislantes y pinturas	Partida alzada	95.341,59
Off-site	Utilidades, edificios auxiliares, accesos y laboratorios	Partida alzada	1.004.105,01
Total, €			4.351.121,70

Por otro lado, los costes indirectos se asocian a los costes de construcción desde alquiler de equipos hasta remolques o utilidades necesarias para su edificación. Además, contempla costes adicionales como horas extras o comedores de campaña, seguridad social, costos legales y gastos generales corporativos, entre otros. Estos se pueden clasificar en diversas partidas como se muestra en la Tabla 6.

Tabla 6. Partidas pertenecientes a los costes indirectos.

Ítem	Descripción	Medición	Coste, €
Costos de construcción e ingeniería	Diseños detallados y mano de obra	Partida alzada	1.004.105,01
Coste por contingencias	Fondo reservado para costes extras por imprevistos	Partida alzada	334.701,67
Coste de la parcela	Adquisición de los solares	Partida alzada	2.302.178,10
Total, €			3.640.984,78

La suma de las partidas anteriores corresponde al coste del capital inmovilizado, este se muestra en la Tabla 7.

Tabla 7. Partida del coste inmovilizado.

Ítem	Descripción	Medición	Coste, €
Capital fijo	Capital inmovilizado	Partida alzada	7.992.106,48

Finalmente, se muestra en la Tabla 8 el capital circulante.

Tabla 8. Partida del capital circulante.

Ítem	Descripción	Medición	Coste, €
Capital circulante	Capital circulante	Partida alzada	652.668,26

8. Presupuesto Total

La inversión total del proyecto se recoge en la Tabla 9, siendo esta la suma de todas sus partidas desglosadas calculadas anteriormente.

Tabla 9. Presupuesto total.

Partida	Importe, €
Coste de los equipos	1.117.907,99
Instalación de los equipos	286.024,78
Conducciones	894.326,39
Control e instrumentación	286.024,78
Electricidad	190.683,19
Estructura y edificios	286.024,78
Civil	190.683,19
Revestimientos y pintura	95.341,59
Off-site	1.004.105,01
Construcción e ingeniería	1.004.105,01
Contingencias	334.701,67
Coste de la parcela	2.302.178,10
Capital circulante	652.668,26
Total	8.644.774,74

El presupuesto total para la planta de producción de acroleína a partir de la oxidación parcial del propileno es de OCHO MILLONES SEISCIENTOS CUARENTA Y CUATRO MIL SETECIENTOS SETENTA Y CUATRO EUROS CON SETENTA Y CUATRO CÉNTIMOS (8.644.774,74 €).

Santiago de Compostela, 3 de junio de 2021

Los autores del proyecto,



Andrea Estefanía
Fernández Soto



Andrea Paola
Marques Cosme



Alejandro José
Jauregui Rodríguez

9. Bibliografía

1. **TOWLER G. & SINNOTT R.** *Chemical Engineering Design*. United Kingdom: BIRTCHE K., 2020.
2. **SMITH, R.** *Chemical Process Design and Integration*. 2° ed. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd, 2016. ISBN: 9781119990147.
3. **CUEX.** Conversor de Moneda. [En línea] 2021. [Consultado en marzo 2021]. Disponible en: <https://cuex.com/es/eur-usd>.
4. **LIU, L., YE, P. & BOZELL, J.** A comparative review of petroleum-based and bio-based acrolein production. *ChemSusChem*, 2012, 5, 1162-1180. DOI: 10.1002/cssc.201100447.
5. **FOLLIARD, V., TOMMASO, J. & DUBOIS, J.** Review on Alternative Route to Acrolein through Oxidative Coupling of Alcohols. *Catalysts*, 2021, 11, 229. [En línea]. [Consultado en mayo 2021]. Disponible en: <https://www.mdpi.com/2073-4344/11/2/229>.