

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA  
ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA



Escola  
Técnica  
Superior  
de Enxeñaría

TRABALLO FIN DE GRAO  
GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA

DESEÑO BÁSICO DUNHA PLANTA DE PRODUCCIÓN  
DE CICLOHEXANONA A PARTIR DE FENOL

Raúl Bonenfant Muñiz  
Ismael Fernández Pazó

Xullo 2020

*(Páxina deixada en branco de xeito intencionado)*

## ÍNDICE XERAL

### DOCUMENTO I. MEMORIA

Anexo I. Balances de materia e enerxía

Anexo II. Cálculos xustificativos

Parte I. Reactor R-201

Parte II. Columna destilación T-301

Parte III. Dimensionamento básico de equipos

Anexo III. Códigos de MATLAB para o Reactor R-201

Anexo IV. Fichas de Seguridade<sup>1</sup>

Anexo V. Estudo de viabilidade económica

### DOCUMENTO II. PLANOS

### DOCUMENTO III. PREGO DE CONDICIÓN<sup>2</sup>

### DOCUMENTO IV. ESTUDOS CON ENTIDADE PROPIA<sup>3</sup>

### DOCUMENTO V. ORZAMENTO

---

<sup>1</sup> As Fichas de seguridade constan unicamente no Documento 2, dado que a presentación do TFG é exclusivamente virtual o ano vixente debido ás circunstancias derivadas da crise sanitaria do COVID-19

<sup>2</sup> O Prego de Condicións está presente no Documento 2

<sup>3</sup> Dentro dos Estudos con Entidade Propia, o relativo ao de Seguridade e Saúde atóparase no Documento 2, mentres que o de Avaliación do Impacto Ambiental, estará no presente documento, Documento 1.

**DOCUMENTO I:**  
**MEMORIA**

Índice Documento I. Memoria

1. OBXETO DO PROXECTO .....	7
2. XUSTIFICACIÓN .....	8
3. PRODUTOS E SUBPRODUTOS.....	9
3.1. Produtos. Ciclohexanona.....	9
3.1.1. Introducción .....	9
3.1.2. Propiedades químicas .....	9
3.1.3. Propiedades físicas e termodinámicas .....	10
3.1.4. Aplicacións industriais .....	11
3.1.5. Análise de mercado da ciclohexanona.....	11
3.2. Subprodutos. Ciclohexanol.....	14
3.2.1. Introducción .....	14
3.2.2. Propiedades químicas .....	15
3.2.3. Propiedades físicas e termodinámicas .....	15
3.2.4. Aplicacións industriais .....	16
3.2.5. Mercado do ciclohexanol .....	16
4. MATERIAS PRIMAS .....	17
4.1. Fenol.....	17
4.1.1. Introducción .....	17
4.1.2. Propiedades físicas e termodinámicas .....	18
4.1.3. Aplicacións industriais .....	18
4.1.4. Almacenamento, transporte, seguridade e saúde.....	18
4.1.5. Mercado do fenol.....	19
4.2. Hidróxeno .....	20
4.2.1. Introducción .....	20
4.2.2. Propiedades físicas e termodinámicas .....	20
4.2.3. Obtención .....	21

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

4.2.4. Aplicacións industriais .....	22
4.2.5. Mercado do hidróxeno.....	23
5. ANÁLISE DE ALTERNATIVAS .....	25
5.1. Hidroxenación do fenol .....	25
5.2. Oxidación en fase líquida do ciclohexano.....	26
5.3. Oxidación do ciclohexano modificado con ácido bórico .....	27
5.4. Deshidroxenación do ciclohexanol.....	28
6. EMPRAZAMENTO E LOCALIZACIÓN.....	29
6.1. Selección da localización.....	30
6.2. Selección da parcela .....	31
6.3. Estudo do clima .....	32
6.4. Datos de sismicidade .....	34
7. XUSTIFICACIÓN DA ALTERNATIVA, PROCESO, TECNOLOXÍA, MATERIA PRIMA E CATALIZADOR.....	35
8. ESTUDO DE VIABILIDADE TÉCNICA.....	38
8.1. Disponibilidade de materias primas .....	38
8.2. Venda de produtos .....	38
8.3. Disponibilidade de utilidades .....	39
8.4. Disponibilidade de equipos e de tecnoloxía .....	40
8.5. Cálculo do beneficio bruto. ....	40
9. DESCRICIÓN DA INSTALACIÓN .....	41
9.1. Por seccións .....	41
9.1.1. Sección 100 .....	41
9.1.2. Sección 200 .....	42
9.1.3. Sección 300 .....	42
9.2. Por equipos .....	43
9.2.1. TK-101 .....	43

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

9.2.2. TK-102 .....	43
9.2.3. VLV-101.....	43
9.2.4. P-101 A/B.....	43
9.2.5. M-101 .....	43
9.2.6. E-201 .....	44
9.2.7. R-201 .....	44
9.2.8. E-202 .....	44
9.2.9. K-201 A/B .....	44
9.2.10. VLV-201.....	44
9.2.11. R-301 .....	44
9.2.12. E-301 .....	45
9.2.13. E-302 .....	45
9.2.14. K-301 A/B .....	45
9.2.15. VLV-301.....	45
9.2.16. T-301 .....	45
9.2.17. E-303 .....	45
9.2.18. E-304 .....	46
9.2.19. E-305 .....	46
9.2.20. V-301 .....	46
9.2.21. P-301 A/B.....	46
9.2.22. P-302 A/B.....	46
9.2.23. P-303 A/B.....	47
9.2.24. P-304 A/B.....	47
10. CONTROL E INSTRUMENTACIÓN .....	47
10.1 Introducción .....	47
10.2. Obxectivos dun sistema de control.....	48
10.3. Representación dun lazo de control. Elementos dun lazo de control .....	49

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

10.4. Simbología e nomenclatura .....	50
10.5. Configuracións de control .....	52
10.5.1. Control Feedback.....	52
10.5.2. Control Feedforward .....	53
10.5.3. Control do ratio.....	54
10.5.4. Control en cascada.....	54
10.6. Algoritmos de control.....	55
10.7. Lazos de control .....	59
10.7.1. Sección 100 .....	59
10.7.2. Sección 200 .....	59
10.7.3. Sección 300 .....	61
11. SEGURIDADE NA OPERACIÓN.....	62
11.1. Introducción .....	62
11.2. Inventario de sustancias e Clasificación Seveso .....	63
11.2.1 Clasificación segundo a norma NFPA 704 .....	64
11.3. Estudio de reactividade descontrolada .....	65
11.3.1 Matriz de compatibilidade química .....	66
11.3.2 Criterios termodinámicos .....	67
11.4. Índice DOW de lume e explosión .....	69
11.5. Válvulas de alivio .....	74
11.5.1. Dimensionamento PSV-303 .....	74
11.6. Distancias de seguridade .....	77
11.7. Escenario hipotético de fuga.....	79
12. LEXISLACIÓN E CÓDIGOS DE DESEÑO EMPREGADOS .....	83
12.1. Ámbito europeo .....	83
12.1.1. Lexislación ambiental.....	83
12.1.2. Lexislación en materia de seguridade industrial, saúde e hixiene laboral..	84

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

12.2	Ámbito estatal.....	85
12.2.1.	Lexislación ambiental.....	85
12.2.2.	Lexislación en materia de seguridade industrial, saúde e hixiene laboral..	85
12.3	Ámbito autonómico .....	87
12.3.1.	Lexislación ambiental da autonomía andaluza.....	87
12.4	Códigos de deseño e outras normas.....	88
13.	BIBLIOGRAFÍA .....	89

## 1. OBXETO DO PROXECTO

O presente proxecto ten como finalidade o deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol, sendo a súa capacidade de 150.000 t/ano. Esta capacidade escolleuse de acordo a un pormenorizado análise do mercado, atendendo ás necesidades do mercado español baseado nas necesidades de importación actuais e futuras.

A planta operará 330 días/ano en réxime continuo, deseñándose os equipos principais da mesma, onde o alumno D. Raúl Bonenfant Muñiz realizará o deseño correspondente ao reactor R-201 e o alumno Ismael Fernández Pazó, a columna de destilación a baleiro T-301. O restante contido realizouse de maneira conxunta e coordinada.

Adicionalmente, coa realización deste traballo fin de grao, os alumnos D. Raúl Bonenfant Muñiz e Ismael Fernández Pazó optan á obtención do título de graduado en Enxeñaría Química pola Universidade de Santiago de Compostela (USC).

## 2. XUSTIFICACIÓN

A escolleita do presente traballo fin de grao radica no interese derivado da utilización da ciclohexanona como bloque intermedio na industria, e máis particularmente, pola súa obtención mediante a ruta de reacción con fenol, dado o aumento de produción que está a experimentar este último nos derradeiros anos.

Espertou tamén grande curiosidade a posibilidade de conseguir unha maior cantidade de produto final, ciclohexanona, revertendo o equilibrio formado pola mesma co ciclohexanol. Isto supuxo unha oportunidade para aplicar os coñecementos adquiridos durante os catro anos de grao, así como a posibilidade de ir un paso máis alá ao ter que separar dous compostos cun equilibrio moi próximo, supoñendo claramente un reto enxeñeril para a súa consecución.

### 3. PRODUTOS E SUBPRODUTOS

#### 3.1. Produtos. Ciclohexanona

##### 3.1.1. Introducción

A ciclohexanona [CAS 108-94-1] é un composto orgánico con fórmula molecular  $C_6H_{10}O$ , é un líquido incoloro, podendo adoptar un ton suavemente amarelo. O seu cheiro lembra ao da acetona, que ao igual que esta última, resulta igualmente moi soluble en disolventes de orixe orgánica (1).

Tanto a ciclohexanona como o ciclohexanol (coexistente no proceso) experimentan unha gran demanda no mercado actual e a súa produción realízase a gran escala (1).

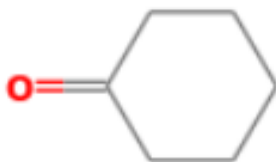


Figura 1. Molécula de ciclohexanona. Fonte: (2)

##### 3.1.2. Propiedades químicas

A reactividade da ciclohexanona é bastante notoria, reaccionando por exemplo con cianuro de hidróxeno, dando lugar á cianhidrina, precursor industrial de diversos ácidos carboxílicos e numerosos aminoácidos (1).

Tal e como se verá ao longo do presente traballo fin de grao, a ciclohexanona, tamén se pode hidroxenar para dar ciclohexanol, dando lugar a ciclohexano se a reacción se realiza en condicións máis drásticas. De feito, un dos pilares do proceso descrito no proxecto é xustamente o contrario, isto é, a deshidroxenación do ciclohexanol para reverter o equilibrio e formar máis ciclohexanona, o produto desexado.

Sen dúbida algunha, dentro das reaccións comerciais nas que participa a ciclohexanona e unha das máis interesantes, é coa hidroxilamina, dando lugar á oxima de ciclohexanona, produto intermedio necesario para a síntese de caprolactama. Se se leva a cabo a oxidación con ácido nítrico forte, daría lugar ao ácido adípico (1).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 3.1.3. Propiedades físicas e termodinámicas

Na Táboa 1 móstranse tanto as propiedades físicas como termodinámicas máis relevantes da ciclohexanona.

Táboa 1. Propiedades físicas e termodinámicas da ciclohexanona. Fonte: (1) (3)

Propiedade	Valor
Fórmula	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O
Peso molecular (g/mol)	98,14
Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	950 (20°C)
Punto de fusión (°C)	-47
Punto de ebulición (°C)	156,4
Punto flash (°C)	54
Índice de refracción (n <sub>D</sub> <sup>20</sup> )	1,4552
Viscosidade dinámica (mPa*s)	1,803 (30°C)
Entalpía de formación (kJ/mol)	-272
Calor de combustión (MJ/mol)	-3,521
Calor de fusión (kJ/mol)	1,501
Calor de vaporización (kJ/mol)	44,92
Calor específico (J/g)	1,811
Límite inferior de explosividade (%vol.)	1,1
Límite superior de explosividade (% vol.)	9,4
Temperatura de autoignición (°C)	420
Presión de vapor (kPa)	0,52 (20°C)
Solubilidade (g ona/100g auga)	9,0 (20°C)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 3.1.4. Aplicacións industriais

A ciclohexanona é amplamente empregada na industria, sendo esta de índole moi diversa. O principal uso da mesma dáse como precursora da caprolactama e do ácido adípico, monómeros do nylon.

Lonxe de ser o único derivado deste excepcional produto, ten unha gran utilización como disolvente orgánico, sendo quen de disolver nitrocelulosa ou poli cloruro de vinilo (PVC), entre outros (4).

Grazas ás súas características, goza dunha boa aceptación no mercado farmacéutico, formando parte da elaboración de diversos medicamentos, sendo tamén a industria agrícola unha das saídas da ciclohexanona.

É polo tanto, un produto moi demandado e cun crecemento agardado moi favorable (4).

### 3.1.5. Análise de mercado da ciclohexanona

A tendencia mundial da ciclohexanona é indubidablemente crecente. Este feito susténtase principalmente no fortalecemento das medidas de protección individual para salvagardar a seguridade dos traballadores, isto é, un maior incremento na sofisticación de produtos feitos de fibras, como é o caso do nylon. Isto suporá sen dúbida algunha, un dos sustentos do crecemento agardado no mercado da ciclohexanona (5).

Como xa se comentou previamente, a ciclohexanona emprégase amplamente como disolvente orgánico, grazas á súa capacidade para disolver un gran abanico de compostos. Dado que tanto a súa volatilidade e toxicidade son baixas, é un composto que empregado de maneira global na industria da tinta de impresión e recubrimentos. Este sector prevé un aumento do seu volume de negocio, polo que pode ser un factor clave no aumento da demanda de ciclohexanona (4).

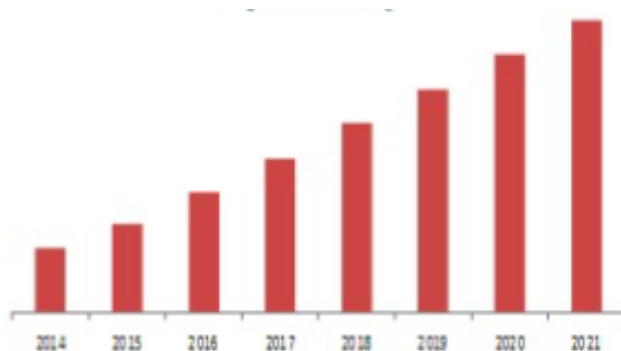


Figura 2. Crecemento estimado da ciclohexanona nos anos 2014-2021. Fonte: (6)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Na Figura 2 móstrase a tendencia descrita, resultando ser un produto, a ciclohexanona, con grandes posibilidades nos vindeiros anos.

Este crecemento estímase que será liderado pola rexión de Asia-Pacífico, ao contaren cun potencial de crecemento moi grande derivado da súa elevada capacidade de produción. Dentro desta rexión, China é o país que liderará este crecemento, logrando unha ampla cota de mercado. Así mesmo, as predicións apuntan a que Europa posuirá un cuarto da produción mundial de ciclohexanona (5).

En Europa, os países que se atopan á vangarda este crecemento, en termos de volume de mercado, serán Alemaña, Francia, Reino Unido e Italia. O caso de Alemaña cobra todo o sentido, dado que a ciclohexanona se emprega como disolvente orgánico na industria dos adhesivos, e estes últimos, na industria do automóbil (4).

Na Táboa 2, móstranse as compañías que lideran a produción de ciclohexanona a nivel mundial, segundo reflexa o estudo mercado elaborado polo gabinete de estudos mercadotécnicos *Global Market Insights* (4).

Táboa 2. Empresas que lideran o mercado da ciclohexanona. Fonte: (4)

COMPAÑÍA
Dow Chemicals
Gujarat State Fertilizers & Chemicals
Domo chemicals
Shreejij Chemicals
Fibrant
Jigchem Universal
Innova Corporate
Arihant chemicals

As exportacións de ciclohexanona a nivel mundial represéntanse de xeito gráfico na Figura 3, onde se pode apreciar un código de cores para situar aos países con maiores interaccións co citado composto (7).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

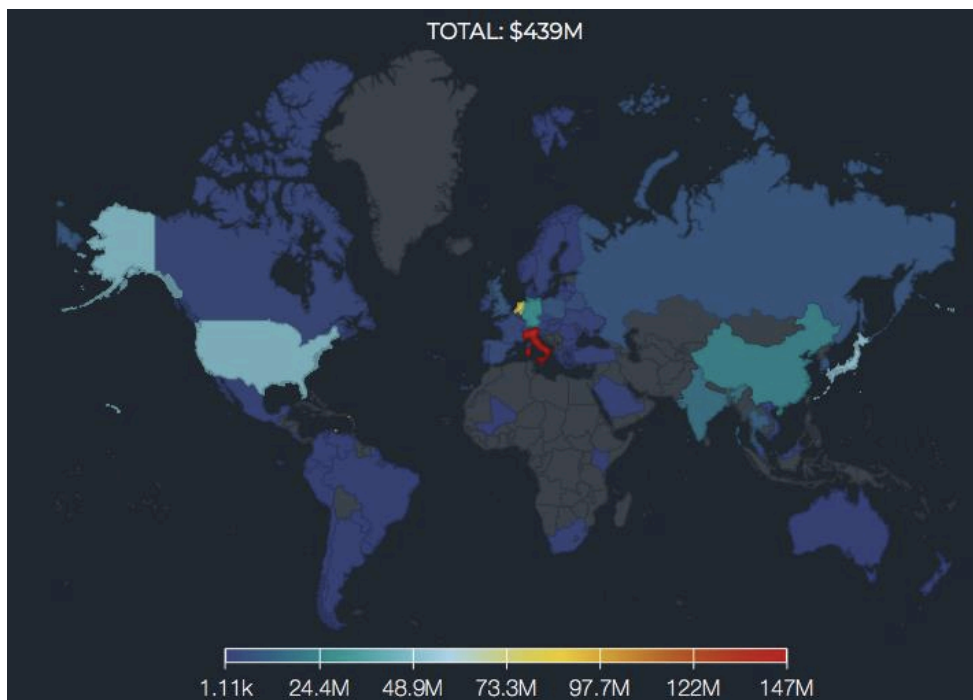


Figura 3. Mapa exportación mundial de ciclohexanona. Fonte: (8)

De igual xeito, na Figura 4, ilústrase un mapa mundial cos maiores importadores de ciclohexanona, de xeito que se poda visualizar cun código de cores os consumidores máis importantes, onde España ten un peso relevante.

Este feito susténtase na existencia dunha planta industrial de caprolactama, precursor necesario do nylon, sita en Castellón e pertencente ao grupo multinacional UBE. No ano 2018, pechou cunha facturación de 391 millóns de euros debido ao aumento da demanda do produto (9).

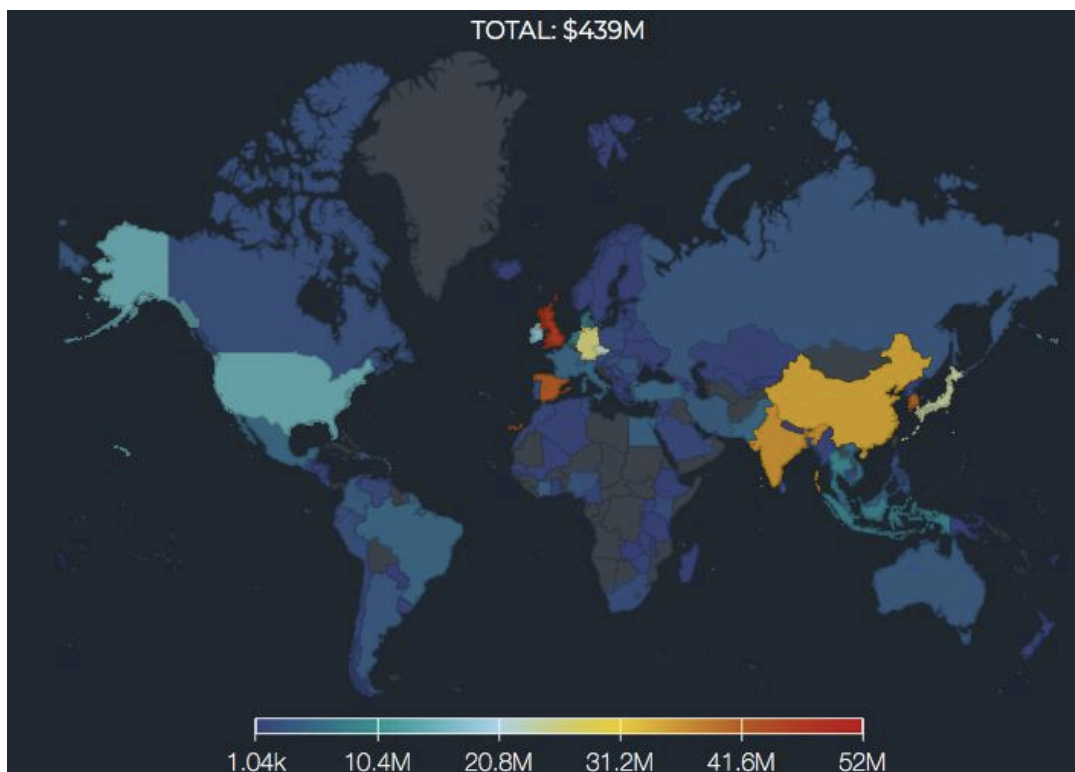


Figura 4. Mapa mundial de importación de ciclohexanona. Fonte: (10)

Cabe resaltar tamén a importancia que está a tomar a ruta de produción con fenol como materia prima, posto que reduce o custo para os fabricantes de caprolactama, segundo un artigo publicado polo ICIS, onde se afirma que Asia posúe a metade da produción mundial de fenol, logo da creación de cinco novas plantas en China (11). Proba disto é o aumento da petroquímica chinesa Jiangsu Weiming, aumentando a produción de ciclohexanona a 300.000 t/ano (12).

## 3.2. Subprodutos. Ciclohexanol

### 3.2.1. Introducción

O ciclohexanol [CAS 108-93-0] é un líquido incoloro soluble na gran maioría de líquidos con carácter orgánico. Asemade, pode derivar en efectos tóxicos se é inhalado ou entra en contacto coa pel en caso de exposición prolongada (13).

Aínda que no proceso que se describe no presente proxecto, o ciclohexanol non é un subproduto como tal, ao non saír do proceso e obter un rendemento económico do mesmo, si se produce e se emprega, como se describirá no apartado “descripción do proceso”, para producir máis ciclohexanona, produto desexado e sobre o que versa este traballo fin de

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

grao. Este feito proporciona gran versatilidade á planta industrial de produción de ciclohexanona, posto que se pode adaptar para a comercialización de ciclohexanol en caso de que as condicións do mercado así o soliciten. Isto levaríase a cabo mediante a redistribución do ciclohexanol de colas da columna de destilación a baleiro T-301, logrando así un ciclohexanol cunha pureza elevada.

### 3.2.2. Propiedades químicas

O ciclohexanol reacciona con alcohois secundarios, do mesmo xeito que é quen de esterificar a meirande parte ácidos orgánicos cos que entra en contacto (1).

Outra das características reactivas que definen ao ciclohexanol é que ten a capacidade de desprenderse de unha molécula de auga en presenza de ácido sulfúrico, dando lugar a ciclohexeno, en definitiva, deshidratarse (1).

Por último, a reacción que se quere destacar neste apartado é a deshidroxenación catalítica para dar lugar a ciclohexanona (1). Esta reacción que se levará a cabo no presente proxecto e que confire o gran interese deste proceso e supón o valor engadido á hora da súa elección neste proxecto.

### 3.2.3. Propiedades físicas e termodinámicas

Na táboa 3 móstranse as propiedades físicas e termodinámicas máis relevantes do ciclohexanol.

Táboa 3. Propiedades físicas e termodinámicas do ciclohexanol. Fonte: (1) (14)

Propiedade	Valor
Fórmula química	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O
Peso molecular (g/mol)	100,16
Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	941 (30°C)
Punto de fusión (°C)	25,4
Punto de ebulición (°C)	161,1
Punto flash (°C)	68
Índice de refracción (n <sub>D</sub> <sup>20</sup> )	1,4656
Viscosidade dinámica (mPa*s)	41,07 (30°C)
Entalpía de formación (kJ/mol)	-352
Calor de combustión (MJ/mol)	-3,722

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 3 continuación. Propiedades físicas e termodinámicas do ciclohexanol. Fonte: (1) (14)

Propiedade	Valor
Calor de fusión (kJ/mol)	1,501
Calor de vaporización (kJ/mol)	44,92
Calor específico (J/g)	1,811
Límite inferior de explosividade (%vol.)	1,5
Límite superior de explosividade (% vol.)	12
Temperatura de autoignición (°C)	300
Presión de vapor (kPa)	0,48 (35°C)
Solubilidade (g ol/100g auga)	3,6 (20°C)

### 3.2.4. Aplicacións industriais

A meirande parte do ciclohexanol empregado na industria destínase á fabricación de ácido adípico. Este mercado consume unha mestura de ciclohexanol e ciclohexanona chamado *KA oil* (1).

Asemade, o ciclohexanol atopa aplicacións tan comúns como poden ser as pinturas e tinturas ou mesmo a fabricación de produtos farmacéuticos, entre outras (1).

### 3.2.5. Mercado do ciclohexanol

Tal e como se ten descrito no apartado 3.2.4., a meirande parte da produción emprégase na industria do nylon, de maneira que corrobora as tendencias amosadas no apartado 3.1.5. cando se analizou o mercado da ciclohexanona.

Na Táboa 4 atópanse as principais empresas que xogan un papel fundamental a nivel global na produción de ciclohexanol.

Táboa 4. Principais empresas produtoras de ciclohexanol a escala global. Fonte: (15)

COMPAÑÍA
Gujarat State Fertilizers & Chemicals Ltd
Asahi Kasei Corporation
Ostchem
Domo Chemicals
Fibrant
Shreeji Chemical

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol



Figura 5. Mapa de exportacións de ciclohexanol. Fonte: (16)

Na Figura 5 móstrase o mapa de exportacións mundiais por países, onde queda patente a hexemonía nipoa (17).

En canto ao panorama de importacións, está liderado por Corea do Sur, seguido de Alemaña e Italia (17).

Como elemento de reforzo e consistencia dos datos presentados, a compañía xaponesa Asahi Kasei, nomeada na Táboa 4, aumenta a súa produción na planta sita na prefectura de Okayama (Xapón), logo do peche da factoría de Mizushima debido a unha continxencia de índole mecánica, que contaba cunha produción de 170.000 t/ano (18).

## 4. MATERIAS PRIMAS

### 4.1. Fenol

#### 4.1.1. Introducción

O fenol, [CAS: 108-95-2] data do ano 1834, cando foi descuberto a partir do carbón polo científico Runge, fixando o seu nome en ácido carbólico (19).

Trátase dun produto altamente tóxico, con danos no sistema xenético ou mesmo a órganos vitais ante a evidencia dunha exposición repetitiva (20).

Historicamente empregouse como antiséptico, ademais de como tinguidura ou mesmo como compoñente clave de explosivos, sendo exemplo do último, o ácido pícrico (21).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 4.1.2. Propiedades físicas e termodinámicas

Na Táboa 5 resáltanse as propiedades físicas e termodinámicas mais salientábeis do fenol.

Táboa 5. Propiedades físicas e termodinámicas do fenol. Fonte: (22) (23)

Propiedade	Valor
Fórmula química	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O
Peso molecular (g/mol)	94,11
Densidade (kg/m <sup>3</sup> )	1071 (20°C)
Punto de fusión (°C)	40,9
Punto de ebulición (°C)	181,9
Punto flash (°C)	81
Viscosidade dinámica (mPa*s)	3,437 (20°C)
Entalpía de formación (kJ/mol)	-165 (25°C)
Límite inferior de explosividade (%vol.)	3
Límite superior de explosividade (% vol.)	10
Temperatura de autoignición (°C)	595
Presión de vapor (kPa)	0,3 (50°C)
Solubilidade en auga (g/L)	82

### 4.1.3. Aplicacións industriais

Entre as súas aplicacións industriais, destaca como precursor de importantes compostos como o Bisfenol A, indubidábel aliado na obtención de pinturas e resinas epoxi, a caprolactama, imprescindible para fabricar nylon. Tamén ten a súa aplicación na obtención de ácido salicílico, do que deriva a aspirina. Asimesmo, outra das aplicacións coas que conta este composto químico é a produción de alquilfenóis, composto que se atopa nos deterxentes, entre outros (21).

### 4.1.4. Almacenamento, transporte, seguridade e saúde

O transporte adoita facerse en bidóns ou cisternas e recoméndase o seu almacenamento cumprindo a normativa aplicable. O material recomendado para este cometido é, segundo Cepsa, aceiro inoxidable 316 (22).

A manipulación de fenol conta cunha serie de medidas que se deben levar a cabo por tratarse dun produto perigoso. Entre outras, débese evitar o contacto cos ollos e pel.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Débese evitar a respiración do seu vapor ou néboa. Tal e como se pode ver na Táboa 5, trátase dun produto que ten límites superiores e inferiores de explosividade, debéndose manter, polo tanto, illado de fontes de calor, chispas ou calquera outra fonte de ignición, debendo sempre evitar que a concentración do mesmo en mestura co ar leve a situarse no rango que determinan os devanditos límites expostos. Como aspecto relevante, recoméndase manter o líquido entre 50-60°C (22).

### 4.1.5. Mercado do fenol

O mercado da exportación do fenol está liderado polo país teutón en Europa, seguido de Estados Unidos e Xapón (24). Trátase polo tanto dun mercado moi dinámico e activo de xeito global, feito importante ao tratarse dunha materia prima clave no proceso a tratar neste proxecto.

Nos derradeiros anos, véñse optimizando a tecnoloxía de produción de fenol, así como novos catalizadores e procesos para a súa fabricación (25).

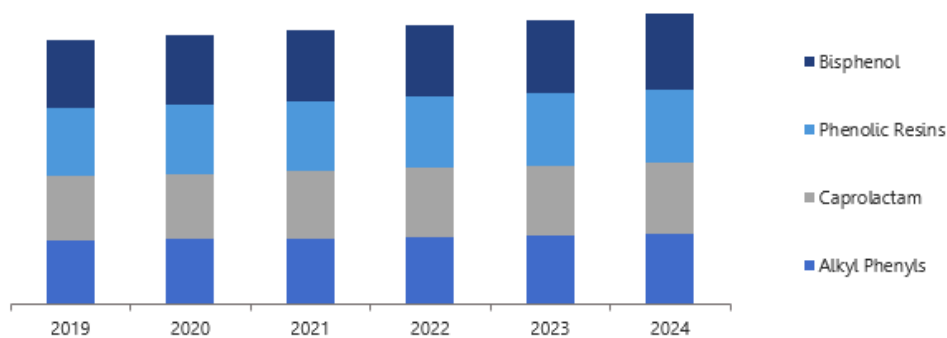


Figura 6. Consumo de fenol segundo a súa finalidade. Fonte: (25)

Na Figura 6, móstrase unha predición do uso de fenol para os vindeiros anos segundo a súa finalidade. Cabe resaltar que todas elas seguen un crecemento lineal, polo que consolidan o fenol como unha materia prima que se empregará no futuro e garante a súa disposición.

A rexión de Asia-Pacífico lidera o crecemento segundo apunta o gabinete de estudos de mercado Imar, destacado polo aumento de produción e consumo que sufriu China (25).

Existen multitude de grandes e pequenos fabricantes que compiten polo mercado do fenol, tanto en calidade como en prezo. Na Táboa 6, amósanse algúns dos máis relevantes (25).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 6. Principais compañías fabricantes de fenol. Fonte: (25)

Compañía
Ineos Phenol
Cepsa Química
Mitsui Chemicals
Formosa Chemicals and Fibers
Kumho P&B Chemicals

### 4.2. Hidróxeno

#### 4.2.1. Introducción

O hidróxeno [CAS 133-74-0] foi illado por primeira vez na segunda metade do século XVIII, por Boyle, logo de xuntar ácido sulfúrico diluído e ferro (26). É un gas incoloro altamente inflamábel. Como xa é ben coñecido, conta con dous isótopos, o deuterio e o tritio; sendo o primeiro deles estable (27).

É o elemento constitutivo do universo, contando cunha masa que se estima en aproximadamente un 75% (27).

#### 4.2.2. Propiedades físicas e termodinámicas

Na Táboa 7 móstranse as propiedades físicas e termodinámicas máis relevantes do hidróxeno.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 7. Propiedades físicas e termodinámicas do hidróxeno. Fonte: (26) (28)

Propiedade	Valor
Fórmula química	H <sub>2</sub>
Peso molecular (g/mol)	2,02
Densidade (g/L)	0,082
Punto de ebulición (°C)	-253
Calor específico (J*mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	24,60
Viscosidade dinámica (mPa*s)	1,11*10 <sup>-3</sup>
Conductividade térmica (Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )	16,5*10 <sup>-3</sup>
Factor de compresibilidade	0,906
Límite inferior de inflamabilidade (% vol.)	4
Límite superior de inflamabilidade (% vol.)	77

### 4.2.3. Obtención

Existen diversos procesos de obtención para o hidróxeno, tal e como se mostra na relación inferior obtida na bibliografía proposta por P. Häussinger (26):

- Reformado catalítico de hidrocarburos
- Electrólise
- Disociación termoquímica da auga
- A partir da conversión de metais
- A partir de amoníaco (reacción de equilibrio)
- A partir de metanol
- A partir de sulfuro de hidróxeno

Outra grande variedade de produtos contan con hidróxeno como subproduto nos seus procesos, tal e como se amosa na Figura 7.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

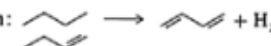
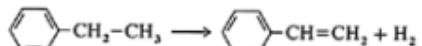
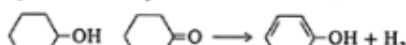
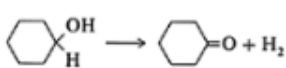
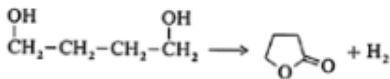
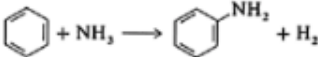
Reaction	Product	Process/Others
<b>Thermal and catalytic cracking</b>		
Hydrocarbons, e.g., $2\text{CH}_4 \xrightarrow{\Delta T} \text{C}_2\text{H}_2 + 3\text{H}_2$	acetylene	generally not used anymore. 57% $\text{H}_2$ in crackgas
Hydrocarbons, e.g., $\text{C}_2\text{H}_6 \xrightarrow{\Delta T} \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	ethylene	ethane cracking in ethylene plants
Reforming processes in refineries		
<b>Dehydrogenations</b>		
$\text{C}_4$ -fraction: 	butadiene	Dow process, Houdry process
$n$ -Paraffins $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_n\text{CH}_3 \longrightarrow \text{R}-\text{CH}=\text{CH}_2$	higher olefins	UOP process
	styrene	
cyclohexanol-cyclohexanone mixtures		
	phenol	partly commercially used
<b>Oxidations</b>		
$\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH} \longrightarrow \text{CH}_3-\overset{\text{O}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}} + \text{H}_2$	acetaldehyde	Carbide and Carbon Corp.
2-Propanol sec-Butanol $\longrightarrow \text{R}-\overset{\text{O}}{\text{C}}-\text{CH}_3 + \text{H}_2$	acetone methylethyl ketone	Standard Oil process IFP process
	cyclohexanone	step in caprolactam production
<b>Miscellaneous reactions</b>		
$2\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{OH} \longrightarrow \text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2$	butadiene	Lebedew.process, obsolete, of interest for developing countries
	butyrolactone	BASF process, use as solvent
	aniline	Du Pont, development state

Figura 7. Reaccións doutros procesos químicos nos que se obtén hidróxeno. Fonte: (26)

### 4.2.4. Aplicacións industriais

O hidróxeno emprégase de xeito moi amplo na industria, comunmente para reaccións de hidroxenación e tamén en procesos de redución. Na Figura 8 ponse de manifesto a gran aplicación que ten este gas na contorna da industria química. Como exemplo do emprego do hidróxeno actuado como axente redutor, atópanse as industrias de metais férricos e non férricos (26).

Ademais dos usos industriais máis comúns, como se veñen comentado, existe unha aplicación do hidróxeno, a menor escala, como é a súa inclusión en talleres de caldeirería e soldadura, para empregalo como axente de corte, onde o seu papel queda limitado a actuar como axente térmico.

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Reaction	Product	Process features	Uses
<b>Hydrogenation of unsaturated hydrocarbons and aromatics</b>			
	cyclohexane	middle pressure hydrogenation over Ni-/Pt-Li-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> catalyst in liquid phase (IFP, Mitsubishi) gas phase (UOP, DSM, Thoray, Houdry)	starting material for nylon production (cyclohexanone/ol, adipic acid, caprolactam), solvent
(analogous: cyclohexanol from phenol, cyclohexane carboxylic acid from benzoic acid)			
$CN-CH_2-CH=CH-CH_2-CN + H_2 \longrightarrow CN-(CH_2)_4-CN$	adiponitrile	Du Pont (300 °C), liquid phase hydrogenation 25–30 MPa/70–100 °C over Raney nickel	hexanediamine
$OH-CH_2-C\equiv C-CH_2OH + 2H_2 \longrightarrow OH-(CH_2)_4-OH$	butanediol	trickle bed, 20 MPa, 180–200 °C Ni catalyst with Cu-, Cr-promotors	polyesters, polyurethane-plasticizer component, solvent
	sulfolane	Shell process, 11 000 t/a	aromatics extraction solvents, sour gas, scrubbing agent
Selective hydrogenation as purification step during production of ethylene, propene, and butadiene			
<b>Further processing of oxo-products</b>			
$R-\overset{O}{\parallel}C-\overset{H}{\text{---}} + H_2 \longrightarrow R-CH_2OH$	oxo-alcohols	gas phase hydrogenation at 2–0.3 MPa/115 °C, Ni catalyst slump phase hydrogenation, 8 MPa/115 °C Ni catalyst	components for solvents, plasticizers, detergents
(analogous: ethylhexanol from ethylhexanal)			
$R-\overset{O}{\parallel}C-\overset{H}{\text{---}} + NH_3 + H_2 \longrightarrow R-CH_2-NH_2$	primary amines	hydrogenation (up to 30 MPa, 25–130 °C), Raney nickel catalyst	
<b>Hydrogenation of other ketones and aldehydes</b>			
Maleic acid $\longrightarrow$ butyrolactone $\longrightarrow$ $OH-(CH_2)_4-OH$	butanediol	Mitsubishi, Kao Ind. (Japan) process	
$CH_3OOC-\text{C}_6\text{H}_4-\text{COOCH}_3 \xrightarrow{Pd, Cu\ chromite} OH-CH_2-\text{C}_6\text{H}_4-CH_2-OH$	bis-(hydroxy-methyl)-cyclohexane	two step Eastman-Kodak process	

Figura 8. Reaccións de hidroxenación na industria química. Fonte: (26)

### 4.2.5. Mercado do hidróxeno

No ano 2016, o mercado industrial do hidróxeno tivo un volume de negocio de 13.555,50 M\$, esperando aumentar un 4,9% do CAGR (taxa de crecemento anual composto) entre os anos 2016-2024 (29).

Atendendo ao proceso produtivo, a electrólise é o que mostra un maior crecemento esperado para o período do análise de mercado indicado. O hidróxeno está chamado a ser a enerxía limpa do futuro, contando cun maior crecemento no sector da electrónica entre os anos 2016-2024 (29).

Na Figura 9 pode visualizarse a relevancia que ten este composto segundo os diferentes países que mostran interacción algunha co produto.

Estados Unidos lidera con claridade o mercado mundial, onde destaca tamén a implicación dos países orientais, relegando non sen a correspondente importancia, á delimitación teutoa o dominio do continente europeo.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

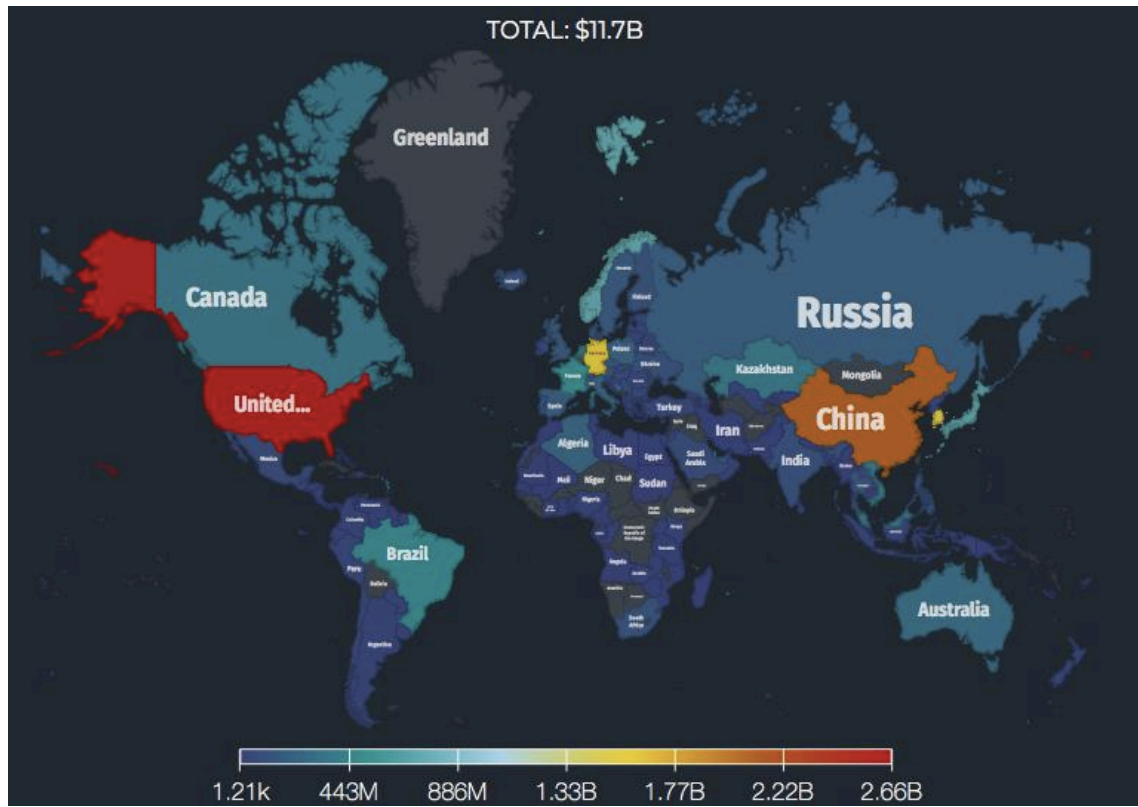


Figura 9. Mapa mundial das exportacións de hidróxeno. Fonte: (31)



## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Os catalizadores máis empregados adoitan ser de níquel, coa adición ou non de cobre, cobalto ou mesmo manganeso. O soporte co que conta o catalizador empregado, conta coa opción de ser de alúmina (1).

Na Figura 12 móstrase o diagrama de bloques que adoitaría ter esta alternativa de produción.

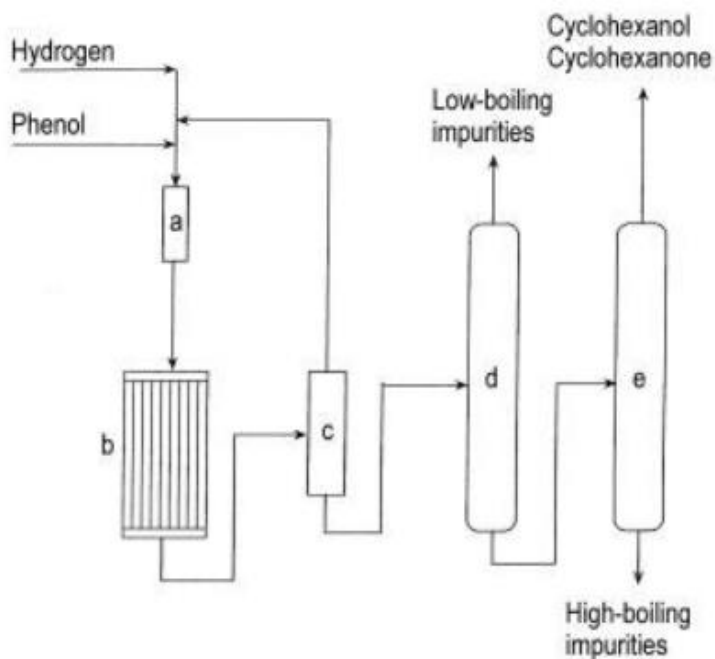


Figura 12. Diagrama de bloques da hidroxenación do fenol en fase vapor. Lenda: a) vaporizador, b) reactor de hidroxenación, c) condensador, d) columna destilación de lixeiros, e) columna destilación ONA/OL. Fonte: (1)

Na actualidade existe de xeito comercial a hidroxenación en fase líquida, co fin de alcanzar unha mellora enerxética global, ao estar sometido o proceso a condicións máis liviáns que a vía en fase gasosa. As eficiencias alcanzadas cun catalizador de paladio ou carbón, son próximas ao 99% cunha conversión do 90% (1).

Sen embargo, tal e como se pon de manifesto no estudo de Zhou H. et al, a obtención de condicións máis suaves continúa a ser un reto pendente (34).

### 5.2. Oxidación en fase líquida do ciclohexano

Este proceso lévase a cabo desde os anos corenta, ben de xeito catalizado ou non catalizado. As condicións de operación máis comúns son entre 140-180 °C de temperatura e 0,2-2,0 MPa de presión, estando comprendido o tempo de residencia entre quince minutos e unha hora (1).

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Na primeira das reaccións fórmase ciclohexil hidroperóxido, sendo este oxidado en segundo termo para dar lugar a ciclohexanol, ciclohexanona e outros subprodutos. Nestas reaccións pode conseguirse a variación do ratio existente entre ol e ona, coa selección do catalizador. No artigo exposto por Musser, M. Destácase que o catalizador de cobalto comunmente empregado, arroxa un ratio de ciclohexanol a ciclohexanona de aproximadamente 3,5 (1).

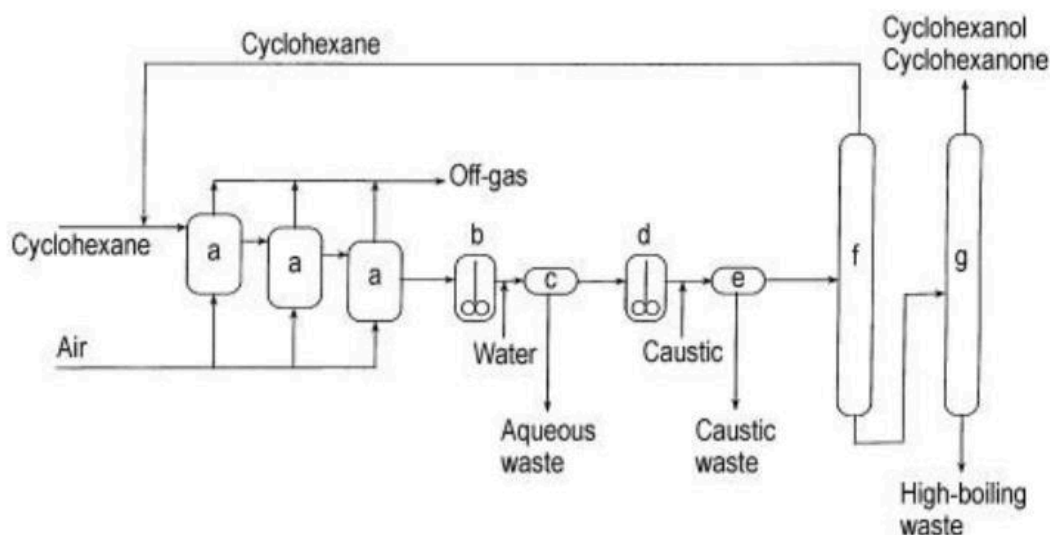
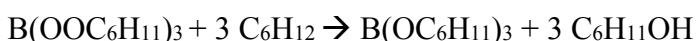
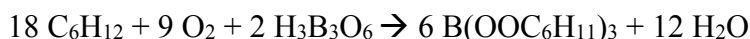


Figura 13. Diagrama de bloques do proceso de obtención de ciclohexanona/ciclohexanol por oxidación do ciclohexano en fase líquida. Lenda: a) oxidadores, b) aclarador/lavado, c) decantador, d) reactor de descomposición, e) decantador, f) columna de recuperación de ciclohexano, g) columna de recuperación de onaxanol. Fonte: (1)

### 5.3. Oxidación do ciclohexano modificado con ácido bórico

Unha alternativa para a produción de ciclohexanona e ciclohexanol parte da premisa da adición de ácido bórico anhidro, de xeito que se pode conseguir o éster ciclohexil perborato. O devandito perborato ponse en contacto con máis ciclohexano para dar outro éster de borato e máis ciclohexanol (1).

Segundo o estudo publicado por Musser, M. as reaccións que teñen lugar son (1):



## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

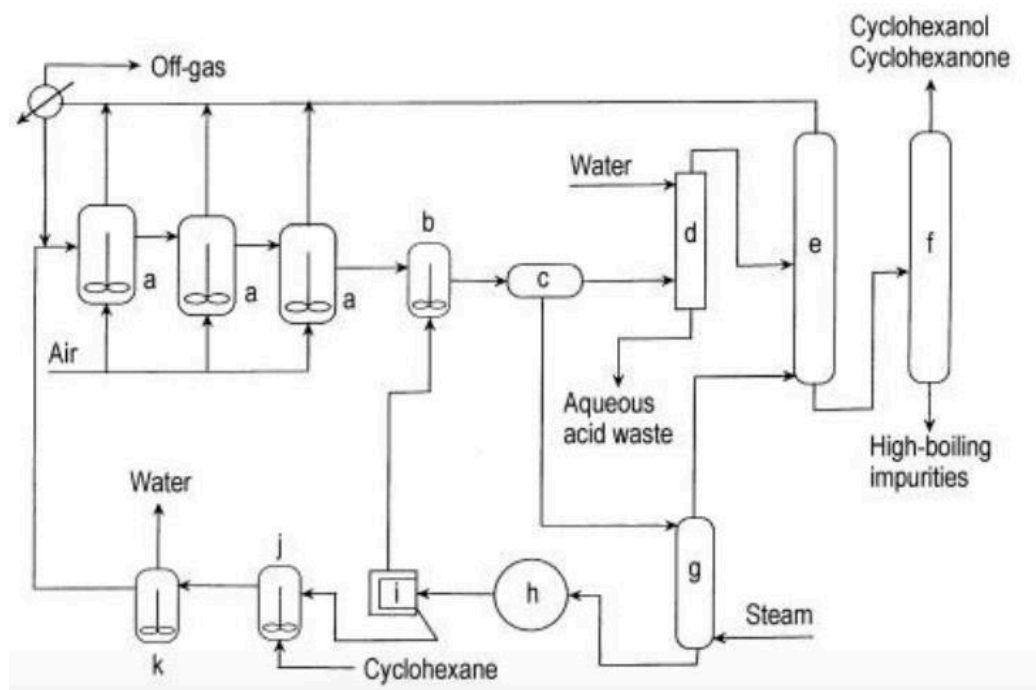


Figura 14. Diagrama de bloques do proceso de oxidación do ciclohexano modificado con ácido bórico. Lenda: a) oxidadores, b) tanque de hidrólisis, c) decantador, d) columna de extracción, e) columna de recuperación de ciclohexano, f) columna de refinamento, g) columna de stripping, h) cristalizador a baleiro, i) centrifugador de ácido bórico, j) tanque de lodos de ácido bórico, k) deshidratador. Fonte: (1)

### 5.4. Deshidroxenación do ciclohexanol

Este proceso é altamente interesante e constitúe unha das razóns para ter escollido o presente traballo fin de grao. O ciclohexanol e a ciclohexanona forman un equilibrio, de maneira que se pode deshidroxenar cataliticamente para obter o produto desexado.

A reacción debe levarse a cabo a temperaturas da orde dos 300 °C, empregando un catalizador con base ZnO, co cal se alcanzan conversións de ata un 85% de ciclohexanol (33).

Na Figura 15, móstrase un diagrama de bloques do proceso de deshidroxenación catalítica do ciclohexanol, coa posterior etapa de separación, reciclando as colas da columna de destilación a baleiro ao reactor para converter máis ciclohexanona. Isto confire unha versatilidade moi grande á planta, debido a que se pode decidir reciclar a corrente na súa totalidade, ou unicamente en parte, en función das necesidades do mercado en cada momento.

Asemade, o reciclado da corrente de colas permite optimizar a produción de ciclohexanona e a súa separación na columna, reducindo os costes totais de ambos equipos e agregando valor engadido ao proceso. Esta corrente móstrase cunha liña descontinua na Figura 16.

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

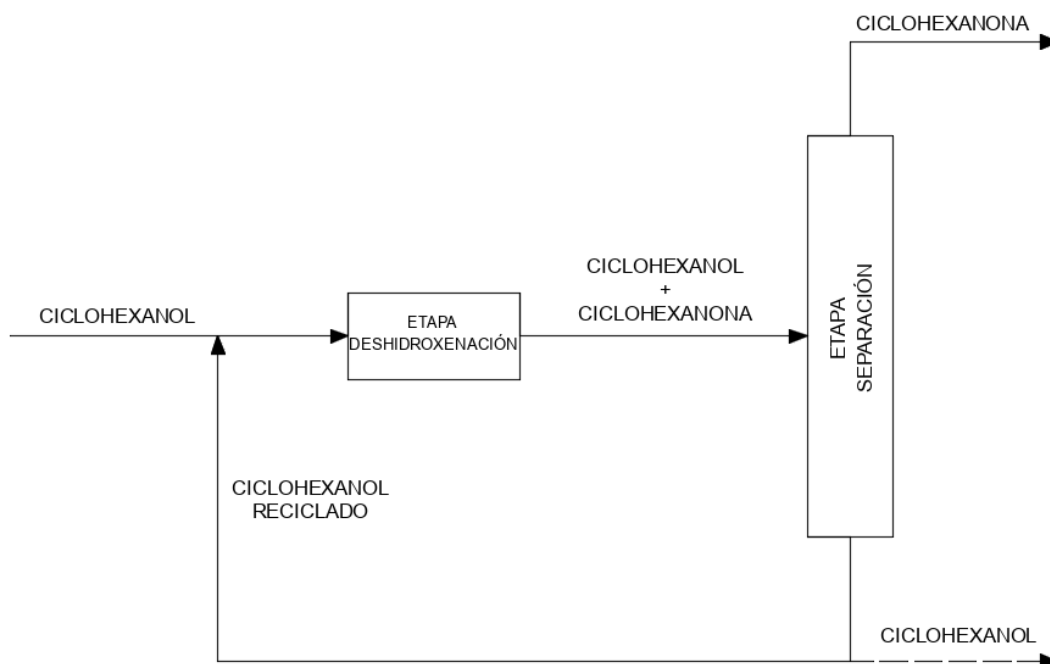


Figura 15. Diagrama de bloques do proceso de deshidroxenación do fenol. Fonte: elaboración propia en AutoCAD

## 6. EMPRAZAMENTO E LOCALIZACIÓN

En canto a elección da localización deben estudarse diversos aspectos que liderarán a decisión en termos de elección do emprazamento e situación da planta industrial obxecto do deseño (35).

- Disponibilidade de materias primas, utilidades e enerxía eléctrica. Este factor tamén se trata no apartado de “Viabilidade Técnica” do presente Documento I. Memoria.
- Disponibilidade de acceso ás liñas de transporte marítimo e terrestre.
- Estimación do espazo requirido para a implantación, tanto da batería de proceso, como de edificacións funcionais e auxiliares.
- Situación xeográfica, social e política. Convén que haxa estabilidade, posto que a situación contraria non aportaría seguridade ao proxecto.
- Disponibilidade de plantas de tratamento de residuos e augas residuais industriais, no caso de ser necesario o tratamento externo.
- Avaliación da dispoñibilidade de man de obra cualificada. Este factor é de vital importancia e que moitas veces pasa desapercibido, pero patente está que sen o

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

capital humano necesario non se pode poñer en funcionamento unha planta industrial.

- Imposicións marcadas pola lexislación ambiental, disposicións urbanísticas, etc., que se atopen viventes na área xeográfica obxecto da implantación.
- Acondicionamento das vías, sinalización e necesidades de moi diversa índole como poden ser a cobertura telefónica, conexión a internet, entre outras.

### 6.1. Selección da localización

Tendo en conta a dispoñibilidade das materias primas, a proximidade á planta química de CEPSA en Palos de la Frontera vólvese un factor crítico debido a que resulta ser a única planta que produce fenol en España.

O polígono industrial Nuevo Puerto é o escollido. Está situado no municipio onubense de Palos de la Frontera. A primeira actividade comeza no 1975 ca creación da Asociación Sindical de Industrias para la Protección del Medio Ambiente (ASIMA). Ó longo dos anos a asociación creceu abarcando produción industrial e enerxética polo que , para o ano 2012 o seu nome mudou a Asociación de Industria Química, Básica e Enerxética (AIQBE) (36).

Consta de 15 empresas que pertencen á AIQBE, dentro das cales destacan (37):

- Cepsa ten unha planta química e unha refinaría
- Repsol que actúa como almacenamento e distribución de gas butano e propano.
- Produtoras e proveedoras de enerxía eléctrica como Ence, Endesa e Naturgy.

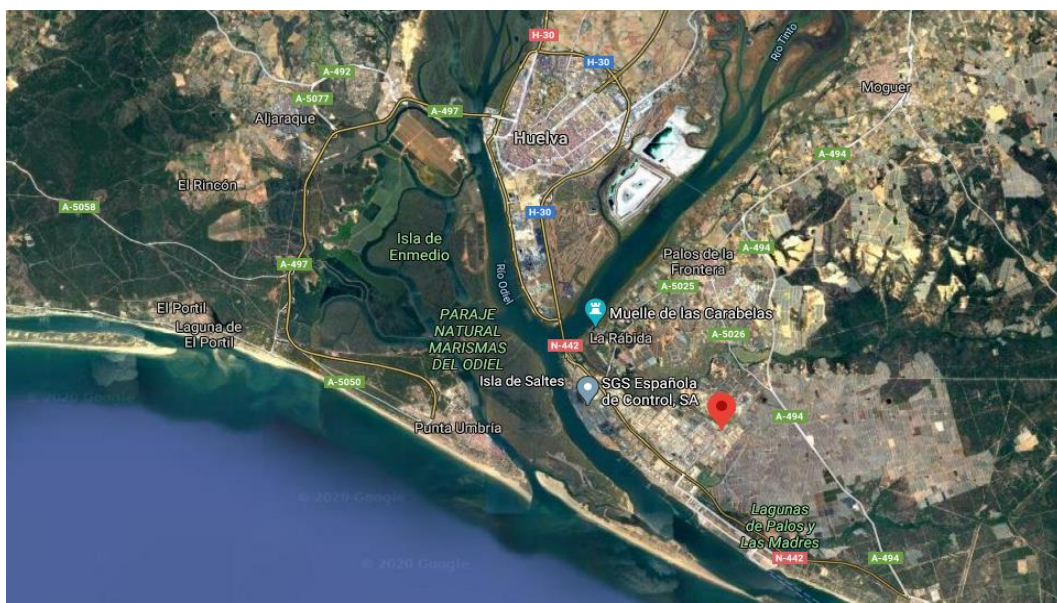


Figura 16. Localización xeográfica do polígono Nuevo Puerto. Fonte: Google Maps

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

A súa situación xeográfica é totalmente privilexiada. O polígono atópase a 7,3 km da localidade Palos de la Frontera e a 15,9 km da cidade de Huelva. Está rodeado por dúas zonas declaradas paraxes naturais como son Doñana, ó leste, e as Marismas de Odiel ó oeste. O acceso ó polígono está permitido polas estradas N-442 e A-494. Así mesmo, conta cunha terminal marítima (peirao sur) que forma parte do Porto de Huelva.

A conexión terrestre cas principais cidades da rexión máis próximas como son Sevilla (101 km) e Cádiz (220 km) mediante as estradas A-49 e AP-4 ,respectivamente. Por outra banda, a fronteira con Portugal atópase a 85,5 km pola A-49.

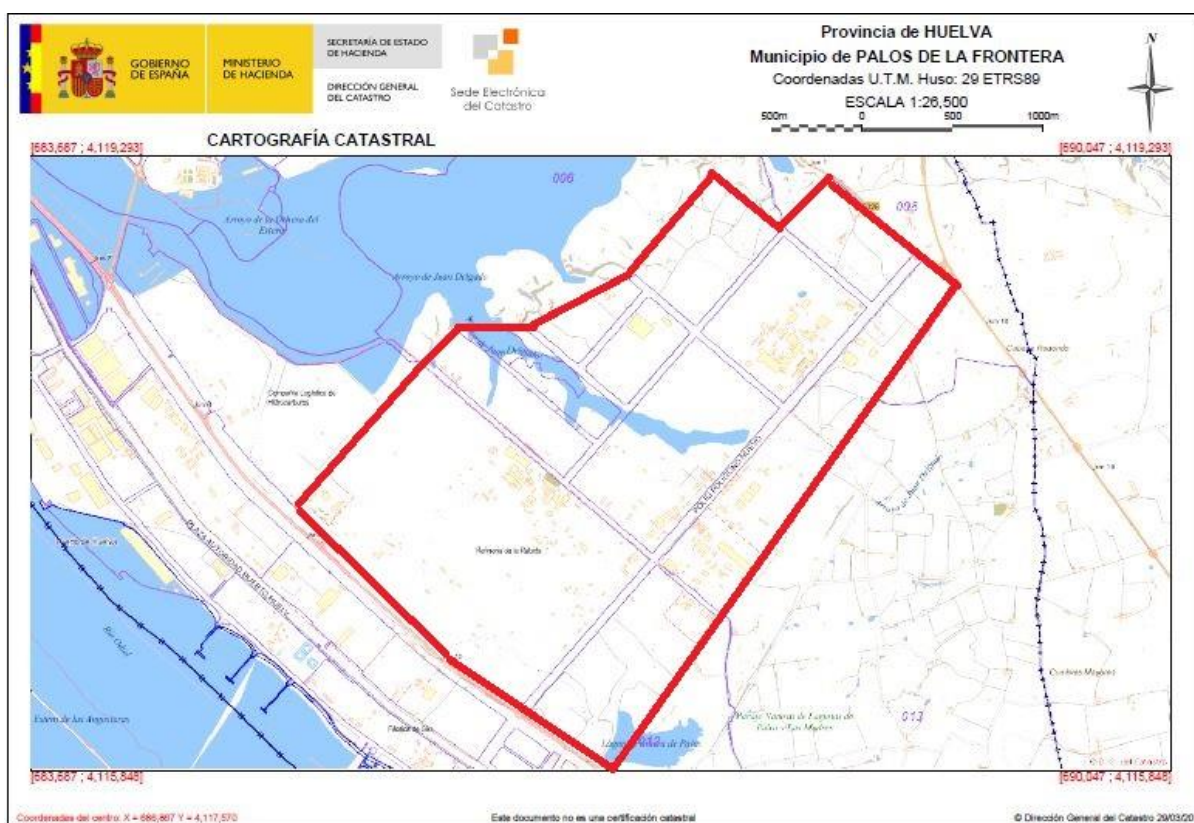


Figura 17. Extensión do polígono industrial Nuevo Puerto. Fonte: (38)

### 6.2. Selección da parcela

A localización da parcela dentro do polígono está condicionada en primeiro lugar ó espazo requirido, é dicir, é precisa unha extensión suficiente para situar todos os elementos estruturais da planta. En segundo lugar, elíxese unha parcela que se atope o máis preto posible da planta de Cepsa Química para facilitar o abastecemento da materia prima principal, fenol.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Na Figura 18 móstrase a situación das parcelas destinadas á construción da planta.

Estímase un espazo necesario para a implantación de 56.259,00 m<sup>2</sup>.

A comprensión da planta estenderase ao longo das parcelas 12, 13 e 14, tal e como se reflicte na Figura 18.



Figura 18. Localización das parcelas dentro do polígono. Fonte: (38)

A man de obra quedaría totalmente satisfeita, debido á dispoñibilidade de titulados da Universidade de Huelva, no seu campus de La Rábida, onde está sita a Escola Técnica Superior de Enxeñaría, contando con titulacións como enxeñaría química e outras ramas industriais. A universidade de Sevilla tamén conta con este tipo de titulacións, polo que a carteira de egresados cualificados satisfaría plenamente as necesidades da planta, así como o seu abastecemento.

### 6.3. Estudo do clima

A Axencia Española de Meteoroloxía (AEMET) aporta datos meteorolóxicos da súa base de datos históricos dende o ano 1981 ata o ano 2010. Os datos pertencen á estación AEMET en Ronda Este de Huelva situada a 16 km do Polígono e ofrecen os valores normais climatolóxicos.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 8. Datos meteorolóxicos da estación sita en Huelva, Ronda Leste. Fonte: (39)

Mes	T	Tmax	Tmin	R	H	DR	DN	DT	DF	DH	DD	I
<b>Xaneiro</b>	11.0	16.2	5.9	71	77	7.1	0.0	0.6	1.4	0.9	-	165
<b>Febreiro</b>	12.4	17.8	7.0	50	74	5.5	0.0	0.5	2.3	0.3	-	171
<b>Marzo</b>	14.7	20.7	8.8	38	68	4.3	0.0	0.7	1.6	0.0	-	229
<b>Abril</b>	16.1	22.0	10.3	48	65	6.0	0.0	1.0	0.5	0.0	-	255
<b>Maiο</b>	19.2	25.2	13.2	29	62	3.8	0.0	0.8	0.7	0.0	-	296
<b>Xuño</b>	22.8	29.0	16.6	8	57	1.1	0.0	0.1	0.1	0.0	-	341
<b>Xullo</b>	25.8	32.7	18.9	3	51	0.2	0.0	0.2	0.1	0.0	-	366
<b>Agosto</b>	25.8	32.4	19.1	4	55	0.4	0.0	0.3	0.2	0.0	-	340
<b>Setembro</b>	23.4	29.4	17.3	26	61	2.4	0.0	0.6	1.1	0.0	-	268
<b>Outubro</b>	19.5	24.9	14.1	68	69	6.4	0.0	1.0	1.3	0.0	-	211
<b>Novembro</b>	14.9	20.0	9.8	79	73	6.3	0.0	0.9	0.9	0.0	-	176
<b>Decembro</b>	12.3	16.9	7.6	99	78	7.9	0.0	1.4	1.9	0.5	-	151
<b>Anual</b>	18.2	23.9	12.4	525	66	51.5	0.0	7.8	12.3	1.8	-	-

Sendo, T : temperatura media mensual / anual

Tmax: temperatura máxima media mensual / anual

Tmin: temperatura mínima media mensual / anal

R: precipitación media mensual / anual

H: humidade relativa media (%)

DR: número medio de días de precipitación  $\geq 1$ mm / anual

DN: número medio de días de neve / anual

DT: número medio de días de tormenta / anual

DF: número medio de días de néboa / anual

DH: número medio de días de xeadas / anual

DD: número medio de días de días despexados / anual

I: número medio de horas de sol / anual

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

No referido á información do vento, dada a proximidade do emprazamento co mar, resulta un factor moi interesante a ter en conta. A estación da AEMET situada en Huelva, Ronda Este reflexa estes datos na Figura 19.

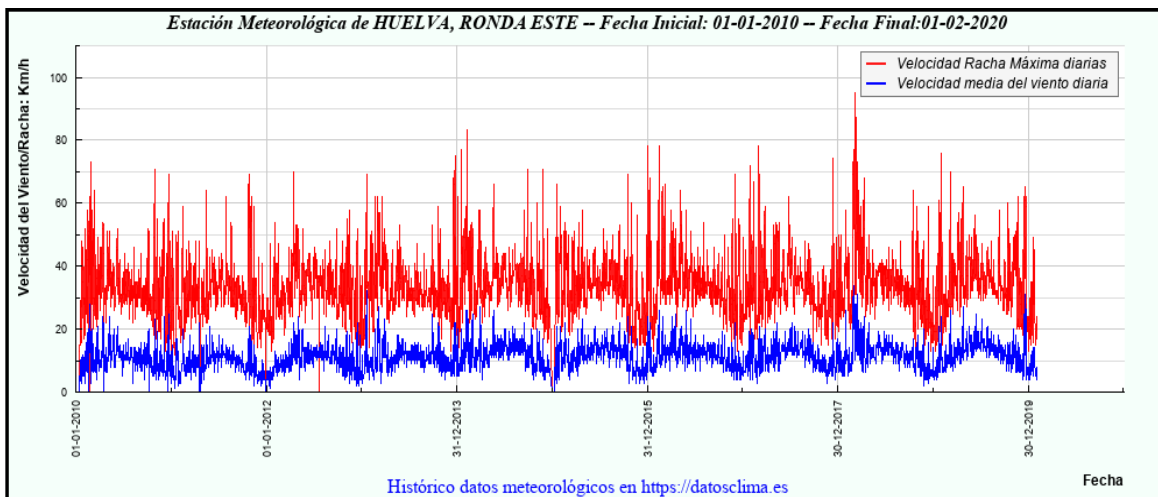


Figura 19. Datos de vento rexistrados desde Xaneiro 2010 a Febreiro 2020. Fonte: (40)

O refacho mas alto rexistrouse o 5 de marzo de 2018 cun valor de 95,04 km/h sendo a velocidade media neste período de 33,84 km/h (40).

#### 6.4. Datos de sismicidade

Un aspecto a considerar é a perigosidade sísmica nas proximidades da planta xa que deriva en problemas de seguridade gran consideración, podendo afectar a elementos estruturais ou persoais, aínda se o movemento non é forte. A Figura 20 amosa as zonas con maior perigosidade sísmica en España que se representan en cores avermelladas.

O mapa ilustrado na Figura 20 revela que a zona sur do país, na que se localiza a planta de produción de ciclohexanona, concentra a maior actividade sísmica. Esta actividade é mais significativa nas areas preto das cidades de Granada e Murcia. Sen embargo, na provincia de Huelva, rexístranse uns valores máis moderados. Por este motivo, non se clasifica como unha zona de risco principal mais débense valorar medidas de protección en materia de seguridade.

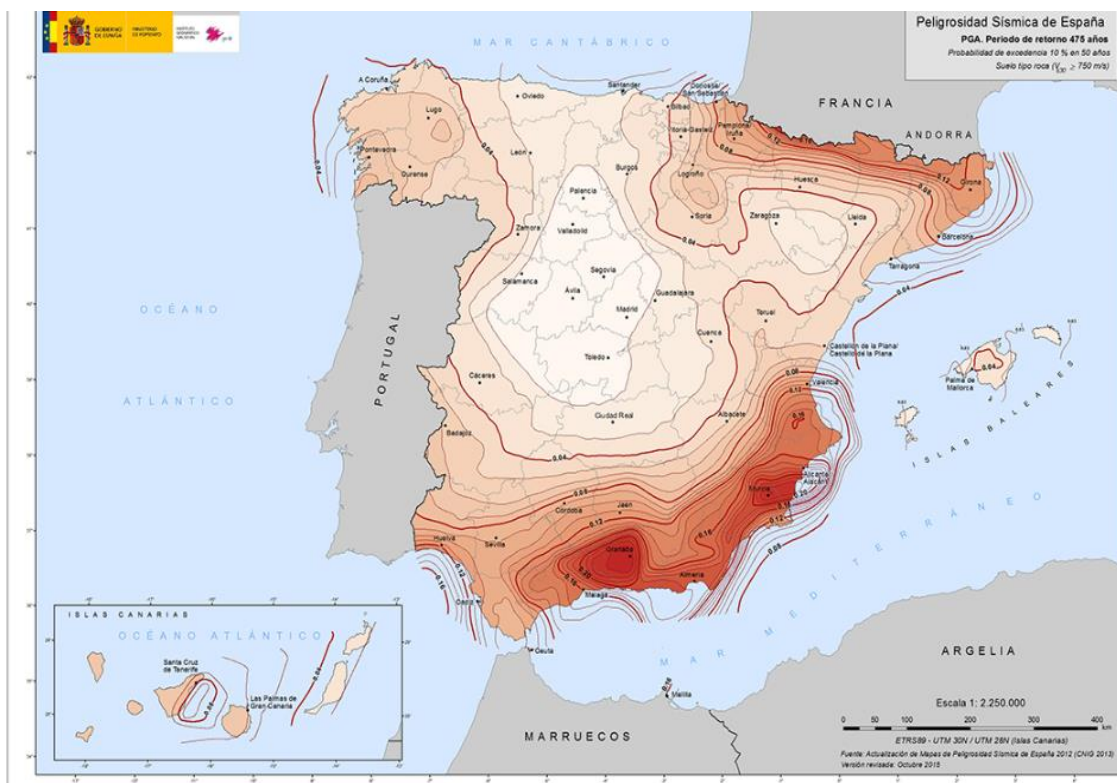


Figura 20. Mapa de perigosidade sísmica en España no 2015 en valores de aceleración. Fonte: (41)

## 7. XUSTIFICACIÓN DA ALTERNATIVA, PROCESO, TECNOLOXÍA, MATERIA PRIMA E CATALIZADOR

Para a elección da alternativa e por tanto, do proceso, téñense en conta diversos factores que se expoñen a continuación.

Os procesos máis empregados comercialmente son a partir do ciclohexano tamén a partir do fenol, descartando a alternativa do ciclohexeno debido á dificultade intrínseca dentro da consecución do seu proceso.

Para materializar a derradeira alternativa, precísanse sucesivas etapas de destilación extractiva, ademais, a conversión podería verse restrinxida ata un 14% (1). Ademais, este proceso ten como produto o ciclohexanol, e a partir del habería que obter a ciclohexanona, polo que a inversión en equipos é elevada e quedaría descartada.

Centrándose nas alternativas viables que a industria comprende, a produción de ciclohexanona a partir de ciclohexano, trátase dun proceso máis complexo, cun maior número de equipos dentro do mesmo e como engadido, trabállase con aire, contendo

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

nitróxeno como inerte, o cal aumenta o volume dos equipos. Sen embargo, os inertes presentes no proceso constitúen unha valiosa ferramenta para diluír mesturas e controlar o porcentaxe da mesma en aire, para estar ben por enriba ou ben por debaixo dos límites superior e inferior de inflamabilidade, respectivamente.

Logo de facer un estudo preliminar, estendido no apartado 8.5. aínda pese a ser un proceso rendíbel, non o é tanto como a hidroxenación a partir de fenol.

A alternativa seleccionada en canto á materia prima é, polo tanto, a hidroxenación do fenol, baseada en varios argumentos que levaron a tomar tal decisión.

En primeiro lugar cabe destacar a perigosidade asociada ao fenol, ao tratarse dun produto químico moi nocivo, podendo causar efectos graves sobre a saúde, irritación da pel, queimaduras ou mesmo sensibilización ao prolongarse a exposición ao mesmo (42).

Unha das conclusións obtidas a partir do estudo de mercado é o gran volume que posúe o fenol no mercado mundial, que ao tratarse dun produto das súas características, sería moi positivo reducir a cantidade do mesmo empregándoo para producir compoñentes con alto valor engadido, como a ciclohexanona.

En segundo lugar, tocando o relativo ao proceso, é posible eliminar a totalidade do fenol conseguindo unha conversión completa no reactor, empregando as condicións do estudo capitaneado na bibliografía de A. Dimian e C. Sorin. (33). Este feito sumado á gran versatilidade da planta, fan que sexa unha solución de gran valor engadido.

Este proceso pode levarse a cabo en fase líquida ou gasosa, pero dado que a primeira das opcións nomeadas supón aínda un reto para a industria en canto a rendementos globais, óptase pola fase gasosa como alternativa escollida no presente proxecto (1).

A versatilidade da planta radica na reversión do ciclohexanol formado no reactor R-201 a ciclohexanona, aumentando a produción e optimizando o proceso. Ademais, coa consciencia da volatilidade do presente mercado industrial, a sección 300 permite un redeseño para poder comercializar ciclohexanol no caso de que a demanda así o requira. Deste xeito, produciríase unha menor cantidade de ciclohexanona e procederíase á venda de ciclohexanol, mentres goce dun valor monetario que conveña segundo cada momento da vida de operación da factoría.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O proceso seleccionado no presente traballo fin de grao baséase na hidroxenación catalítica do fenol, cuxa temperatura de reacción ascende a 180 °C, evitando a formación de subprodutos como benceno, para nada desexado na corrente de saída (corrente 8) cunha posterior separación do hidróxeno non reaccionado nun condensador parcial, onde se separa totalmente.

Por último, o catalizador goza de gran importancia dentro de cada proceso industrial, posto que é o axente determinante para a viabilidade económica da planta.

A súa elección debe basearse en feitos tanxibles que permitan optimizar globalmente o proceso. Así, por exemplo, un catalizador que se contamine con certas impurezas pode supoñer o fin da operación rendible.

Sen dúbida en todo proceso, o custo xoga un papel fundamental e ineludíbel, así como a súa desactivación co tempo, establecendo un elemento decisorio na súa coidadosa selección.

Atendendo a isto, o catalizador escollido é de platino soportado en xel de sílice. A meirande parte dos catalizadores empregados nos procesos industriais son metais preciosos, facendo uso de diversos tipos de soporte, amplamente estudados. Non obstante, para conseguir as condicións desexadas e converter a totalidade do fenol no reactor, ademais dos parámetros de presión e temperatura, emprégase o catalizador citado, pois as investigacións que conforman a base deste proxecto así o estiman, facilitando as cinéticas oportunas que se tiveron en conta para realizar o deseño do reactor no anexo I parte I do presente Documento I. Memoria (33).

A sección de separación que inclúe á torre T-301 emprega un baleiro de 26,66 kPa para adaptarse aos datos dispoñibles en bibliografía (43), co engadido de que se trata dun valor onde a separación se realiza con garantías e non resulta demasiado baixo de maneira que a caída de presión en cada prato tería unha diferenza relativa con respecto ao parámetro de presión de operación na columna moi elevado. Isto é, nunha operación a 4 kPa, unha caída de presión de 1 kPa por prato suporía un 25 %, valor un tanto elevado que empeoraría a separación.

## 8. ESTUDO DE VIABILIDADE TÉCNICA

Dentro deste apartado analízanse aspectos como a dispoñibilidade de materia prima, imprescindible para que o proceso se materialice, así como a venda de produtos. Ambos aspectos semellan obvios, posto que se non hai materia prima garantida ou se non se dispón dun mercado onde introducir o produto, o proceso non prosperaría.

Non obstante, tamén hai outros factores que teñen unha importancia directa, como a dispoñibilidade de utilidades ou tecnoloxía.

### 8.1. Dispoñibilidade de materias primas

O proceso consta de dúas materias primas fundamentais. O fenol e o hidróxeno.

En España, a maior produtora de fenol, e segunda a nivel mundial, é Cepsa. Dita planta química sitúase en Palos de la Frontera, provincia de Huelva, que actualmente dispón dunha capacidade de 600.000 toneladas anuais de fenol. O fenol producido axústase ás necesidades do proceso en canto a capacidade e pureza, xa que a ficha técnica proporcionada por Cepsa reflexa unha alta pureza. Cabe destacar que CEPSA integra a súa actividade de refino de La Rábida, de onde obtén as principais materias primas para a produción de petroquímicos nos que ademais de fenol, destaca a obtención de un millón de toneladas anuais de cumeno converténdose na maior produtora mundial. Outros produtos obtidos son acetona e  $\alpha$ -metil-estireno (44).

En relación ao hidróxeno, a súa dispoñibilidade non presenta dificultades xa que en España atópanse tres distribuidoras principais como son Carbueros Metálicos, Linde Group ou Air Liquide. Calquera das tres empresas mencionadas proporcionan un subministro de distintos gases para industria dentro do territorio peninsular, entre eles hidróxeno. Dispoñen de anos de experiencia e tecnoloxía tanto para a produción dos gases como para a instalación e distribución en planta (45) (46) (47).

### 8.2. Venda de produtos

Outro dos aspectos fundamentais a destacar dentro da viabilidade técnica é a cabida no mercado do produto, a ciclohexanona.

En España, o grupo multinacional nipón, UBE, está presenta en Castellón, produtora de caprolactama e nylon 6 para uso téxtil, conta cun consolidación madura e sólida no territorio, contando cun crecemento pronunciado nos últimos anos (9).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Na actualidade conta cunha produción de setenta mil toneladas ao ano de nylon 6, a partir do cal este grupo elabora unha variedade importante de produtos de química fina (48).

Tal e como se analizou no estudo de mercado da presente memoria, apartado 3.1.5., entre os maiores importadores de ciclohexanona atópanse unha notoria cantidade de países europeos. O devandito feito fará que a cabida do produto fabricado no mercado sexa moi interesante e competitiva, non unicamente pola presenza do grupo UBE en Castellón, senón pola gran demanda nos países do entorno. Sen dúbida algunha trátase dun compoñente cunha demanda moi consolidada no mercado e as previsións son moi alentadoras.

### 8.3. Dispoñibilidade de utilidades

Na produción de ciclohexanona precísanse certas utilidades para levar a cabo o proceso. Entre elas, atópanse as que se mostran na Táboa 9 coas particularidades de presión e temperatura das mesmas segundo o manual de enxeñaría proposta por R. Turton (49).

Táboa 9. Características das correntes de utilidades. Fonte: (49)

Utilidade	Significado	Características
lps	vapor de baixa presión	3-5 bar <sub>g</sub> (saturado)
mps	vapor de media presión	10-15 bar <sub>g</sub> (saturado)
hps	vapor de alta presión	40-50 bar <sub>g</sub> (saturado)
htm	fluído térmico calefactor	Reactor R-301
cw	auga de arrefriamento	30°C cunha $\Delta T = 15^\circ\text{C}$
rw	auga de refrixeración	5°C cunha $\Delta T = 10^\circ\text{C}$

Ao tratarse dun complexo industrial o lugar escollido para situar a planta obxecto deste TFG, este tipo de prestacións no relativo a utilidades, enténdense satisfeitas estas necesidades, salvo a disposición dun circuíto cerrado de fluído térmico, cuxa responsabilidade será da planta de produción de ciclohexanona. Así mesmo, a enerxía eléctrica necesaria será garantida e proporcionada pola xestión da parcela industrial, onde se dispón de varios transformadores para a adaptación do subministro de alta tensión a media e baixa tensión para a utilización nos diversos equipos industriais que así a precisen.

#### 8.4. Disponibilidade de equipos e de tecnoloxía

A tecnoloxía seleccionada é a hidroxenación catalítica en fase gas do fenol. Trátase dun proceso amplamente empregado a nivel mundial dende hai máis de 60 anos, polo que o seu estudo está totalmente aceptado e así o pon de manifesto a actual produción de ciclohexanona a partires desta tecnoloxía.

A operación ás características escollidas no reactor R-201 fan que a totalidade do fenol se converta (33), coa gran vantaxe de evitar a formación de azeótropos do mesmo co ciclohexanol e a ciclohexanona formadas durante a reacción no devandito equipo.

Por outra banda, a existencia de ciclohexanol levou aos autores deste proxecto a aportar unha adición dun segundo reactor, o R-301, para reverter o ciclohexanol para producir máis ciclohexanona, produto desexado, a partir da deshidroxenación catalítica do reactivo.

Para levar a cabo o proceso, os equipos necesarios son moi comúns e amplamente comercializados industrialmente. Exemplo disto son: bombas, compresores, mesturadores, columnas de destilación de pratos, reactores de leito fixo de carcasa e tubos, entre outros. Todo isto pode visualizarse no plano #3 do diagrama de fluxo no Documento II: Planos.

Na actualidade, a disposición de toda a información necesaria para a súa escolleita e deseño está totalmente asentado, de maneira que non suporá ningún problema engadido a súa adquisición da maneira máis eficaz e eficiente posíbel. Existen multitude de fabricantes con especificacións moi diversas, o cal aporta unha gran diversidade e valor competitivo aos equipos empregados, sempre contando co seu *know-how* e as súas directrices.

#### 8.5. Cálculo do beneficio bruto.

Neste apartado estenderase o cálculo inicial do beneficio bruto, para poñer de manifesto, dun xeito moi inicial, a viabilidade económica da instalación, tendo unicamente en conta, como o seu termo indica, as materias primas e produtos, empregando os prezos de compra e de venda, respectivamente.

Desta maneira, na Táboa 10 reflíctese o resultado do beneficio bruto. Para levalo a cabo, tivéronse en conta as correntes 1, 4 e 21 do diagrama de fluxo (PFD). Isto, como resulta obvio, corresponden ás alimentación frescas de hidróxeno e fenol, así como a produción de ciclohexanona na última das correntes sinaladas, todo iso escalado á produción de 1

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

kg de ciclohexanona, para facer a comparación máis sinxela, obtendo en última instancia o beneficio económico bruto por cada kg de ONA producida.

As correspondencias de divisas tomadas en conta foron 1\$ = 0,92€ e 1 INR= 0,012€. Os prezos amosados na Táboa 10 fanse en moeda local, é dicir, en euros.

Táboa 10. Cálculo do beneficio bruto. Fontes: (50) (51) (52)

Parámetro	Fenol	Hidróxeno	Ciclohexanona
kg totais	18257,65	778,86	18939,39
prezo (€/kg)	0,82	0,74	1,71
kg / kg ONA	0,964	0,041	1,000
€ / kg ONA	0,79	0,03	1,71
	Suma		
€ / kg ONA	0,82		1,71

O beneficio bruto virá dado pola diferenza entre o prezo do produto por kg do mesmo, e o custo da suma das materias primas por kg de produto producido. Isto é:

$$\text{Beneficio bruto} = 1,71 \text{ €/kg ONA} - 0,82 \text{ €/kg ONA} = 0,89 \text{ € / kg ONA}$$

Esta cantidade considera un kg de produto polo seu prezo de venda menos a cantidade de materia prima necesaria para producir ese kg de produto polo seu prezo de compra.

## 9. DESCRICIÓN DA INSTALACIÓN

### 9.1. Por seccións

#### 9.1.1. Sección 100

Esta sección do proceso é a destinada ao acondicionamento de materias primas. Isto é preciso para a correcta consecución dos parámetros necesarios previos á reacción principal, tanto de presión como de temperatura.

Aquí é por tanto, onde a corrente de hidróxeno, corrente 1, se expande de 200 bar a 3 bar mediante unha válvula de expansión VLV-101, xuntándose posteriormente coa corrente 18.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Nesta sección tamén se acondiciona o fenol da corrente 4 á presión desexada de 3 bar, xuntándose a corrente 5 coa corrente 3 nun mesturador, tendo ambas materias primas nunha mesma corrente cunha proporción 3,5:1 para asegurar a conversión total do fenol.

### 9.1.2. Sección 200

A sección 200 é fundamental para o proceso, por tratarse da que alberga a reacción principal, convertendo o fenol, xunto con hidróxeno, en ciclohexanona.

En primeiro lugar, a mestura da corrente 6 entra no intercambiador de calor E-201, para elevar a súa temperatura a de reacción. Posteriormente, a reacción que se leva a cabo no reactor R-201 ten lugar nun reactor catalítico de leito fixo de carcasa e tubos, retirando calor con auga de caldeira a media presión, xerando así vapor de media presión á súa saída. Este feito radica no gran interese que suscita a integración enerxética na planta.

Co fin de recuperar o hidróxeno non reaccionado, emprégase un condensador parcial, condensado a totalidade de ciclohexanol e ciclohexanona formados. Deste xeito, o hidróxeno pode separarse por completo e reciclarse pola corrente 10, onde o compresor K-201 A/B adaptará a presión a 3 bares, para ser a mesma que a da alimentación fresca.

### 9.1.3. Sección 300

Trátase da sección máis completa en canto a número de equipos e tamén en canto ao seu interese, posto que é onde reaccionará gran parte do ciclohexanol formado para producir máis ciclohexanona, que ao fin e ao cabo, é o produto desexado.

A corrente 9, procedente da condensación parcial, sepárase na torre de destilación T-301, operando a baleiro, a 26,66 kPa. Previamente á entrada da alimentación, xúntase coa corrente 15, procedente da condensación parcial para separar hidróxeno, producido na deshidroxenación catalítica no reactor R-301.

Na destilación, por cabezas sae a ciclohexanona, cun 99,5% de pureza, grao cunha gran aceptación no mercado industrial. Por colas, o ciclohexanol cun 90% de pureza comprímese ata as dúas atmosferas e quéntase ata alcanzar os 300 °C da corrente 13, temperatura necesaria para operar de xeito óptimo o reactor R-301.

Os produtos da devandita reacción son, ciclohexanona (a que non reacciona e a que se transforma a partir de ciclohexanol), o ciclohexanol non reaccionado (a conversión é do 80%) e o hidróxeno (trátase dunha deshidroxenación).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

De maneira análoga á sección 200, o condensador parcial E-302 separa o hidróxeno e o compresor K-301 A/B é o encargado de acondicionar a corrente 16 para xuntarse coa corrente de reciclado procedente do condensador parcial E-202, e ambos unirse á alimentación fresca.

A corrente de cabezas, o produto, adecúase cunha bomba centrífuga e un intercambiador de calor para ofrecer o mesmo a 25°C e 1 atm.

### 9.2. Por equipos

#### 9.2.1. TK-101

É o tanque de almacenamento de hidróxeno. O devandito almacenamento terá lugar a 25°C e 20000 kPa, cun tempo de residencia estimado de 5 días, tras o cal debe subministrar máis materia prima para manter a operación regular da planta. O volume estimado deste equipo será de 6486 m<sup>3</sup>.

#### 9.2.2. TK-102

Tanque de almacenamento de fenol a 25°C e 101,3 kPa. O tempo de residencia estimado será de 2 semanas, dado que a súa densidade permite un equilibrio suficiente entre o tempo de residencia e o volume do recipiente, estimado en 5691 m<sup>3</sup>.

#### 9.2.3. VLV-101

Válvula de expansión para baixar a presión do hidróxeno de 20000 kPa a 300 kPa.

#### 9.2.4. P-101 A/B

Bomba centrífuga que acondiciona a corrente 5 ata os 300 kPa de presión; necesaria para as condicións de reacción do reactor R-201.

#### 9.2.5. M-101

Mesturador onde se poñen en contacto as correntes 3 e 5, isto é, de hidróxeno e fenol, para acondicionar acto seguido a corrente previa a entrada ao reactor.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 9.2.6. E-201

Intercambiador de calor de carcasa e tubos onde se eleva a temperatura da corrente 6 ata os 180°C, temperatura á cal se leva a cabo a reacción. A utilidade empregada é vapor de media presión.

### 9.2.7. R-201

Reactor onde se converte o fenol e hidróxeno en ciclohexanona e ciclohexanol. A característica fundamental deste equipo é a conversión total do fenol introducido, tal e como amplía dita información no anexo II parte I da presente memoria.

### 9.2.8. E-202

Condensador parcial para separar o hidróxeno non reaccionado do produto e subproduto da reacción que se levou a cabo no reactor R-201.

### 9.2.9. K-201 A/B

Compresor de hidróxeno para adaptar a presión de saída á presión de mestura coa corrente de alimentación fresca, a 300 kPa. O motivo de que diminúa é a caída de presión considerada no reactor R-201 e no condensador parcial E-202.

### 9.2.10. VLV-201

Válvula de expansión para adecuar a presión de saída do líquido saturado, coincidindo coa que leva a corrente 15 que sae do condensador parcial E-302. Ambas correntes xúntanse para constituír a alimentación á torre de destilación T-301.

### 9.2.11. R-301

Reactor de deshidroxenación catalítica do ciclohexanol para producir máis ciclohexanona, produto principal do proceso. As condicións de operación son de 202,6 kPa e 300 °C de temperatura, logrando así a conversión do 80% do ciclohexanol introducido.

A corrente de alimentación ao reactor é a procedente da columna de destilación T-301, máis concretamente, da parte inferior ou de colas.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 9.2.12. E-301

Intercambiador de calor, onde a corrente de colas procedente da T-301 se acondiciona a 300 °C, necesarios para a correcta operación do reactor R-301.

### 9.2.13. E-302

Condensador parcial, idéntico ao exposto no apartado 9.2.8 da presente memoria. A idea é a de separar o hidróxeno desprendido na reacción levada a cabo no reactor R-301, logrando unha corrente de hidróxeno que se recicla á entrada do proceso e unha corrente 15 composta por ciclohexanona e ciclohexanol que se xuntará coa corrente 12 para constituír a alimentación da columna de destilación T-301.

### 9.2.14. K-301 A/B

Compresor que adapta a presión da corrente 16 a 300 kPa, necesarios para poder xuntarse coa corrente de alimentación fresca. A idea da súa utilización é análoga á do compresor K-201 A/B, exposta na presente memoria no apartado 9.2.9.

### 9.2.15. VLV-301

Válvula de expansión previo á entrada da corrente de alimentación á torre de destilación T-301. A súa utilización é imprescindible, posto que grazas á bomba de baleiro P-302 A/B, conséguese o valor de 26,66 kPa de presión, necesario para a operación da columna e a optimización da separación entre o ciclohexanol e a ciclohexanona.

### 9.2.16. T-301

Columna de destilación a baleiro para a separación da ONA e o OL. A presión empregada é 26,66 kPa e a temperatura é a de rocío. Isto é, a corrente de alimentación será líquido saturado. Este equipo deseñouse de xeito rigoroso no anexo II parte II da presente memoria.

### 9.2.17. E-303

Condensador total sito en cabezas da torre T-301, condensado a totalidade do vapor que sae da columna de destilación e introducíndose a totalidade da corrente no tanque de proceso V-301, de onde unha parte constitúe o refluxo cara a columna e outra parte supón a corrente de produto que debe ser acondicionada previamente á súa saída do proceso.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 9.2.18. E-304

Calderín sito na zona de colas da columna de destilación a baleiro. Trátase dun evaporador parcial, que constitúe unha etapa de equilibrio. Parte do vapor voltará cara a columna e o líquido saturado acondicionarase para a reacción levada a cabo no reactor R-301.

### 9.2.19. E-305

Intercambiador de calor de carcasa e tubos, cuxo cometido é o acondicionamento da corrente de produto procedente da torre T-301.

Este equipo diminúe a temperatura dende os 109,9 °C aos 25 °C, temperatura á cal se subministra ao mercado a ciclohexanona cun 99,5% de pureza producida.

### 9.2.20. V-301

Tanque de refluxo. Trátase dun tanque de proceso para garantir o funcionamento da columna de destilación T-301 no caso de que ocorra calquera eventualidade, impedindo deste xeito que o refluxo deixe de fluír cara a columna.

Estímase un tempo de residencia de 3h, cun volume estimado de 1226,34 m<sup>3</sup>, segundo a normativa API 650.

### 9.2.21. P-301 A/B

Bomba centrífuga de refluxo. Emprégase para impulsar o fluído unicamente.

Ao tratarse dunha bomba na que non hai variación de presión considerada, non se ten en conta para o cálculo económico, ao ter un impacto ínfimo no proxecto.

### 9.2.22. P-302 A/B

É unha das pezas claves do proceso, sen a cal non sería posíbel a separación tal e como se concibiu.

É a bomba de baleiro, encargada de manter a presión interna da columna de destilación en 26,66 kPa, sen ter en conta a caída de presión ao longo dos pratos. En definitiva, é a que provoca o baleiro co que traballa a torre T-301.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

#### 9.2.23. P-303 A/B

Bomba centrífuga que eleva a presión ata o valor de 101,3 kPa, isto é, presión atmosférica. Esta presión é á que se comercializará o produto, por iso se emprega o devandito equipo.

#### 9.2.24. P-304 A/B

O cometido desta bomba centrífuga é elevar a presión dende os 50,66 kPa ata os 202,6 kPa. Esta presión é á que operará o reactor R-301, polo que a súa utilización é necesaria e xustificada.

## 10. CONTROL E INSTRUMENTACIÓN

### 10.1 Introducción

Non queda tan lonxe o tempo no que o control dunha planta industrial se facía de xeito manual. Isto é, abrir e pechar de xeito manual as válvulas de control.

Como en practicamente na totalidade das situacións, un exemplo é moito máis clarificador para ilustrar o gran avance que supuxo o control na industria e a súa total dependencia nos tempos actuais.

Este exemplo baséase nun intercambiador de calor, onde a variable controlada é a temperatura á saída da corrente en cuestión, sendo a variable manipulada o caudal de vapor que se subministra para quentar o fluído ata a temperatura desexada.

Ante a inexistencia de control, o único que se podía facer era ver a que temperatura sae o fluído. Se era menor, ábrese a válvula de caudal de vapor, mentres que se é maior á desexada, este elemento que regula o fluxo subministrado de vapor, debe ser pechada, reducindo así a cantidade de calor intercambiado. Todo isto, manualmente, e aquí se ilustra o exemplo proposto.

O tempo que tarda o operario responsable en acceder a dita válvula para regular o fluxo de vapor, é un tempo no que a temperatura sufriu unha perturbación e non está no valor desexado (tamén coñecido como punto de consigna ou *set point* na súa expresión anglosaxoa). Se esa temperatura é un parámetro crítico para o proceso, isto podería derivar en problemas de seguridade certamente serios, como por exemplo unha reacción descontrolada dentro dun reactor debida ao deficiente intercambio de calor.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O control actúa de xeito automático, corrixindo as desviacións acontecidas a raíz dunha perturbación no sistema. Esa é a razón pola que na actualidade, é impensable a concepción dunha planta industrial química onde non exista un sistema de control.

Neste apartado ilustraranse os obxectivos dun sistema de control así como as modalidades do mesmo. Asemade, expóranse os lazos de control dispoñíbeis e máis habituais na industria, rematando coa exposición dos lazos de control empregados na elaboración do presente proxecto, o seu obxectivo e funcionamento.

### 10.2. Obxectivos dun sistema de control

Neste apartado comentaránse os cinco obxectivos principais que ten un sistema de control, expostos pola monografía elaborada por George Stephanopoulos (53).

1) Seguridade: é de facto o ítem máis importante. A seguridade non debe ser nunca negociable. O control proporciona, tanto ás persoas como ao proceso, garantías de operabilidade segura.

Dentro da industria de procesos, hai elementos moi críticos como pode ser un reactor químico, onde a desviación ante a acción de perturbacións no sistema, poden desencadear consecuencias catastróficas, por exemplo, unha reacción descontrolada, como se teñen visto no pasado recente.

A seguridade é polo tanto, un elemento primordial e obxectivo principal de calquera sistema de control.

2) Especificacións produtivas: asegura as condicións de calidade e especificacións técnicas do produto á demanda do mercado ao que se dirixe o presente proxecto.

Neste contexto, entraría a garantía de que o produto que sae por cabezas da columna de destilación teña a pureza desexada, neste caso un 99,5% de ciclohexanona, que será o produto que se comercialice.

3) Regulamentos medioambientais: garante o cumprimento das leis medioambientais en canto a límite de vertidos.

Desta maneira, un sistema de control asegura que os parámetros englobados neste apartado estean dentro dos límites permisibles pola lexislación. Como exemplos nomearíanse, temperaturas dos efluentes, concentración dos gases emitidos, etc.

Detallando un pouco máis, a temperatura dun efluente a un río, pode ser moi daniño para o hábitat mariño que se atope nas inmediacións, algo que pode parecer, previamente, inofensivo, pode desencadear un gran dano para o medio ambiente.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

4) Restricións operacionais: engloba dalgún xeito aos tres puntos anteriores.

Os equipos que forman parte da batería de proceso deben operar dentro duns parámetros definidos, fóra dos cales a operación non sería segura, non se alcanzarían as especificacións de pureza desexadas ou incumprirían os rangos establecidos polas leis ambientais para o vertido. Neste aspecto, os valores de operación segura deben manterse dentro dun rango, cun valor de consigna aportado ao lazo de control nun determinado equipo, que garanta a súa estabilidade, asegurando a óptima operación do equipo industrial involucrado.

5) Económico: non por ser o último é do que menor importancia goza.

A economía na industria está ao fronte das decisións. Neste aspecto, un sistema de control proporciona a utilización máis económica de materias primas, así como por exemplo enerxía.

Unha exemplificación pode ser o control de enerxía subministrado por unha utilidade nun intercambio de calor. Se o control non funciona correctamente e non responde como debería, a enerxía que debe aportar a utilidade pode ser deficiente ou excesiva, coa repercusión na calidade no primeiro caso, e o desaxuste económico no segundo.

### 10.3. Representación dun lazo de control. Elementos dun lazo de control

Na Figura 21 amósase o esquema básico dun lazo de control.

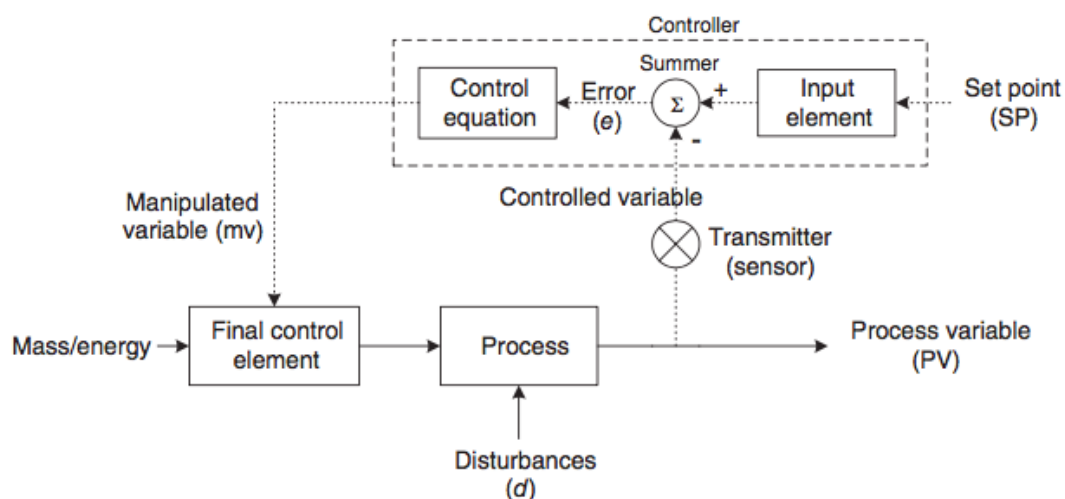


Figura 21. Representación dun lazo de control feedback. Fonte: (54)

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Nel pode visualizarse o proceso ao cal afectan as perturbacións que fan que as variables do sistema poidan variar.

O funcionamento é ben sinxelo. Unha perturbación altera o valor, por exemplo a temperatura, de maneira que á saída do proceso, un transmisor de temperatura capta o valor que ten ese parámetro. Acto seguido, o valor transmítese ao controlador, que compara cun valor de consigna ou *set point* na terminoloxía anglosaxoa. Se existe diferenza entre os mesmos, o controlador calcula a desviación e acto seguido indica á variable manipulada do elemento final de control (normalmente adoita ser unha válvula de control) cal sería a acción a efectuar, isto é, abrir ou pechar dita válvula.

Unha vez se comprende como funciona un lazo de control, a continuación noméanse os elementos que conforman o devandito lazo.

O lazo está conformado por elementos primarios (sensores e transmisores na maioría dos casos), controladores, elementos finais e como non pode ser doutra maneira, os procesos (54).

Volvendo ao exemplo ilustrado na Figura 21, aplicado a un lazo de control de temperatura, ante unha perturbación no proceso, o sensor/transmisor sería o TT, ou transmisor de temperatura, que informaría ao controlador TIC, comparando o valor transmitido co valor desexado. Por último, este controlador TIC, enviaría un sinal ao elemento final de sistema de control, que manipularía a variable, por exemplo de fluxo. Este elemento sería TCV neste caso, válvula de control de temperatura.

#### 10.4. Simbología e nomenclatura

Ao longo deste apartado da memoria, empregaranse diversas abreviaturas e conceptos que se mostran neste subapartado, para facilitar a comprensión xeral.

A especificidade e amplitude do sistema de control podería resultar demasiado extenso para o presente TFG.

Na Figura 22 móstrase a correspondencia das liñas empregadas nos P&ID 1 e 2 dispoñibles no Documento II: Planos do presente proxecto.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

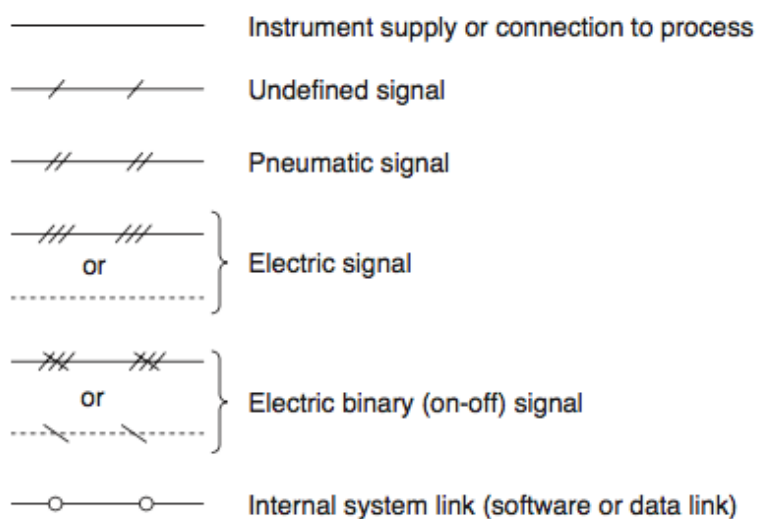


Figura 22. Liñas de instrumentación presentes nos diagramas de tuberías e instrumentación. Fonte: (35)

Nos planos 5 e 6 correspondentes aos P&IDs empréganse as liñas de conexión, a pneumática e a sinal eléctrica. O resto non se utilizan neste caso, pero é convinte expoñelas para coñecer da súa existencia.

Por último, na Figura 23, en forma de táboa, correspondente á monografía de R. Sinnott, móstranse as posibles combinacións de letras que conforman os elementos de control.

Initiating or Measured Variable	First Letter	Indicating Only	Controllers			Transmitters	Final Control Element
			Recording	Indicating	Blind		
Analysis (composition)	A	AI	ARC	AIC	AC	AT	AV
Flow rate	F	FI	FRC	FIC	FC	FT	FV
Flow ratio	FF	FFI	FFRC	FFIC	FFC	FFT	FFV
Power	J	JI	JRC	JIC		JT	JV
Level	L	LI	LRC	LIC	LC	LT	LV
Pressure, vacuum	P	PI	PRC	PIC	PC	PT	PV
Pressure differential	PD	PDI	PDRC	PDIC	PDC	PDT	PDV
Quantity	Q	QI	QRC	QIC		QT	QZ
Radiation	R	RI	RRC	RIC	RC	RT	RZ
Temperature	T	TI	TRC	TIC	TC	TT	TV
Temperature differential	TD	TDI	TDRC	TDIC	TDC	TDT	TDV
Weight	W	WI	WRC	WIC	WC	WT	WZ

Figura 23. Combinación de letras e o seu significado en función da posición. Fonte: (35)

Así por exemplo, TIC: T → temperatura

IC → indicador, controlador

Coas combinacións expostas na Figura 23 estase en condicións de comprender a simboloxía que se amosa nos diagramas de tuberías e instrumentación, así como coa axuda da lenda que se adxunta en cada un dos mesmos (Documento II: Planos #5 e #6).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

No estándar publicado pola ISA poden atoparse a globalidade das combinacións posibles. Neste caso xustifícase o emprego da táboa proporcionada na Figura 23 por R. Sinnott debido a que cubre as variables empregadas nos diagramas de tuberías e instrumentacións realizados no apartado correspondente deste proxecto.

### 10.5. Configuracións de control

#### 10.5.1. Control Feedback

É a modalidade de control máis estendida na industria. Podería afirmarse con certeza de que arredor dun 90-95% dos lazos de control empregados na industria de proceso son lazos feedback.

É a configuración de control máis económica e máis sinxela. Cabe destacar que non sempre o máis sofisticado é o mellor, e empregar calquera outro tipo de configuracións exposta nos apartados 10.5.2., 10.5.3. e 10.5.4. deben ser xustificadas.

O seu funcionamento é moi sinxelo, ilustrado na Figura 24.

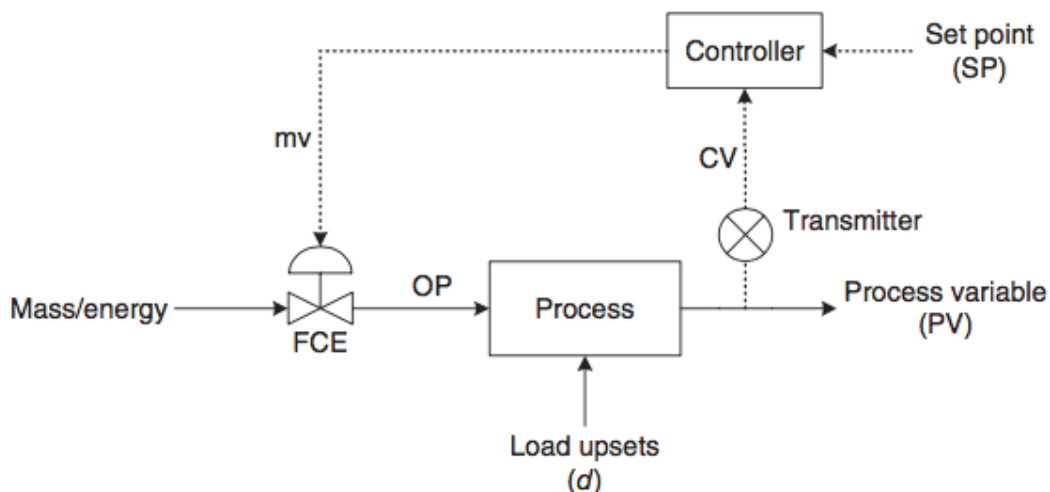


Figura 24. Lazo de control feedback. Fonte: (54)

Cando unha perturbación modifica unha variable controlada, o transmisor que se acha na variable de proceso, indícalle ao controlador o seu valor, de maneira que calcula a diferenza con respecto ao valor de consigna asignado polos operarios da sala de control en función do proceso e do equipo. Así, toma unha decisión e indícallo ao variable manipulada.

O problema que pode xurdir deste xeito de actuar é que a perturbación recorre o sistema antes de ser detectada, de maneira que é aí cando se corrixe. Por tanto, cando se estea a tratar dunha variable de gran importancia que non poida variar apenas e cuxa importancia

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

sexa primordial para garantir a seguridade na operación, debe empregarse outro tipo de control como se exporán nos subapartados seguintes.

### 10.5.2. Control Feedforward

A diferenza do control feedback, actúa antes de que pase por todo o proceso, minimizando o efecto das perturbacións no proceso.

Na Figura 25, amósase o esquema básico deste tipo de control.

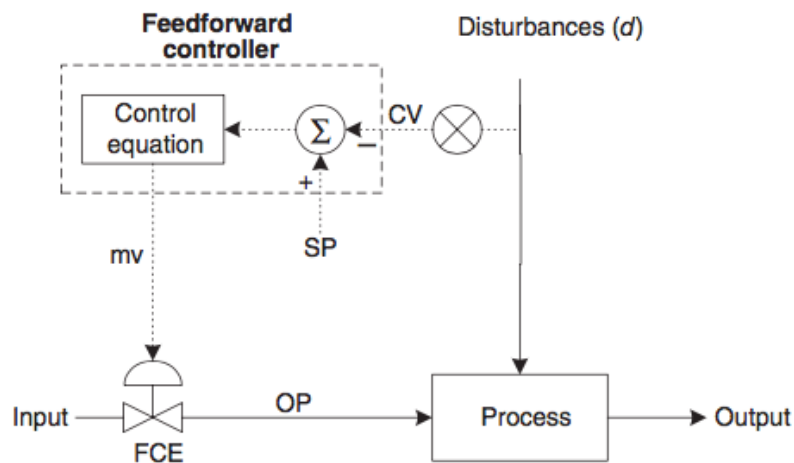


Figura 25. Lazo de control feedforward. Fonte: (54)

Tal e como se aprecia, detéctase a perturbación antes de que pase polo sistema, de maneira que se pode actuar sobre o elemento final de control e así minimizar o impacto que ten sobre o proceso.

En procesos industriais soe empregarse en combinación co feedback, optimizando a resposta do sistema ante as perturbacións que poidan acaecer.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 10.5.3. Control do ratio

Na Figura 26 representábase o esquema xeral do control do ratio.

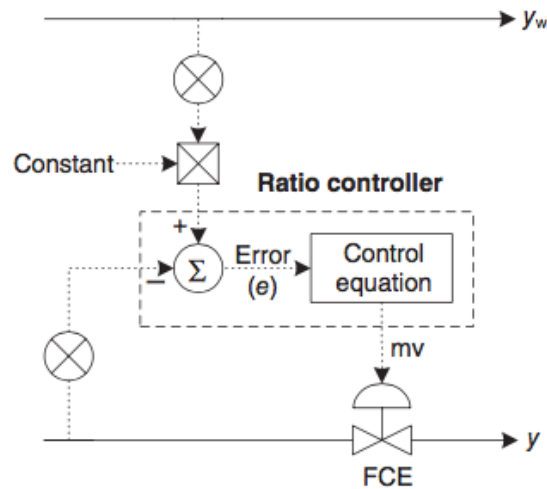


Figura 26. Lazo de control do ratio. Fonte: (54)

Emprégase con asiduidade no control da mestura de pinturas, onde por unha corrente circula a base e por outra faíno o pigmento, de maneira que en función do valor que vaia por unha das dúas correntes, axusta o da outra, logrando que a mestura estea nas proporcións desexadas.

### 10.5.4. Control en cascada

O uso deste tipo de control, mostrado na Figura 27, debe xustificarse, posto que é moito máis custoso.

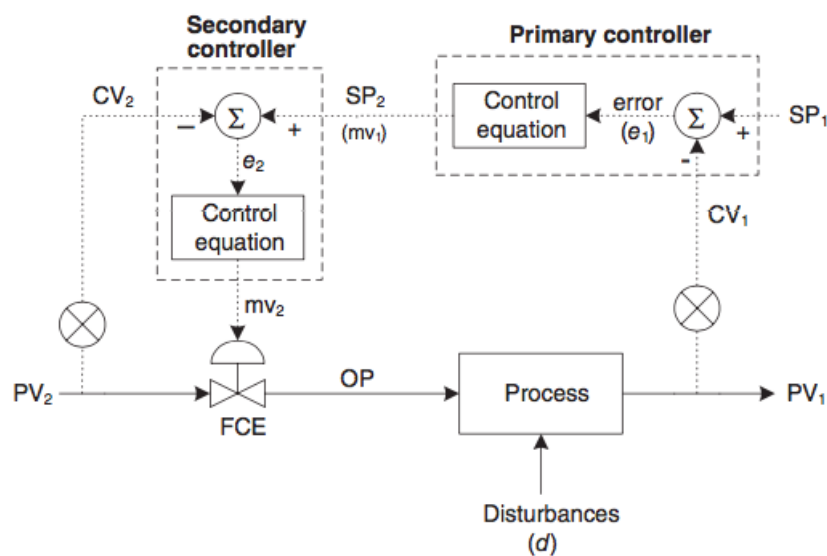


Figura 27. Lazo de control en cascada. Fonte: (54)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Neste tipo de configuración, un primeiro controlador é o que fixa o valor de consigna do segundo controlador, en función do valor da variable controlada.

Para que isto ocorra sen que exista ningún tipo de conflito entre ámbolos controladores, un lazo debe ser aproximadamente catro 8 veces máis lento que o outro (54).

### 10.6. Algoritmos de control

Neste apartado agrúpanse os algoritmos de control dispoñibles. De este xeito resultará moito máis intuitivo entrever as diferencias e ecuacións características entre cada un deles.

Na Táboa 11 ilústranse os algoritmos existentes e tamén se comentan as principais diferenzas entre os mesmos, constituíndo unha base moi importante para a súa correcta elección en función dos obxectivos desexados e requiridos.

Táboa 11. Algoritmos de control. Fonte: (54)

ALGORITMOS	ECUACIÓN	CARACTERÍSTICAS
ON-OFF	-	Senoidal. Non se alcanza E.E.
Proporcional (P)	$vm = K_c e + b$	Non se alcanza E.E.
Integral (I)	$vm = \frac{1}{T_i} \int edt + mv_0$	Alcanza o E.E. Lento
Proporcional-Derivativo (PD)	$vm = K_c \left( e + T_d \frac{de}{dt} \right) + b$	Non alcanza E.E. Máis rápido que Proporcional
Proporcional-Integral (PI)	$vm = K_c \left( e + \frac{1}{T_i} \int edt \right)$	Alcanza o E.E. Máis rápido que Integral
Proporcional-Integral-Derivativo (PID)	$vm = K_c \left( e + \frac{1}{T_i} \int edt - T_d \frac{vc}{dt} \right)$	Alcanza o E.E. Máis rápido que Proporcional-Integral

O control ON-OFF é equiparable a un interruptor, cando se acciona, sube e cando se apaga baixa, por iso o movemento é senoidal e non se alcanza o estado estacionario, aínda que podería axustarse a unha variación entre uns valores superior e inferior de xeito que sexa unha modalidade axeitada á variable a manipular, todo dependerá do lazo de control.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

En cando ao control proporcional (P), é un dos máis básicos e sinxelos, posto que cando unha perturbación actúa no sistema, actúa en proporción á mesma, pero non alcanza nunca o estado estacionario (E.E.). Emprégase en equipos con gran capacitancia onde non resulta imprescindible que o valor se manteña nun valor concreto (53) (54).

Un exemplo disto pode ser un tanque de almacenamento cun diámetro moi elevado, onde que o nivel de líquido sexa maior ou menor, apenas é perceptible, e polo tanto, de importancia.

O control integral (I) é o máis sinxelo dos que alcanza o estado estacionario, actuando en proporción á suma dos erros.

Cando se emprega este algoritmo sen ningún tipo de combinación, o tempo en alcanzar o anterior valor é considerable, polo que adoita empregarse en conxunción co proporcional (PI) ou co proporcional e derivativo (PID) (53) (54).

O control Proporcional-Derivativo (PD) introduce a acción derivativa para diferenciarse do proporcional soamente.

A acción derivativa consiste en que a actuación será en base á diferenza do erro (de) polo que alcanza a estabilidade deixando un pequeno *offset*, pero alcanza ese valor estable antes que o proporcional. Noutras palabras, non alcanza o estado estacionario, pero a estabilidade conséguese máis rapidamente que no control proporcional (P) (53) (54).

O algoritmo de control Proporcional-Integral (PI) é moi empregado debido a que alcanza o estado estacionario cunha velocidade considerablemente superior ao integral (I) empregado só.

É por isto que moitos lazos de control industriais optan por este tipo de algoritmo. Sobre todo onde as perturbacións poden ser moi elevadas, xa que non actúa como a pendente do erro, isto é, coma a acción derivativa (53) (54).

Neste grupo poderíanse englobar os lazos de control de fluxo, onde pode ser contraproducente facelo co algoritmo PID.

Por último, o algoritmo Proporcional-Integral-Derivativo (PID) é o que chega ao estado estacionario en menos tempo, polo que se poderá empregar sempre e cando o erro non sexa moi elevado.

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Isto acontece porque a acción derivativa actúa como a pendente do erro co tempo ( $de/dt$ ), de maneira que podería descontrolar o sistema.

Nas Figuras 28 e 29 pónense de manifesto o comentado nas liñas anteriores pertencentes a este apartado, onde se visualiza de xeito moi gráfico as características acerca do alcance do estado estacionario dos diferentes tipos de algoritmos de control empregados.

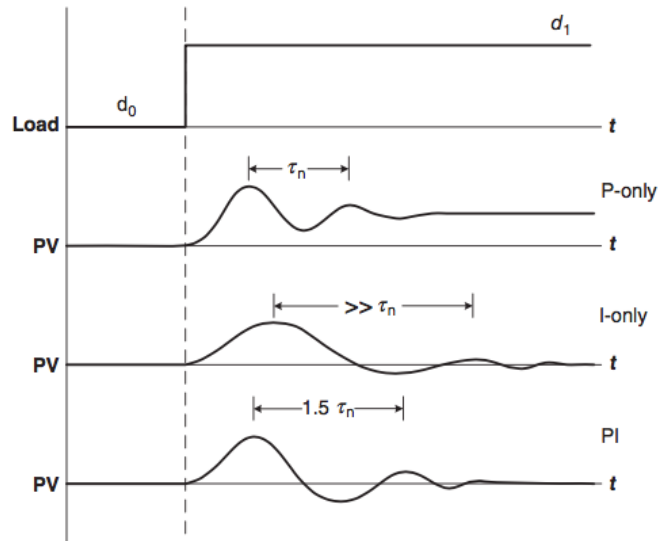


Figura 28. Comparación entre os algoritmos de control (P), (I) e (PI). Fonte: (54)

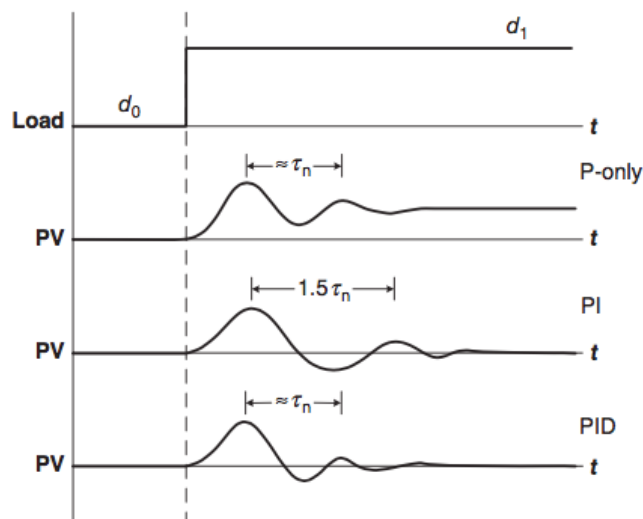


Figura 29. Comparación entre os algoritmos de control (P), (PI) e (PID). Fonte: (54)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Na Figura 30 móstrase un algoritmo presente na monografía de W. Svrcek para a selección do controlador máis adecuado en función dunha serie de parámetros.

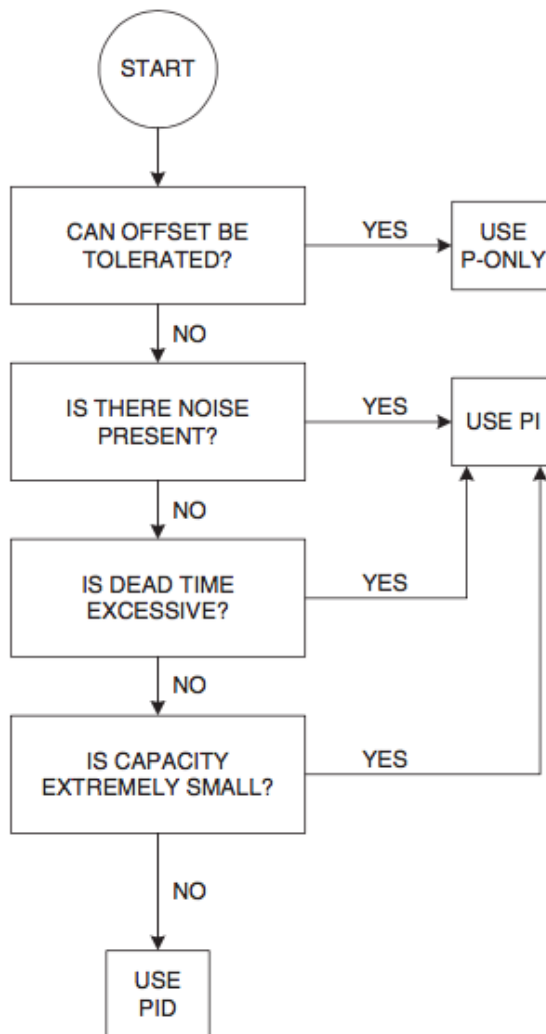


Figura 30. Algoritmo para a selección de controlador. Fonte: (54)

### 10.7. Lazos de control

No seguinte apartado, comentarase os lazos de control empregados no diagrama de tuberías e instrumentación presentes no Documento II. Planos deste proxecto.

Organizaranse por seccións, coincidentes coas do proceso a tratar neste traballo fin de grado, pormenorizando dentro delas, en función de cada un dos equipos.

Comentarase o obxectivo do lazo de control, así como as variables controladas e manipuladas.

#### 10.7.1. Sección 100

- Tanques TK-101 e TK-102

A diferenza entre ambos é que o tanque TK-101, ao almacenar hidróxeno a 200 bar, ten unha válvula de alivio, PSV-104. O resto de lazos son idénticos, polo que se comentarán os de un deles, máis concretamente, o TK-101.

Ten indicadores de temperatura e presión, TI-101 e PI-102 e tamén un transmisor de nivel con alarmas, alta e baixa, LAH-103 e LAL-103, para garantir que os niveis non son nin moi altos nin moi baixos, isto é, que se manteñen nos valores desexados.

Asemade, o lazo de fluxo F-105, regula o caudal de saída da materia prima ao proceso, asegurando que sexa a cantidade desexada en cada momento para poder producir a cantidade desexada de produto á saída do mesmo. O lazo de fluxo é un lazo *feedforward*, posto que se controla a variable previamente a que a perturbación pase polo sistema de análise. Isto débese a que un lazo de fluxo é moi rápido, polo que convén mitigar a perturbación o antes posíbel.

Empréganse transmisores FT, como pode ser un tubo de Pitot, un controlador FIC con configuración (PI), un conversor de sinal FY e unha válvula de control de fluxo FCV. A variable controlada é o fluxo e a manipulada tamén, non varía.

#### 10.7.2. Sección 200

- E-201

O lazo de control é *feedforward*, dado que a temperatura é un parámetro crítico na reacción que ten lugar no reactor R-201. Deste xeito, ao detectar a temperatura que ten a corrente na saída do mesturador M-101, en caso de perturbación no eu valor, este é detectado, calculando a cantidade de *mps* que se debe introducir no intercambiador de calor para alcanzar a temperatura de 180°C desexada á saída.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O transmisor TT-201, é o encargado de transmitir a temperatura, podendo ser unha RTD (baseado na ponte de Wheatstone), ou unha NTC, o TIC-201 é un controlador con algoritmo (PID), conversor de sinal TY-201 e válvula de control TCV-201 para regular a cantidade de utilidade introducida.

A variable controlada é a temperatura e a manipulada é o fluxo de utilidade.

### - Reactor R-201

Ao levarse a cabo a 300 kPa, emprégase unha válvula de alivio PSV-204 para poder actuar como elemento de seguridade ante calquera sobrepresión acaecida no seu interior.

Existe un lazo para o control da presión, emitindo unha alarma se os valores son demasiado altos ou excesivamente baixos, repercutindo no rendemento da reacción, factor que non interesa en absoluto.

Como se trata dun reactor con intercambio de calor, emprégase o TT-202 para transmitir a temperatura, con alarmas por valores altos e baixos, controlador TIC-202 co algoritmo (PID) e por último a válvula de control TCV-202 que regula a cantidade de utilidade *bwm* introducida. O lazo de control é *feedback*.

A variable controlada é a temperatura e a manipulada o fluxo de utilidade que entra ao reactor.

### - E-202

Idéntico ao E-201, co mesmo funcionamento, excepto que o lazo é *feedback*. Ademais, contén unha válvula de alivio de presión PSV-206 debido a que tamén está presente hidróxeno.

### - K-201

Lazo *feedback* para asegurar a presión desexada á saída.

Consta de un transmisor PT-207, controlador PIC-207 co algoritmo (PID) e un conversor de sinal PY-207 seguido dunha válvula de control PCV-207.

A presión desexada é de 300 kPa para mesturarse coa corrente de alimentación de hidróxeno fresca.

A variable manipulada é a presión e a manipulada tamén.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

- VLV-201

Lazo *feedforward* para o control da presión, garantindo que o valor de saída é de 180 kPa para mesturarse coa corrente 15 dando lugar á corrente 19.

Consta de un transmisor de presión PT-206, controlador PIC-208 co algoritmo (PI) e un conversor de sinal PY-208, seguido do elemento final de control, a válvula de control de presión, PCV-208.

A variable controlada é a presión e a manipulada non varía, segue sendo a presión.

### 10.7.3. Sección 300

- R-301

Idéntico sistema de control e lazos que os que se empregan no reactor R-201.

A diferenza é que ao tratarse dunha reacción endotérmica, non se retira calor, senón que se subministra por medio dun fluído térmico *htm*. O resto permanece invariante.

- K-301

Sistema de control idéntico ao compresor K-201.

- E-301

Sistema de control idéntico ao intercambiador de calor E-201

- E-302

Equiparable sistema de control ao do condensador parcial E-202

- T-301, E-303, E-304 e V-301

Forman parte da columna de destilación T-301, co condensador total de cabezas e o evaporador parcial de colas.

A torre de destilación T-301 está concibida para ter un sistema de control da pureza do produto en cabezas, segundo a monografía proposta por R. Sinnott e G. Towler (35).

Todos os lazos de control son *feedback*.

En primeiro lugar atópase o lazo de control da presión, onde a variable controlada é a presión e a variable manipulada é o caudal de utilidade que entra no condensador total.

A pureza contrólase co lazo de temperatura TIC-307, de maneira que constitúe a variable controlada, sendo a manipulada o fluxo de refluxo que entra á columna por cabezas.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O tanque de refluxo V-301 comprende un lazo de nivel, variable controlada, manipulando o fluxo de destilado, produto final, extraído por cabezas, garantindo o correcto nivel de fluído dentro do tanque en todo momento.

Na parte inferior atópanse dous lazos de control, un de nivel, variable controlada, sendo a manipulada o fluxo de colas que sae do evaporador parcial.

Por último e tamén na parte inferior contrólase o fluxo de vapor que accede á columna pola parte inferior, manipulando o fluxo de utilidade que entra ao evaporador parcial E-304.

- E-305

Sistema de control similar aos intercambiadores de calor E-201 e E-301, controlando a temperatura e manipulando o fluxo de entrada de utilidade.

## 11. SEGURIDADE NA OPERACIÓN

### 11.1. Introducción

Unha vez presentados todos os aspectos requiridos no deseño da planta de produción de ciclohexanona, abórdanse no presente apartado, as cuestións relacionadas coa seguridade na operación.

En primeiro lugar, elabórase un inventario das sustancias presentes no proceso, tendo en conta a súa perigosidade e as características principais. Isto permite realizar unha clasificación da instalación segundo a normativa Seveso, co fin de determinar a lexislación vixente á que queda sometida.

En segundo lugar, realízase un estudo preliminar da reactividade descontrolada mediante os métodos básicos e dispoñibles na bibliografía de libre acceso. O análise de riscos realízase co método Dow de lume e explosión para estimar posibles perigos nos equipos deseñados.

Finalmente, complétase co dimensionamento dunha válvula de alivio de presión para o reactor R-201 e o cálculo das distancias mínimas de seguridade, así como a exposición e ilustración dun escenario hipotético de fuga no tanque TK-102.

## 11.2. Inventario de sustancias e Clasificación Seveso

Todos os compostos que participan no proceso deben recollese nun inventario no cal se mostran tamén as propiedades termodinámicas máis importantes de cada un . O inventario é parte imprescindible de cara á realización da clasificación da instalación segundo a normativa Seveso (55). Os datos termodinámicos presentes na Táboa 12 proceden das Fichas de Seguridade dos compostos que se poden atopar no Anexo IV do presente proxecto.

Táboa 12. Datos termodinámicos dos compostos do proceso. Fonte: FDS dos compostos

<b>Substancia</b>	<b>Temperatura de inflamación (°C)</b>	<b>Temperatura inicial de ebulición (°C)</b>	<b>Límite inferior de inflamabilidade (% vol.)</b>	<b>Límite superior de inflamabilidade (%vol.)</b>
<b>Fenol</b>	81	180	1,3	9,5
<b>Hidróxeno</b>	Non aplica	-253	4	77
<b>Ciclohexanona</b>	44	153	1,3	9,4
<b>Ciclohexanol</b>	64	160,8	1,5	12

O inventario complétase coa clasificación realizada polo regulamento CLP (56). O hidróxeno é o único composto que aparece como sustancia perigosa nominada no Anexo I. Parte 2 do R.D. 840/2015. Por outra parte, na táboa 13 só se presentan aqueles compostos que a normativa Seveso clasifica como perigosos. Posto que o ciclohexanol non se considera sustancia nominada no Anexo I. Parte 2 do R.D. 840/2015 nin coincide con algunha categoría de perigo na Parte 1 do anexo anteriormente nomeado, non se considera sustancia perigosa a efectos da normativa Seveso.

Táboa 13. Clasificación das sustancias de inventario segundo o Regulamento CLP (56)

<b>Sustancia</b>	<b>Nº CAS</b>	<b>Propiedades</b>	<b>Clasificación</b>
<b>Fenol</b>		Toxicidade aguda (cat.2 e 3) Perigo acuático crónico ( cat.2)	H2
<b>Hidróxeno</b>	1333-74-0	Gas inflamable	P2
<b>Ciclohexanona</b>	108-94-1	Líquidos inflamables (cat.2 e 3)	P5c

Finalmente, unha vez o inventario de sustancia está realizado conforme as Táboas 12 e 13, procederáse á aplicación do R.D 840/2015 co fin de establecer se a planta queda baixo a lexislación Seveso III. Presentaranse os umbrais inferiores e superiores que recollen o Anexo I. Partes 1 e 2 do R.D. 840/2015 e compararanse as cantidades máximas presentes nun momento concreto. Así, para as materias primas (fenol e hidróxeno) considéranse

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

un tempo de residencia de almacenamento en tanques de 14 e 5 días, respectivamente. Para o produto (ciclohexanona), considérase un tempo de residencia de 14 días.

Táboa 14. Clasificación da instalación segundo Seveso III (55)

Sustancia	Umbral inferior (ton)	Umbral superior (ton)	Cantidade total (ton)	Clasifica?
Fenol	50	200	6135,36	SI
Hidróxeno	5	50	93,47	SI
Ciclohexanona	50	200	6758,92	SI

Por tanto, como todas as sustancias recollidas como perigosas superan suficientemente os correspondentes marxes, a instalación queda sometida á Normativa Seveso III e deberá cumprir as restricións que impón o R.D 849/2015 en materia de seguridade.

Cabe resaltar que conque unha única substancia deba ser sometida á Normativa Seveso III, toda a planta cualificaría como tal.

#### 11.2.1 Clasificación segundo a norma NFPA 704

A NFPA (siglas inglesas), é a Asociación Nacional de protección contra lumes de ámbito internacional que elabora normas para prácticas contra incendios. En concreto, a norma NFPA 704 recolle os perigos de sustancias perigosas que de forma gráfica se representa mediante o diamante de lume. Unha figura en forma de rombo dividida en diferentes seccións de cores (vermella, azul, amarela e branca) as cales se lle asigna un número entre o 1 e o 4 en función da perigosidade. A sección branca non contén números, no seu lugar indícanse unha siglas que definen un perigo especial (57).



Figura 31. Diagrama NFPA . Fonte: (57)

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Empregando as fichas de seguridade dos compostos, elabórase a Táboa 15.

Táboa 15. Clasificación segundo norma NFPA 704. Fonte: Elaboración propia

Sustancia	Saúde	Inflamabilidade	Inestabilidade	Risco especial
<b>Fenol</b>	4	2	0	-
<b>Hidróxeno</b>	0	4	0	-
<b>Ciclohexanona</b>	1	2	0	-
<b>Ciclohexanol</b>	1	2	0	-

De conformidade cos datos obtidos na Táboa 15, pódese concluír que ningún dos compostos presenta un risco especial como pode ser: axente oxidante, reacción violentamente con auga ou ser un gas asfixiante (57).

### 11.3. Estudio de reactividade descontrolada

O obxectivo de realizar un estudo perigosidade reside na importancia de equipar medidas de prevención no proceso. Os perigos nos que deriva unha reacción descontrolada (*runaway reaction*) son, atendendo ás indicacións marcadas pola norma NTP 302 (58), entre outros: quentamento súbito de unha cantidade de materia en proceso e posterior ebulición, explosións que provoquen á súa vez lanzamento de proxeccións ou situacións de sobrepresión en reactores con liberación de material gasoso. Estas condicións poden verse agravadas en presenza de reaccións con gran poder exotérmico, é dicir, unha liberación de calor reseñábel. Para coñecer a perigosidade relacionada cas reaccións químicas séguese o esquema da Figura 32, polo que se desenvolve un estudo preliminar (58).

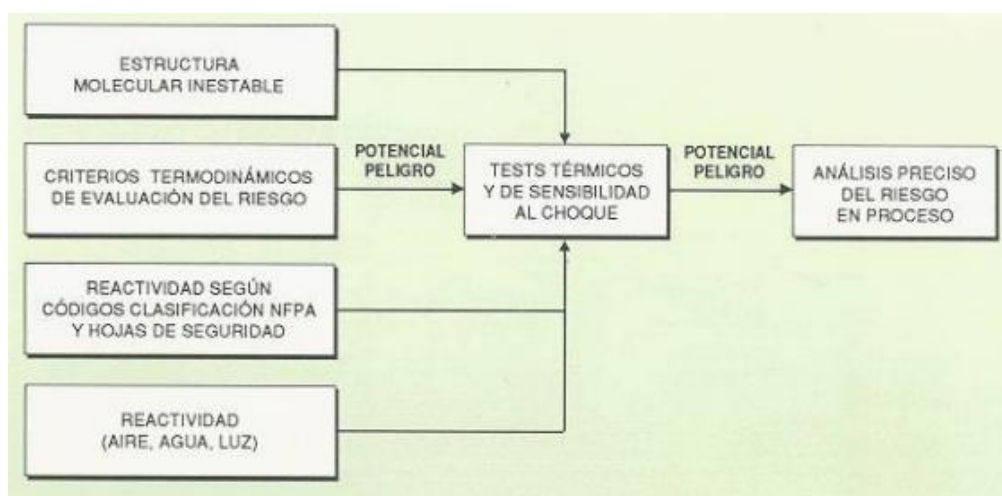


Figura 32. Esquema de seguimento para o estudo de reactividade descontrolada . Fonte (58)

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 11.3.1 Matriz de compatibilidade química

Resulta necesario dilucidar o tipo de interacción entre os diferentes compostos presentes no proceso e cales son os perigos que derivan das características intrínsecas de cada sustancia no momento que entran en contacto.

Para levar a cabo o devandito estudo, emprégase o software gratuito CRW4 proporcionado por AIChE, que elabora unha matriz onde se amosa o nivel de compatibilidade química recollendo informacións das fichas de seguridade e a clasificación NFPA, presentada no apartado 11.2.1. Clasificación segundo a norma NFPA 704 (57).

A modo de guía, as seguintes liñas explican os resultados da matriz conseguida na Figura 33 (Software CRW4).

- A cor verde coa letra Y indica que non se esperan perigos por unha posible reacción
- A cor amarela coa letra C indica que existe a posibilidade de que ocorran perigos en condicións determinadas.
- A cor amarela coas letras SR indican posibles reaccións de polimerizacións
- A cor vermella coa letra N indican posibles perigos por reacción química

NFPA				TFG Compatibility Chart	CYCLOHEXANOL	CYCLOHEXANONE	HYDROGEN	PHENOL, LIQUID
Health	Flammability	Instability	Special					
1	2	0		CYCLOHEXANOL				
1	2	0		CYCLOHEXANONE	C			
0	4	0		HYDROGEN	C	N		
4	2	0		PHENOL, LIQUID	Y	Y	Y	

Figura 32. Matriz de compatibilidade química. Fonte: Elaboración propia co Software CRW4

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Algúns comentarios sobre as mesturas que presentan problemas de compatibilidade química son:

- Ciclohexanona e ciclohexanol: os produtos de reacción poden ser explosivos ou sensibles a choques e fricción. Por outra banda, os produtos poden ser inestables a temperatura ambiente.
- Ciclohexanol e hidróxeno: produtos gasosos liberados poden provocar aumento da presión e ser inflamables.
- Ciclohexanona e hidróxeno: prodúcese unha liberación de calor xa que a reacción é exotérmica. A reacción pode ser violenta ou explosiva, os produtos resultantes inflamables, causar aumento de presión e ser inflamables. Poden producirse hidrocarburos como produto da reacción.

Nótese que a matriz está formada polos produtos en estado líquido (excepto o hidróxeno, obviamente), é dicir, o fenol, a ciclohexanona e o ciclohexanol tómanse líquidos cando no presente proxecto a reacción transcorre en fase gas. Polo que poden existir diferencias entre os resultados amosados na matriz en fase líquida e a reacción en fase gas actual.

### 11.3.2 Criterios termodinámicos

Englóbense 4 criterios diferentes que teñen en conta propiedades termodinámicas tales como as entalpías de combustión e descomposición para avaliar o nivel de risco arredor de 120 compostos (58).

Segundo o Criterio da entalpía de descomposición ( $\Delta H_d$ ), tres zonas de risco son identificadas na táboa 16.

Táboa 16. Criterio entalpía de descomposición . Fonte: (58)

<b>Entalpía de descomposición</b>	<b>Risco</b>
$\Delta H_d < -0,3$ kcal/g	Baixo
$-0,7 > \Delta H_d < -0,3$ kcal/g	Medio
$\Delta H_d < -0,7$ kcal/g	Alto

Segundo o Criterio de diferenza da entalpía de combustión e descomposición ( $\Delta H_c - \Delta H_d$ ), engádese a entalpía de combustión calculada cun exceso de oxíxeno para corrixir aquelas sustancias que non se descompoñen facilmente (58).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

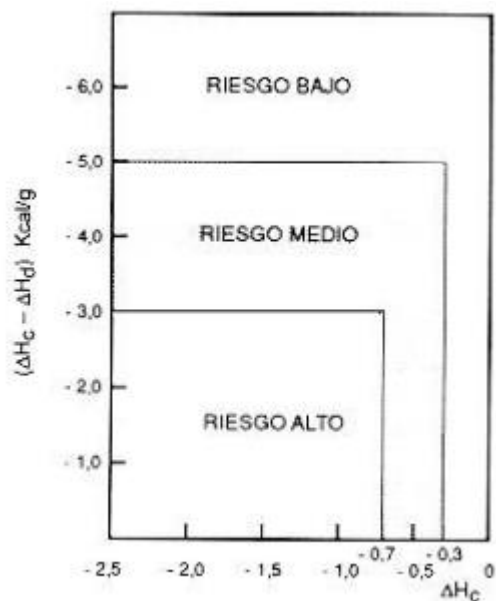


Figura 33. Criterio  $\Delta H_c - \Delta H_d$  en kcal/g. Fonte: (58)

O Criterio de Balance de osíxeno foi establecido por Lathropy Handrick para aquelas sustancias de fórmula molecular  $C_xH_yO_z$  segundo a ecuación (58).

$$B.O (\%) = \left( z - 2x - \frac{y}{2} \right) \frac{16}{M} 100 \quad (1)$$

O criterio de risco amósase na táboa 17.

Táboa 17. Criterio balance de osíxeno. Fonte: (58)

Balance de osíxeno	Risco
$-120 < B.O < 80$	Baixo
$-240 < B.O < -120$ e $80 < B.O < 160$	Medio
$B.O < -240$ e $B.O > 160$	Alto

Os resultados do balance de osíxeno preséntanse na Táboa 18.

Táboa 18. Avaliación Criterio balance de osíxeno: Elaboración propia

Substancia	B.O (%)	Risco
Fenol	-238,30	Medio
Ciclohexanona	-261,22	Alto
Ciclohexanol	-272,00	Alto

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Por último, o Criterio da “Y” que relaciona a entalpía de descomposición ( $\Delta H_d$ ), masa molecular (M) e número de átomos da molécula (n). Trátase dunha relación empírica que se mostra na ecuación 2 (58).

$$Y = 10 \frac{M}{n} \Delta H_d^2 \quad (2)$$

E segue o criterio da Y na táboa 19

Táboa 19. Criterio “Y”. Fonte: (58)

Y	Risco
Y<30	Baixo
30<Y<110	Medio
Y>110	Alto

### 11.4. Índice DOW de lume e explosión

Como método de análise e avaliación de riscos, un método moi frecuente é o Índice DOW. Ten como obxectivo estimar a perigosidade das principais unidades de proceso co fin de obter una medida do impacto para a instalación, no caso que ocorra algún incidente, tanto en termo materiais como económicos (59). Neste caso, soamente se obterán as distancias de alcance dunha explosión ás unidades que foron deseñadas no Anexo II. Cálculos Xustificativos, isto é, o reactor R-201 e a columna de destilación T-301.

A metodoloxía indicada na guía (59), emprega 4 factores para clasificar o risco: factor de material, factor de perigos xerais, factor de perigos especiais do proceso e factor de perigo da unidade de proceso.

Para obter o factor de material, existen compostos que xa están taboados na guía, outro en cambio, deben ser calculados segundo se indica na propia guía (59). Dos compostos que participan neste proceso, o único composto que non se atopa na táboa é a ciclohexanona.

Tendo en conta a clasificación NFPA do composto, empregando a figura 34, obtense o factor de material (FM) para a ciclohexanona, 10.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

	<sup>2</sup> $T_a$ °K	<830	<sup>4</sup> 830 - 935	<sup>3</sup> 935 - 1010	1010 - 1080	>1080
	Pico °C DTA/DSC	>400	305 - 400	215 - 305	125 to 215	<125
	NFPA 325M	$N_i = 0$	$N_i = 1$	$N_i = 2$	$N_i = 3$	$N_i = 4$
<sup>1</sup> No Combustible	$N_i = 0$	1	14	24	29	40
$T_i > 60^\circ\text{C}$	$N_i = 1$	4	14	24	29	40
$T_i > 37,8^\circ\text{C} < 60^\circ\text{C}$	$N_i = 2$	10	14	24	29	40
$T_i < 37,8^\circ\text{C}$ $T_e > 37,8^\circ\text{C}$	$N_i = 3$	16	16	24	29	40
$T_i < 37,8^\circ\text{C}$ $T_e < 37,8^\circ\text{C}$	$N_i = 4$	21	21	24	29	40

Figura 34. Guía para a determinación do factor de material. Fonte: (59)

Unha vez obtido todos os factores de material, calcúlase un valor medio para ambos equipos xa que se tratan de correntes de varios gases. No caso do reactor R-201, tómase a corrente de saída xa que ten un factor de material máis elevado ca entrada, e por tanto, é a situación máis restritiva. Os valores recóllense na táboa 20.

Táboa 20. Valores factores de materiais. Fonte: (59)

Factor de material	Valor
Hidróxeno	21
Fenol	4
Ciclohexanona	10
Ciclohexanol	4
R-201	7,54
T-301	7,90

Nas Figuras 35 e 36 amósase o modelo en forma de táboa onde se recollen os puntos a analizar e os factores resultantes. O factor de perigos xerais do proceso é a suma dos puntos A-F, o factor dos perigos especiais do proceso A-L e mediante o produto do factor de perigos xerais e o factor de perigos especiais do proceso obtense o factor de perigos da unidade de proceso. Finalmente, o índice de incendio e explosividade é o produto do factor de material e o factor de perigos da unidade de proceso (59).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

País: España	Localización : Huelva	Data
Planta de produción de ciclohexanona a partir da hidroxenación de fenol	Unidade de proceso : R-201	Junio 2020
<b>Materiais na unidade de proceso :</b> hidróxeno, ciclohexanona e ciclohexanol		
<b>Responsables:</b> Raúl Bonenfant Muñiz , Isamel Fernández Pazó		Materiais de referencia para o factor de material
<b>FACTOR DE MATERIAL (Ver táboa 1 ou Apéndices A e B)</b>		<b>7,54</b>
<b>1. Perigos xerais do proceso</b>	Intervalo para el factor de penalización	Factor de penalización utilizado
<b>Factor Base</b>	1,00	1,00
A. Reaccións químicas exotérmicas	0.30-1.25	0,30
B. Procesos endotérmicos	0.20-0.40	
C. Transferencia e manexo de materiais	0.25-1.05	
D. Unidades de proceso confinadas	0.25-0.90	
E. Accesos	0.20-0.35	
F. Drenaxes e control de derrames	0.25-0.50	
<b>Factor de perigos xerais do proceso (F<sub>1</sub>)</b>		<b>1,30</b>
<b>2. Peligros especiales del proceso</b>	Intervalo para o factor de penalización	Factor de penalización empregado
<b>Factor Base</b>	1,00	1,00
A. Substancias tóxicas	0.20-0.80	0,20
B. Operación a baleiro(< 500 mm Hg)	0,50	
C. Operación en ou preto do límite de inflamabilidade sin inertizar		
1. Tanques de almacenamento de líquidos inflamables	0,50	
2. Paradas de proceso ou erro de purga	0,30	0,30
2. Sempre no intervalo de inflamabilidade	0,80	
D. Explosións de po	0.25-2.00	
E. Presión de tarado 245 kPag		0,20
F. Baixa temperatura	0.20-0.30	
G. Cantidad de sustancia inflamable ou inestable: Cantidad: 1967,25 kg ΔH <sub>c</sub> = 5,7E-02 kcal/kg		
1. Líquidos ou gases en procesos		
2. Líquidos ou gases en almacenamento		2,00
3. Sólidos combustibles en almacenamento, po en proceso (ver Figura 5)		
H. Corrosión e erosión	0.10-0.75	0,20
I. Fugas-Xuntas e empaquetaduras	0.10-1.50	0,10
J. Uso de calentadores con llama (ver Figura 6)		
K. Sistema de intercambio térmico con aceite quente	0.15-1.15	
L. Equipo rotatorio	0,50	0,50
<b>Factor de perigos especiais do proceso (F<sub>2</sub>)</b>		<b>4,50</b>
<b>Factor de perigo da unidade de proceso (F<sub>1</sub> X F<sub>2</sub>)= F<sub>3</sub></b>		<b>5,85</b>
<b>Índice de Lume e Explosión (F<sub>3</sub>XMF=F&amp;EI)</b>		<b>44,11</b>

Figura 35. Índice DOW para o reactor R-201. Adaptación de (59)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

País: España	Localización : Huelva	Data
Planta de produción de ciclohexanona a partir da hidroxenación de fenol	Unidade de proceso : T-301	Junio 2020
Materiais na unidade de proceso : ciclohexanona e ciclohexanol		
Responsables: Raúl Bonenfant Muñiz , Isamel Fernández Pazó		Materiais de referencia para o factor de material
FACTOR DE MATERIAL (Ver táboa 1 ou Apéndices A e B)		7,9
<b>1. Perigos xerais do proceso</b>	Intervalo para o factor de penalización	Factor de penalización utilizado
<b>Factor Base</b>	1,00	1,00
A. Reaccións químicas exotérmicas	0.30-1.25	
B. Procesos endotérmicos	0.20-0.40	
C. Transferencia e manexo de materiais	0.25-1.05	
D. Unidades de proceso confinadas	0.25-0.90	
E. Accesos	0.20-0.35	
F. Drenaxes e control de derrames	0.25-0.50	
<b>Factor de perigos xerais do proceso (F<sub>1</sub>)</b>		1,00
<b>2. Peligros especiais del proceso</b>	Intervalo para o factor de penalización	Factor de penalización empregado
<b>Factor Base</b>	1,00	1,00
A. Substancias tóxicas	0.20-0.80	0,80
B. Operación a baleiro(< 500 mm Hg)	0,50	0,50
C. Operación en ou preto do límite de inflamabilidade sin inertizar		
1. Tanques de almacenamento de líquidos inflamables	0,50	
2. Paradas de proceso ou erro de purga	0,30	0,30
2. Sempre no intervalo de inflamabilidade	0,80	
D. Explosións de po	0.25-2.00	
E. Presión de tarado 109,9 kPag		0,18
F. Baixa temperatura	0.20-0.30	
G. Cantidad de sustancia inflamable ou inestable: Cantidad: 31017,01 kg ΔH <sub>v</sub> = 9,1E-02 kcal/kg		
1. Líquidos ou gases en procesos		
2. Líquidos ou gases en almacenamento		2,00
3. Sólidos combustibles en almacenamento, po en proceso (ver Figura 5)		
H. Corrosión e erosión	0.10-0.75	0,20
I. Fugas-Xuntas e empaquetaduras	0.10-1.50	0,10
J. Uso de calentadores con llama (ver Figura 6)		
K. Sistema de intercambio térmico con aceite quente	0.15-1.15	
L. Equipo rotatorio	0,50	0,50
<b>Factor de perigos especiais do proceso (F<sub>2</sub>)</b>		5,58
<b>Factor de perigo da unidade de proceso (F<sub>1</sub> X F<sub>2</sub>)= F<sub>3</sub></b>		5,58
<b>Índice de Lume e Explosión (F<sub>3</sub>XMF=F&amp;EI)</b>		44,08

Figura 36. Índice DOW para a columna de destilación T-301. Fonte: Adaptación de (59)

Os factores que se tiveron en conta na elaboración das Figuras 35 e 36 foron:

- Para o reactor R-201, a reacción é claramente exotérmica. A guía establece o valor de 0,3 para reaccións de hidroxenación (59).
- A toxicidade é maior no R-201 debido á presenza do fenol, tómase o valor 0,8 para o reactor e 0,2 para a columna de destilación (59).
- Establécese un valor de 0,3 en ambos equipos no punto C.2
- Para a presión de tarado da válvula de seguridade nos equipos, asúmese un valor da presión igual á corrente na que se atopan. Entrando na figura 2 presente na guía (59), obtéñense os valores para os dous equipos.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

- De maneira similar, o punto G.1 para líquidos ou gases en proceso. Coñecendo a cantidade de cada composto presente en cada equipo e a súa entalpía de combustión, emprégase a Figura 3 dispoñible na guía pertinente (59).
- Establécese un valor de corrosión de 0,2 en ambos equipos xa que, a pesares de non coñecer a velocidade de corrosión, terase en conta que si existe corrosión nos materiais de construción dos equipos (59).
- Posto que no deseño mecánico dos equipos se supón unha eficiencia de soldadura de xunta do 100%, asúmese o valor menos restritivo do rango, 0,1 (59).
- Existen equipos rotatorios tales como compresores cunha potencia superior ós 75 CV , asúmese o máximo valor de 0,5 (59).
- En canto á columna de destilación T-301, a operación é a baleiro polo que se penaliza con 0,5 (59).

Na Táboa 21 ilústrase a clasificación do perigo en función dos valores obtidos nas Figuras 35 e 36, obtidas empregando as disposicións recomendadas na guía técnica para o cálculo do índice de lume e explosión (Índice Dow) (59).

Táboa 21. Clasificación do perigo. Fonte: (59)

<b>Valores</b>	<b>Risco</b>
1-60	Lixeiro
61-96	Moderado
92-127	Intermedio
128-158	Intenso
Máis de 158	Grave

Na Figura 37 e na Táboa 22, pónense de manifesto os radios de explosión que quedarían afectados para os equipos obxecto de deseño deste proxecto.

Así, en función dos valores obtidos, reflíctese un valor correspondente ao radio de afectación no caso de acontecer unha explosión.

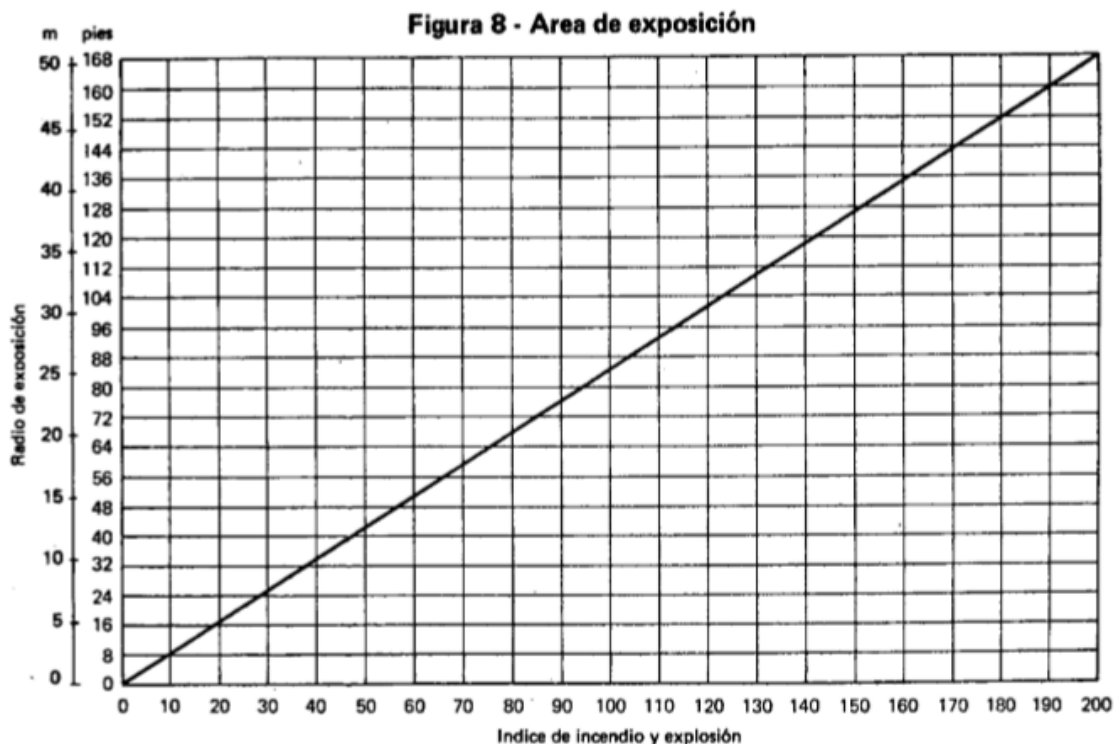


Figura 37. Área de explosión . Fonte: (59)

Táboa 22. Resumo Índice Dow. Fonte: Elaboración propia

<b>Equipos</b>	<b>IIE</b>	<b>Radio exposición (m)</b>	<b>Área de exposición (m<sup>2</sup>)</b>
R-201	44,11	10	314,16
T-301	44,08	12	452,39

### 11.5. Válvulas de alivio

Son dispositivos para controlar ou descargar a presión en equipos de proceso e protexer os equipos augas abaixo. Para o reactor R-201, instálase a válvula PSV-303 co propósito de evitar que a presión se eleve de maneira descontrolada, ó tratarse dunha reacción en fase gas con caudais elevados, e poder así liberar o exceso de presión no equipo.

#### 11.5.1. Dimensionamento PSV-303

O dimensionamento dos dispositivos de alivio seguen a norma API RP 520. Deséñase unha válvula individual para continxencias contra lume seguindo o criterio de que a presión de consigna sexa igual á máxima presión de operación (60).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 23. Criterios de deseño. Fonte: (60)

<b>Magnitude</b>	<b>Valor</b>
Presión de consigna (kPag)	245
Acumulación (%)	21
Máxima presión de operación permitida (kPag)	245
Sobrepresión (%)	121

En canto as características do material que se pretende descargar, tendo en conta o volume do leito así como a súa porosidade, obtense o caudal máxico a descargar pola válvula. A Táboa 24 recolle as propiedades da corrente de reacción no reactor R-201.

Táboa 24. Corrente de reacción. Fonte: Elaboración propia e Aspen Hysys

<b>Magnitude</b>	<b>Valor</b>
Temperatura (K)	453,15
Z	1
Peso molecular (kg/kmol)	49,51
$\gamma$ (Cp/Cv)	1,087
Caudal máxico (kg/h)	491,30

Ó tratarse dunha corrente en fase gas, débese comprobar se existe fluxo crítico.

$$\frac{P_c}{P_1} = \left( \frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (3)$$

Onde o resultado da ecuación 3 é 0,59.

A presión crítica,  $P_c$  en kPag, obtense empregando a ecuación 4:

$$P_c = SP \left( 1 + \frac{\text{sobrepresión}}{100} \right) \frac{P_c}{P_1} \quad (4)$$

Por tanto, desdexando  $P_1$  da ecuación 3 :  $P_c = 234,50$  kPaa e  $P_1 = 397,76$  kPaa.

Establécese un valor da contrapresión de 101,325 kPaa , polo que se ten fluxo crítico (60).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O obxectivo do dimensionamento é calcular a área descarga da válvula. Como se indicou, o procedemento atópase na norma API RP 520 pola cal se define a área para fluxo crítico en corrente gasosas na ecuación 5:

$$A = \frac{13,160 W}{C K_d P_1 K_b K_c} \sqrt{\frac{T Z}{M}} \quad (5)$$

Onde, W: caudal máxico (kg/h)

T: temperatura (K)

Z: factor de compresibilidade

M: peso molecular medio da corrente (kg/kmol)

C: coeficiente (obtense na Figura 38)

Os valores dos coeficientes  $K_d$ ,  $K_b$  e  $K_c$  son asignados segundo o punto 3.6.2.1.1 da norma API RP 520, ( $K_d=0,975$ ,  $K_b=1$  e  $K_c=1$ )

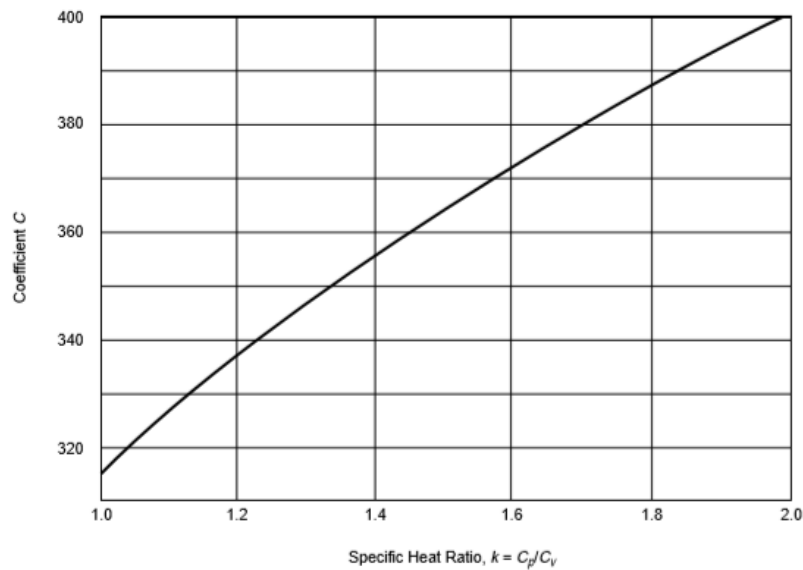


Figura 38. Cálculo coeficiente C. Fonte: (60)

A ecuación 5 devolve un valor para a área de  $163 \text{ mm}^2$  que é estandarizado segundo (API Std. 526) a unha válvula de  $198 \text{ mm}^2$  de tamaño F.

### 11.6. Distancias de seguridade

Neste apartado preséntanse dúas figuras que fan referencia ás distancias mínimas de separación que se deben establecer entre os diversos equipos e edificios.

Estas distancias corresponden ás facilitadas pola guía *GAP 2.5.2 : oil and chemical plant layout and spacing* (2015) (61).

Nas Figuras 39 e 40 preséntase a maneira de obter a distancias mínima de seguridade entre equipos (Figura 39) e entre áreas (Figura 40) (61).

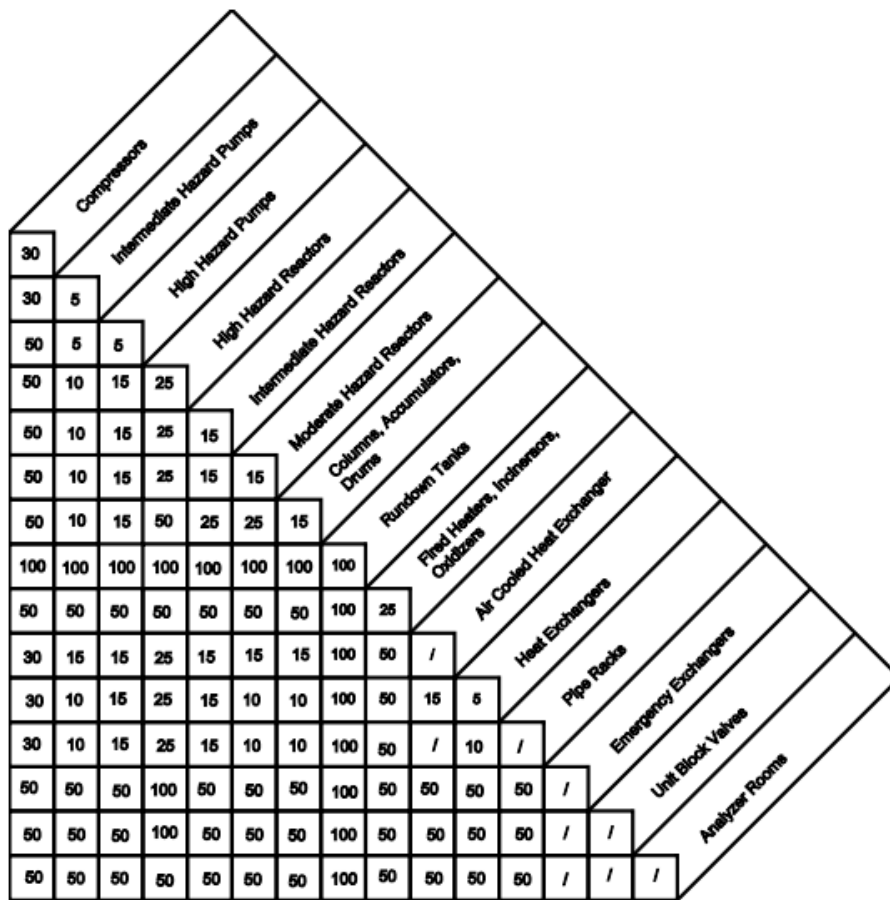


Figura 39. Distancias de seguridade entre equipos (ft) . Fonte: (61)

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

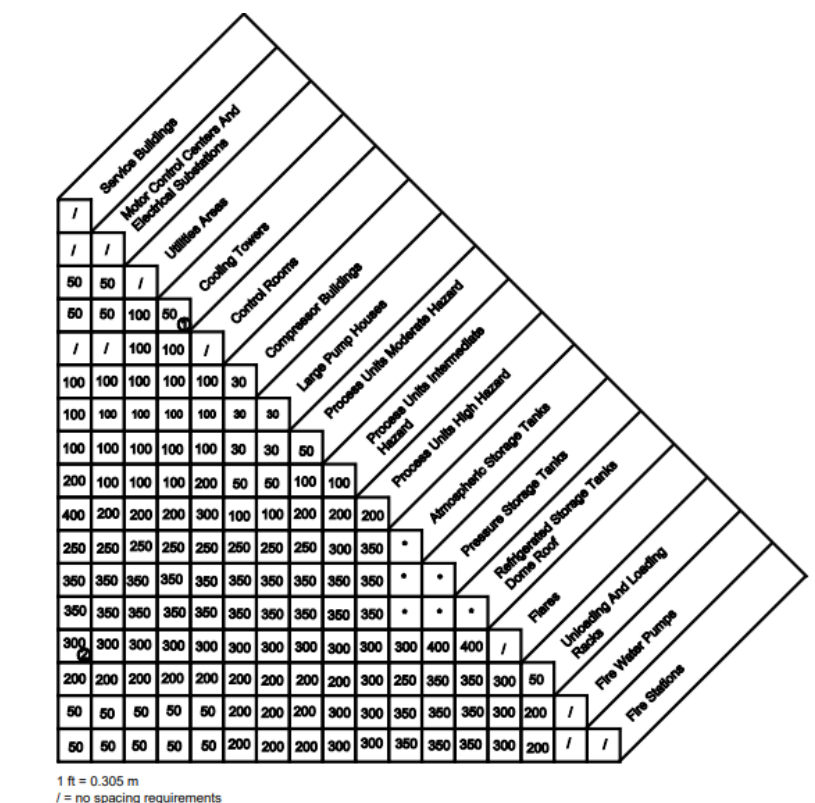


Figura 40. Distancias de seguridade entre zonas (ft) . Fonte: (61)

Na Táboa 25 ofrécese unha relación de distancias mínimas de seguridade que deben cumprir os equipos involucrados no proceso obxecto do presente proxecto. Desta maneira, unha vez determinados, serán de referencia para a elaboración do Documento II. Planos, facendo alusión ao plano número dous, o plano de implantación.

Táboa 25. Distancias mínimas de seguridade entre os equipos (ft, [m]). Fonte: (61)

	Compresores e bombas	Intercambiadores de calor	Reactores	Columna de destilación
Compresores e bombas	-	30 [9,14]	50 [15,24]	50 [15,24]
Intercambiadores de calor	30 [9,14]	-	25 [7,62]	10 [3,05]
Reactores perigo elevado	50 [15,24]	25 [7,62]	-	50 [15,24]
Columna de destilación	50 [15,24]	10 [3,05]	50 [15,24]	-

### 11.7. Escenario hipotético de fuga

No presente apartado preténdese ofrecer unha ilustración das consecuencias que tería unha fuga no tanque de almacenamento TK-102 que contén fenol.

Así, a través dos diversos cálculos, tomaranse finalmente decisións en materia de seguridade para poder prever o escenario onde a hipótese poida suceder.

O escenario proposto baséase na aparición dunha fuga no tanque á altura de un metro e medio dende a superficie do tanque. O furado será de 15 mm e estimarase o tempo necesario para descargar todo o fluído que se atopa por enriba da fuga.

Por outra banda, tamén se estudarán os caudais máxicos perdidos a diferentes intervalos de tempo, representándoas tamén de xeito gráfico.

Este escenario trata de proporcionar frescura e innovación ao presente apartado relativo a “Seguridade na operación”, poñendo de manifesto as consecuencias de que se pase de hipótese a realidade.

Previamente a todo o estudo, é necesario resaltar dúas expresións matemáticas que ilustran a variación da altura no tanque co tempo (ecuación 6), así como o caudal máxico que se está a perder polo orificio nun determinado tempo,  $t$  (ecuación 7). Estas expresións obtéñense logo de integrar a ecuación de continuidade co tempo, tomando en consideración o teorema de Bernouilli (62).

$$h_L = h_L^0 - C_0 \frac{A}{A_T} \sqrt{2 \left( \frac{P_g}{\rho} + g h_L^0 \right) * t} + \frac{g}{2} \left( C_0 \frac{A}{A_T} * t \right)^2 \quad (6)$$

$$\dot{m} = \rho C_0 A \sqrt{2 \left( \frac{P_g}{\rho} + g h_L^0 \right) - \frac{\rho g C_0^2 A^2}{A_T} * t} \quad (7)$$

Onde,  $h_L$ : altura do líquido no tanque a tempo  $t$  (m)

$h_L^0$ : altura do líquido no tanque no momento inicial (m)

$C_0$ : coeficiente asociado ao réxime do fluído (0,61 para fluídos turbulentos)

$A$ : área do orificio ( $m^2$ )

$A_T$ : área transversal do tanque ( $m^2$ )

$g$ : constante de gravitación universal (N/kg). 9,81 para os cálculos realizados

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

$P_g$ : presión no interior do depósito (Pa)

$t$ : instante de tempo (s)

$\rho$ : densidade do fluído ( $\text{kg/m}^3$ )

$\dot{m}$ : caudal máxico que se liberan a tempo  $t$  ( $\text{kg/s}$ )

Na Táboa 26 ilústranse os parámetros de deseño dos tanques así como o resto de valores que foron empregados nas ecuacións 6 e 7 previamente expostas.

Táboa 26. Valores empregados para a utilización das ecuacións 6 e 7. Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Valor
Altura tanque inicial (m)	10,0
Altura tanque trala fuga (m)	8,5
Densidade do fluído ( $\text{kg/m}^3$ )	1078
$P_g$ (Pa)	101325
$C_0$	0,61
Diámetro tanque (m)	24,4
Diámetro do furado da fuga (mm)	15,0

Na Táboa 27 reflíctense os valores obtidos a raíz de resolver as ecuacións 6 e 7.

Táboa 27. Variación da altura no tanque (m) e do caudal máxico perdido polo orificio ( $\text{kg/s}$ ) en función do tempo. Fonte: Elaboración propia

$t$ (s)	$h_L$ (m)	$m$ ( $\text{kg/s}$ )
0	10,000	2,278
300	9,999	2,278
600	9,997	2,278
1200	9,995	2,277
2400	9,989	2,277
3600	9,984	2,277
4800	9,978	2,276
6000	9,973	2,276
7200	9,967	2,276
8400	9,962	2,275
9600	9,957	2,275

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

*Táboa 27 continuación. Variación da altura no tanque (m) e do caudal máxico perdido polo orificio (kg/s) en función do tempo. Fonte: Elaboración propia*

t (s)	h <sub>L</sub> (m)	m (kg/s)
10800	9,951	2,275
12000	9,946	2,275
15000	9,932	2,274
18000	9,919	2,273
21000	9,905	2,272
24000	9,892	2,271
27000	9,878	2,271
30000	9,864	2,270
60000	9,729	2,262
90000	9,595	2,254
120000	9,461	2,246
150000	9,327	2,238
180000	9,194	2,230
210000	9,061	2,222
240000	8,929	2,215
270000	8,797	2,207
300000	8,666	2,199
330000	8,535	2,191
338131	8,500	2,189

Nótese que o tempo que toma o nivel do líquido para chegar aos 8,5 metros expostos previamente na hipótese é de 338131 segundos, equivalente a unhas 94 horas.

Así, nas Figuras 41 e 42, pode visualizarse a variación de ambos parámetros co tempo, tal e como se pon de manifesto na Táboa 26. Ámbalas Figuras foron elaboradas co software Microsoft Excel.

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

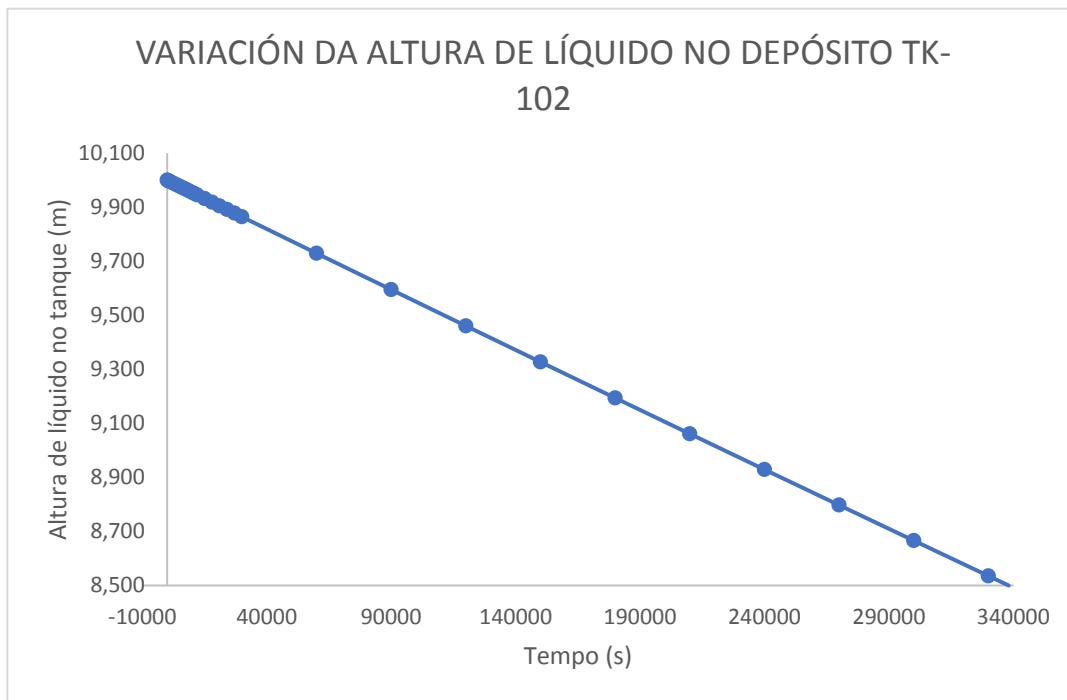


Figura 41. Variación da altura do líquido no tanque co tempo. Fonte: Elaboración propia con Microsoft Excel

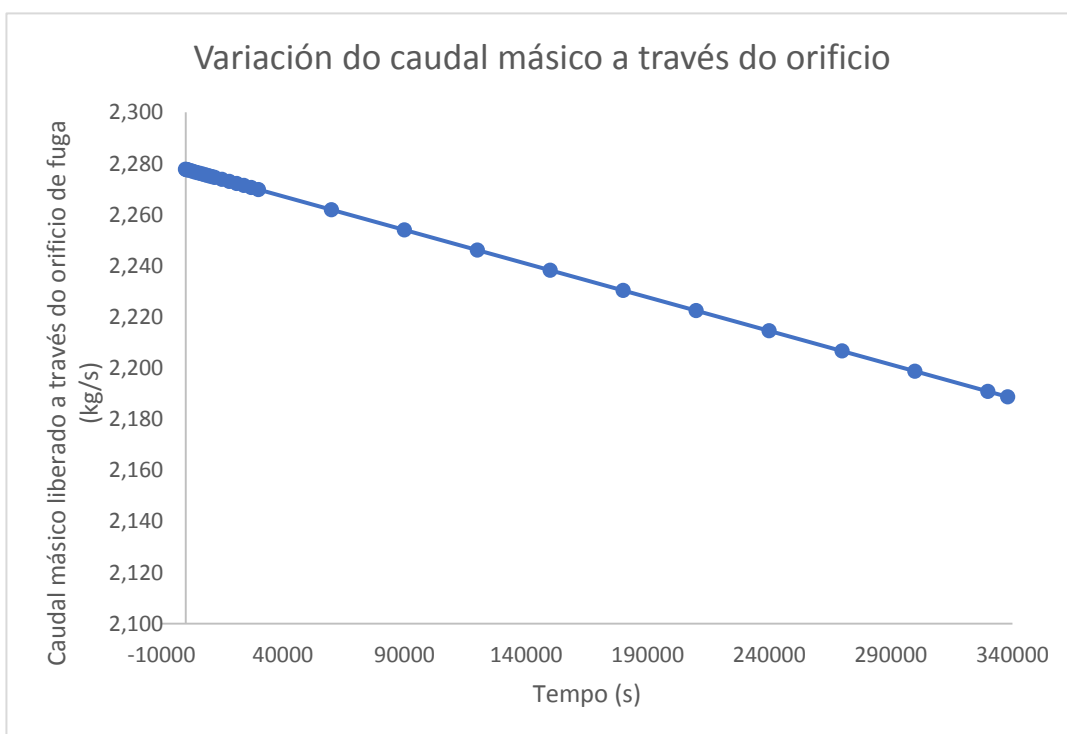


Figura 41. Variación do caudal máxico a través do orificio de fuga co tempo. Fonte: Elaboración propia con Microsoft Excel

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Así, tomando como referencia un tempo de 10 minutos, obtense que o caudal máxico liberado é practicamente o mesmo que ao inicio, polo que se considera como caudal medio o seu valor de 2,278 kg/s.

Conclúese por tanto, que durante dez minutos, equivalente a seiscentos segundos, a masa de materia prima perdida é de 1366,8 kg.

A conclusión que debe extraerse deste pequeno estudo non é outra que a concienciación do perigo que tería unha fuga de fenol, ademais do correspondente custo económico.

O fenol, como se veu expoñendo ao longo do presente proxecto, trátase dun composto con efectos altamente nocivos para a saúde e o medio ambiente. É por iso, que se debe deter ou controlar o derrame (62).

Unha das opcións que se pode expoñer sería a de barreiras, ou diques de contención, aínda que a conclusión dilucidada non evitaría os riscos contra o medio ambiente. A solución máis axeitada que adoitan os autores do presente proxecto será a de dispoñer dun tanque de contención para que se transvase o líquido fugado, sendo sinxelamente recuperábel a posteriori.

## 12. LEXISLACIÓN E CÓDIGOS DE DESEÑO EMPREGADOS

Neste apartado do Documento I. Memoria, expóranse as normativas vixentes que afectan ao presente proxecto. Dividiranse en función da temática e do ámbito da lei, ben sexa europea, nacional ou autonómica, cando sexa aplicable neste último caso.

Para a elaboración do marco legislativo actual, empréganse as fontes proporcionadas polo Ministerio para a transición ecolóxica e o reto demográfico (lexislación medioambiental), o Ministerio de industria, comercio e turismo (lexislación no eido da seguridade industrial), así como o Instituto nacional de seguridade e saúde no traballo (lexislación relativa á saúde e hixiene laboral, así como os riscos derivados da especificidade do traballo realizado).

### 12.1 Ámbito europeo

#### 12.1.1. Lexislación ambiental

- Directiva 2008/98/CE do Parlamento Europeo e do Consello, de 18 de novembro de 2008, sobre os residuos e pola que se derogan determinadas Directivas.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

- Directiva 2012/19/UE do Parlamento europeo e do Consello, de 4 de xullo de 2012, sobre residuos de aparatos eléctricos e electrónicos (RAEE).
- Directiva 2011/65/UE do Parlamento Europeo e do Consello, de 8 de xuño de 2011, sobre restricións ao emprego de determinadas substancias perigosas en trebellos eléctricos e electrónicos.
- Directiva (UE) 2018/850 do Parlamento Europeo e do Consello, de 30 de maio de 2018, pola que se modifica a Directiva 1999/31/CE relativa ao vertido de residuos.
- Directiva 2008/99/CE do Parlamento Europeo e do Consello, de 19 de novembro de 2008, relativa á protección do medio ambiente a través do Dereito penal.
- Directiva 2010/75/UE do Parlamento Europeo e do Consello, de 24 de novembro de 2010, sobre as emisións industriais (prevención e control integrados da contaminación).
- Directiva 2004/35/CE do Parlamento Europeo e do Consello, de 21 de abril de 2004, sobre responsabilidade medioambiental relacionada coa prevención e reparación de danos medioambientais.
- Directiva 2000/53/CE do Parlamento Europeo e do Consello, de 18 de setembro de 2000, relativa aos vehículos ao final da súa vida útil.
- Directiva 2008/50/CE do Parlamento Europeo e do Consello, de 21 de maio de 2008, relativa á calidade do ar ambiente e a unha atmosfera máis limpa en Europa.
- Directiva 2002/49/CE do Parlamento Europeo e do Consello, de 25 de xuño de 2002, sobre avaliación e xestión do ruído ambiental.

### 12.1.2. Lexislación en materia de seguridade industrial, saúde e hixiene laboral

- Directiva 2006/42/CE do Parlamento Europeo e do Consello de 17 de maio de 2006 relativa ás máquinas.
- Regulamento (UE) 2016/425 do Parlamento Europeo e do Consello, de 9 de marzo de 2016, relativo aos equipos de protección individual.
- Regulamento (CE) N° 1907/2006 do Parlamento Europeo e do Consello, de 18 de decembro de 2006, relativo ao rexistro, a avaliación, a autorización e a restrición de substancias e preparados químicos (REACH).
- Directiva 2018/18/UE do Parlamento Europeo e do Consello, de 4 de xullo de 2012, relativa ao control dos riscos inherentes aos accidentes graves nos que interveñan substancias perigosas.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

- Regulamento (CE) N° 1272/2008 do Parlamento Europeo e do Consello de 16 de decembro de 2008, sobre clasificación, etiquetado e envasado de substancias e mesturas.

### 12.2 Ámbito estatal

#### 12.2.1. Lexislación ambiental

- Lei 21/2013, de 9 de decembro, de Avaliación Ambiental.
- Real Decreto 679/2006, de 2 de xuño, pola que se regula a xestión dos aceites industriais usados.
- Real Decreto 110/2015, de 20 de febreiro, sobre residuos de trebellos eléctricos e electrónicos.
- Lei 5/2013, de 11 de xuño, pola que se modifican a Lei 16/2002, de 1 de xullo, de prevención e control integrados da contaminación e a Lei 22/2011, de 28 de xullo, de residuos e chans contaminados.
- Real Decreto 106/2008, de 1 de febreiro, pola que se regula a produción e xestión dos residuos de construción e demolición.
- Real Decreto 9/2005, de 14 de xaneiro, polo que se establece a relación de actividades potencialmente contaminantes do chan e os criterios e estándares para a declaración de chans contaminados.
- Lei 34/2007, de 15 de novembro, de calidade do aire e protección da atmosfera.
- Real Decreto 102/2011, de 28 de xaneiro, relativo á mellora da calidade do ar. É a transposición da directiva 2008/50/CE.
- Lei 37/2003, de 17 de novembro, do ruído.

#### 12.2.2. Lexislación en materia de seguridade industrial, saúde e hixiene laboral

- Real Decreto 1644/2008, de 10 de outubro, polo que se establecen as normas para a comercialización e posta en servizo das máquinas.
- Real Decreto 842/2002, de 2 de agosto, polo que se aproba o Regulamento Electrotécnico para Baixa Tensión (REBT).
- Real Decreto 337/2014, de 9 de maio, polo que se aproban o Regulamento sobre condicións técnicas e garantías de seguridade en instalacións eléctricas de alta tensión así como as súas Instrucións Técnicas Complementarias (ITC-RAT 01 a 23).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

- Real Decreto 656/2007, de 23 de xuño, polo que se aproba o regulamento de almacenamento de produtos químicos e as súas instrucións técnicas complementarias MIE APQ 0 a 10. Publicado no BOE o 25.07.17.
- Real Decreto 2060/2008, de 12 de decembro, polo que se aproba o regulamento de equipos a presión e as súas instrucións técnicas complementarias. Publicado no BOE o 05.02.09.
- Real Decreto 2267/2004, de 3 de decembro, pola que se aproba o regulamento de seguridade contra incendios nos establecementos industriais.
- Real Decreto 513/2017, de 22 de maio, polo que se aproba o regulamento de instalacións de protección contra incendios. Publicado no o BOE 12.06.17).
- Real Decreto 717/2010, de 28 de maio, polo que se modifican o R.D. 363/1995 e o R.D. 255/2003 polo que se aproban o regulamentos sobre clasificación, envasado e etiquetado de preparados perigosos.
- Lei 8/2010, de 31 de marzo, pola que se establece o réxime sancionador previsto nos regulamentos (CE) relativos ao rexistro, á avaliación, á autorización e á restrición das substancias e mesturas químicas (REACH) e sobre a clasificación, o etiquetado e o envasado de substancias e mesturas (CLP).
- Real Decreto 840/2015, de 21 de setembro, polo que se aproban medidas de control dos riscos inherentes aos accidentes graves nos que interveñan substancias perigosas.
- Real Decreto 1196/2003, de 19 de setembro, polo que se aproba a Directriz básica de protección civil para o control e planificación ante o risco de accidentes graves nos que interveñen substancias perigosas.
- Lei 31/1995, de 8 de novembro, de Prevención de Riscos Laborais.
- Real Decreto 231/2017, de 10 de marzo, polo que se regula o establecemento dun sistema de redución das cotizacións por contingencias profesionais ás empresas que tiveren diminuído a sinistralidade laboral de xeito notorio.
- Real Decreto 486/1997, de 14 de abril, polo que se establecen as disposicións mínimas de seguridade e saúde nos lugares de traballo.
- Real Decreto 487/1997, de 14 de abril, sobre disposicións mínimas de seguridade e saúde relativas á manipulación manual de cargas que deriven en riscos, en particular dorsolumbares, para os traballadores.
- Real Decreto 488/1997, de 14 de abril, sobre disposicións mínimas de seguridade e saúde relativas ao traballo con equipos que inclúen pantallas de visualización.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

- Real Decreto 665/1997, de 12 de maio, sobre a protección dos traballadores contra os riscos relacionados coa exposición a axentes canceríxenos durante o traballo.
- Real Decreto 773/1997, de 30 de maio, sobre disposicións mínimas de seguridade e saúde relativas á utilización polos traballadores de equipos de protección individual (EPI).
- Real Decreto 1627/1997, de 24 de outubro, polo que se establecen disposicións mínimas de seguridade saúde en obras de construción.
- Real Decreto 374/2001, de 6 de abril, sobre a protección da saúde e seguridade dos traballadores contra os riscos relacionados cos axentes químicos durante o traballo.
- Real Decreto 614/2001, de 8 de xuño, sobre disposicións mínimas para a protección da saúde e seguridade dos traballadores fronte ao risco eléctrico.
- Real Decreto 1311/2005, de 4 de novembro, sobre a protección da saúde e a seguridade dos traballadores fronte aos riscos derivados ou que poidan derivarse da exposición a vibracións mecánicas.
- Real Decreto 286/2006, de 10 de marzo, sobre a protección da saúde e a seguridade dos traballadores contra os riscos relacionados coa exposición ao ruído.

### 12.3 Ámbito autonómico

#### 12.3.1. Lexislación ambiental da autonomía andaluza

- Decreto 6/2012, de 17 de xaneiro, pola que se aproba o regulamento de protección contra a contaminación acústica en Andalucía.
- Lei 7/1994, de 18 de maio, de protección ambiental.

#### 12.3.2. Lexislación en materia seguridade industrial, saúde e hixiene laboral

- Decreto 122/1999, de 18 de maio, pola que se aproba o regulamento que regula o rexistro de establecementos industriais de Andalucía.
- Orde de 17 de maio de 2007, pola que se regula o réxime de inspeccións periódicas das instalacións eléctricas de baixa tensión.
- Decreto 24/2008, de 5 de febreiro, polo que se aproban os estatutos do Instituto Andaluz de prevención de riscos laborais.

#### 12.4 Códigos de deseño e outras normas

- Código ASME BPV Sección II, parte D
- Código ASME BPV Sección VIII, Div.1
- Código ASME B.31.3. Tubaxes de proceso
- API RP 520. Válvulas de alivio de presión
- API 650. Dimensionamento de tanques de almacenamento
- ISA-5.1-1984 (R1992). Simbología de instrumentación
- TEMA. Intercambiadores de calor
- Código Técnico de Edificación (CTE)
- ISO 690:2015. Referencias
- NTP 876: ATEX
- AIChE (American Institute of Chemical Engineers)

### 13. BIBLIOGRAFÍA

1. MUSSER, M. *Cyclohexanol and cyclohexanone*. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Wiley-VCH, 2005.
2. National Institute of Standards and Technology (NIST). *Cyclohexanone* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?Name=cyclohexanone&Units=SI>
3. CARLROTH. *FDS da ciclohexanona* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://www.carlroth.com/medias/SDB-CP27-MT-EN.pdf?context=bWFzdGVyfHNIY3VyaXR5RGF0YXNoZWV0c3wyMjlyMjF8YXBwbGljYXRpb24vcGRmfHNIY3VyaXR5RGF0YXNoZWV0cy9oNTEvaDY1Lzgz5Njk2MjQyNTY1NDIucGRmfDA1OWVjOTYwNzliODFhMDE5OWYxN2UzNmU3M2E3Y2E5NzhkODY2NDhkZTE4NDdkNGZjNTc0YmM4MGU0ODIyYzM>
4. GLOBAL MARKET INSIGHTS. *Cyclohexanone Market Size, Industry Analysis Report, Regional Outlook, Application Development Potential, Price Trends, Competitive Market Share & Forecast, 2019 – 2025* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://www.gminsights.com/industry-analysis/cyclohexanone-market>
5. FUTURE MARKET INSIGHTS. *Cyclohexanone Market* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://www.futuremarketinsights.com/reports/cyclohexanone-market>
6. INDUSTRYARC. *Cyclohexanone market – Forecast (2020 – 2025)* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://www.industryarc.com/Report/15909/cyclohexanone-market.html>
7. OBSERVATORY OF ECONOMIC COMPLEXITY (OEC). *Cyclohexanone and methylcyclohexanones* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://oec.world/en/profile/hs92/291422/>
8. OBSERVATORY OF ECONOMIC COMPLEXITY (OEC). *Which countries export Cyclohexanone and methylcyclohexanones (2017)?* [en liña]. [Consultado Marzo 2020].

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Dispoñible en:

[https://oec.world/en/visualize/geo\\_map/hs92/export/show/all/291422/2017/](https://oec.world/en/visualize/geo_map/hs92/export/show/all/291422/2017/)

9. E3. *La demanda de caprolactama dispara la facturación de UBE a 391 millones* [en liña]. Publicado no ano 2018 [Consultado Marzo 2020]. Dispoñible en: <https://economia3.com/2018/10/02/158480-caprolactama-facturacion-ube/>

10. OBSERVATORY OF ECONOMIC COMPLEXITY (OEC). *Which countries import Cyclohexanone and methylcyclohexanones (2017)?* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Dispoñible en:

[https://oec.world/en/visualize/geo\\_map/hs92/import/show/all/291422/2017/](https://oec.world/en/visualize/geo_map/hs92/import/show/all/291422/2017/)

11. HUANG, T. (ICIS). *Price and market trends: Nylon a rare bright spot for Asia phenol amid glut* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Dispoñible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2016/12/07/10060956/price-and-market-trends-nylon-a-rare-bright-spot-for-asia-phenol-amid-glut/>

12. ZHANG, F. (ICIS). *China's Jiangsu Weiming to start cyclohexanone plant in Q1'18* [en liña]. Publicado ano 2017 [Consultado Marzo 2020]. Dispoñible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2017/08/21/10135402/china-s-jiangsu-weiming-to-start-up-cyclohexanone-plant-in-q1-18/>

13. PUBCHEM. *Cyclohexanol*. National Center for Biotechnology Information [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Dispoñible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/7966>

14. CARLROTH. Ficha de Seguridade do ciclohexanol [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Dispoñible en: <https://www.carlroth.com/medias/SDB-7756-IE-EN.pdf?context=bWFzdGVyfHNIY3VyaXR5RGF0YXNoZWV0c3wyNTQwODI8YXBwbGljYXRpb24vcGRmfHNIY3VyaXR5RGF0YXNoZWV0cy9oNDgvaGRjLzgz5Nzl2MDk4MTQ1NTgucGRmfGVlMTQzYzg5NDMxYjc2ZTYzYjMxZjUzOGIyZGM0YjkwOTc0M2ZlZjA1NDczYmYwYTlwZDc3ZTRmODI3YTNjMGQ>

Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

15. REPORTSWEB. *Global Cyclohexanol Market Research Report 2020 Segment by Key Companies Countries Types Applications and Forecast 2021 to 2026* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://www.reportsweb.com/reports/global-cyclohexanol-market-research-report-2020-segment-by-key-companies-countries-types-applications-and-forecast-2021-to-2026>
  
16. OBSERVATORY OF ECONOMIC COMPLEXITY (OEC). *Which countries export Cyclohexanol, methylcyclohexanol and dimethylcyclohexanol (2017)?* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: [https://oec.world/en/visualize/geo\\_map/hs92/export/show/all/6290612/2017/](https://oec.world/en/visualize/geo_map/hs92/export/show/all/6290612/2017/)
  
17. OBSERVATORY OF ECONOMIC COMPLEXITY (OEC). *Cyclohexanol, methylecyclohexanol and dimethylcyclohexanol* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://oec.world/en/profile/hs92/290612/#Exporters>
  
18. WAN, H. ICIS. *Asahi Kasei resumes regular cyclohexanol output* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/10/19/9071337/asahi-kasei-resumes-regular-cyclohexanol-output/>
  
19. FLEGE, H. et al. Phenol derivatives. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Wiley-VCH, 2002. DOI: 10.1002/14356007.a19\_313
  
20. ECHA. *Phenol* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Disponible en: <https://echa.europa.eu/es/substance-information/-/substanceinfo/100.003.30>
  
21. INDUSTRY GREENER. *Phenol* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: <http://www.greener-industry.org.uk/pages/phenol/2PhenolUses.htm>
  
22. CEPESA. *Ficha técnica do fenol* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: [https://chemicals.cepsa.com/stfls/chemicals/Ficheros/Fenol\\_ficha\\_tecnica\\_cepsa\\_ES.pdf](https://chemicals.cepsa.com/stfls/chemicals/Ficheros/Fenol_ficha_tecnica_cepsa_ES.pdf)

Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

23. CEPSA. *Ficha de seguridade do fenol* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en:

[https://www.cepsa.es/portal/site/comercial/template.BINARYPORTLET/Fichas\\_De\\_Seguridade/resource.process/?javax.portlet.tpst=5892cfaa9a3d72d589a39feaa810e1ca&javax.portlet.prp\\_5892cfaa9a3d72d589a39feaa810e1ca=compania%3D%26enviar%3Dtrue%26action%3Dpdf&javax](https://www.cepsa.es/portal/site/comercial/template.BINARYPORTLET/Fichas_De_Seguridade/resource.process/?javax.portlet.tpst=5892cfaa9a3d72d589a39feaa810e1ca&javax.portlet.prp_5892cfaa9a3d72d589a39feaa810e1ca=compania%3D%26enviar%3Dtrue%26action%3Dpdf&javax)

24. OBSERVATORY OF ECONOMIC COMPLEXITY (OEC). *Phenols* [en liña]. [Consultado Marzo 2020]. Dispoñible en:

<https://oec.world/en/profile/hs92/2907/>

25. IMARC. *Phenol Market: Global Industry Trends, Share, Size, Growth, Opportunity and Forecast 2019-2024* [en liña]. [Consultado en Marzo 2020]. Dispoñible en: <https://www.imarcgroup.com/phenol-technical-material-market-report-3>

26. HÄUSSINGER, P., R. LOHMÜLLER e A. WATSON. *Hydrogen*. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Wiley-VCH Verlag GmbH, 2002

27. PUBCHEM. *Hydrogen* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Hydrogen>

28. LINDE GAS. *Ficha de Seguridade do hidróxeno* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en:

[https://www.lindegas.es/es/images/10021694%20H2%20v2.2%20ES\\_tcm316-89784.pdf](https://www.lindegas.es/es/images/10021694%20H2%20v2.2%20ES_tcm316-89784.pdf)

29. PERSISTENCE MARKET RESEARCH. *Industrial Hydrogen Market: U.S., Europe and Asia Industry Analysis & Forecast 2016-2024*. 2020.

30. OBSERVATORY OF ECONOMIC COMPLEXITY (OEC). *Hydrogen* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en:

<https://oec.world/en/profile/hs92/2804/#Exporters>

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

31. OBSERVATORY OF ECONOMIC COMPLEXITY (OEC). *Which countries export Hydrogen? (2017)* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en: [https://oec.world/en/visualize/geo\\_map/hs92/export/show/all/2804/2017/](https://oec.world/en/visualize/geo_map/hs92/export/show/all/2804/2017/).
32. KEANE, C. E MARK A. *Catalyst support effects: gas-phase hydrogenation of phenol over palladium*. Elsevier, 2013. DOI:10.1016/S0021-9797(03)00171-1.
33. DIMIAN, A. e C. SORIN. *Chemical Process Design*. Ámsterdam : Wiley, 2008. ISBN: 9783527314934.
34. ZHOU H. et. al. *Selective phenol hydrogenation to cyclohexanone over alkali-metal-promoted Pd/TiO<sub>2</sub> in aqueous media*. Royal Society of Chemistry, 2017. DOI: 10.1039/c7gc01318c.
35. SINNOT, R. e G. TOWLER. *Chemical Engineering Design*. Burlington : Elsevier, 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1.
36. AIQBE. Asociación de Industrias Químicas, Básicas e Enerxéticas de Huelva [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en: <http://aiqbe.es/aiqbe>.
37. AIQBE. *17 empresas asociadas y 18 plantas de producción forman AIQBE* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en: <http://aiqbe.es/asociados-aiqbe>.
38. MINISTERIO DE FACENDA. *Sede electrónica do catastro* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en: <https://www1.sedecatastro.gob.es>.
39. AEMET. *Axencia Estatal de Meteoroloxía* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en: <http://www.aemet.es/es/serviciosclimaticos/datosclimatologicos/valoresclimatologicos?l=4642E&k=undefined>.
40. DATOS CLIMA. *Base de datos meteorolóxica* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en: <https://datosclima.es/Aemethistorico/Vientostad.php>.

41. IGN. Instituto Xeográfico Nacional [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: <https://www.ign.es/web/ign/portal/mapas-sismicidad>.
42. SERVICIO DE PREVENCIÓN DE RIESGOS LABORALES DE LA UPV. *Manejo del fenol, derivados fenólicos y sus residuos* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: [https://www.sprl.upv.es/IOP\\_SQ\\_33.htm](https://www.sprl.upv.es/IOP_SQ_33.htm).
43. BURGNET, M. et al. *Vapor-Liquid Equilibria of Cyclohexanone + Cyclohexanol and Cyclohexanone + 2-Methylcyclohexanone Systems at 4.00 and 26.66 kPa*. 38. pp 328-331. Journal of Chemical Engineering Data, 1993.
44. CEPSA ESPAÑA. *Palos de la Frontera* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: <https://chemicals.cepsa.com/es/plantas/palos-de-la-frontera>.
45. CARBUROS METÁLICOS. *Quienes somos* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: <http://www.carbueros.com/Company/about-us.aspx>.
46. AIR LIQUIDE. *¿Qué hacemos?* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: <https://industrial.airliquide.es/quienes-somos/que-hacemos>.
47. LINDE WORLDWIDE. *Our locations* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: <https://www.linde-worldwide.com/en/index.html>.
48. OLIVARES, R. *El incendio en la planta de UBE deja la fabricación de nylon en niveles mínimos* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: <https://castellonplaza.com/el-incendio-en-la-planta-de-ube-deja-la-fabricacion-de-nylon-en-niveles-minimos>.
49. TURTON, R. et al. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 3ª ed. New Jersey : Prentice Hall, 2009. ISBN: 0-13-512966-4.
50. ECHEMI. *Phenol Price Analysis* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Disponible en: [https://www.echemi.com/productsInformation/pid\\_Seven3078-phenol.html](https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Seven3078-phenol.html).

51. AMMONIA ENERGY. *The cost of hydrogen: Platts launches Hydrogen Price Assessment* [en liña]. [Consultado Abril 2020]. Dispoñible en:

<https://www.ammoniaenergy.org/articles/the-cost-of-hydrogen-platts-launches-hydrogen-price-assessment/>.

52. INDIAMART. *Cyclohexanone price* [en liña]. [Consultado Maio 2020]. Dispoñible en: <https://dir.indiamart.com/impcat/cyclohexanone.html>.

53. STEPHANOPOULOS, G. *Chemical Process Control. An introduction to theory and practice*. Englewood Cliffs, NJ : Prentice Hall, 1984. ISBN: 0-13-128629-3.

54. SVRCEK, W., D. MAHONEY e B. YOUNG. *A Real-Time Approach to Process Control*. 3ª ed. West Sussex : John Wiley & Sons, 2014. ISBN: 978-1-119-99387-2.

55. GOBERNO DE ESPAÑA. Real Decreto 840/2015, de 21 de setembro, pola que se aproban medidas de control dos riscos inherentes aos accidentes graves nos que interveñan substancias perigosas (Seveso III)

56. DIARIO OFICIAL DA UNIÓN EUROPEA. Regulamento (CE) N° 1272/2008 do Parlamento Europeo e do Consello de 16 de decembro de 2008, sobre clasificación, etiquetado e envasado de substancias e mesturas.

57. NATIONAL FIRE PROTECTION ASSOCIATION. NFPA 704. *Standard system for the Identification of the Hazards of Materials for Emergency Response*. 2017.

58. MINISTERIO DE TRABAJO E ASUNTOS SOCIAIS. Instituto de Seguridade e Hixiene no Traballo. *Norma NTP 302: Reactividad e inestabilidad química: análisis termodinámico preliminar*.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

59. Instituto Nacional de Seguridade e Hixieno no Traballo. Centro de Investigación e asistencia técnica. *Índice DOW de lume e explosión: guía para la clasificación de riesgos*. 5ª edición. Barcelona, 2006

60. AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE. API RP 520: *Sizing, Selection, and Installation of Pressure-Relieving Devices in Refineries*.

61. GAP 2.5.2 : oil and chemical plant layout and spacing (2015).

**ANEXO I:**  
**BALANCES DE**  
**MATERIA E ENERXÍA**

## Índice Anexo I. Balances de materia e enerxía

1. BALANCES DE MATERIA E ENERXÍA.....	3
1.1. Balances de materia.....	3
1.1.1. Balance global .....	4
1.1.2. Reactor R-201 .....	5
1.1.3. Reactor R-301 .....	5
1.1.4. Mesturador M-101 .....	6
1.1.5. Condensador parcial E-202 .....	7
1.1.6. Condensador parcial E-302 .....	7
1.1.7. Columna de destilación a baleiro T-301 .....	8
1.2. Balances de enerxía .....	9
1.2.1. Válvulas .....	10
1.2.2. Mesturador.....	12
1.2.3. Bombas .....	12
1.2.4. Compresores .....	14
1.2.5. Intercambiadores de calor.....	15
1.2.6. Reactores .....	23
2. BIBLIOGRAFÍA .....	26

## 1. BALANCES DE MATERIA E ENERXÍA

No presente Anexo I do Traballo Fin de Grao trataranse os balances de materia e enerxía relativos ao proceso de produción de ciclohexanona a partir de fenol.

Nel, comprobaranse que os balances unitarios dos equipos pechan correctamente e que o balance de materia global tamén o fai, mostrando consistencia e coherencia.

Na Táboa 1 móstranse os pesos moleculares (kg/kmol) dos catro compoñentes que interveñen no proceso, así como os valores empregados por razóns de facilidade de cálculo.

Cabe destacar que lixeiras variacións entre os devanditos valores en función da bibliografía empregada, poderían supoñer lixeiras variacións no peche dos balances, aínda que son variacións ínfimas e a orixe das mesmas quedaría totalmente identificada e xustificada.

Táboa 1. Pesos moleculares dos compoñentes involucrados no proceso. Fonte: PubChem

Compoñente	Peso molecular (kg/kmol)	Peso molecular a efectos de cálculo (kg/kmol)
Fenol	94,110	94,000
Hidróxeno	2,016	2,000
Ciclohexanona	98,140	98,000
Ciclohexanol	100,160	100,000

### 1.1. Balances de materia

O principio de conservación da masa é o que se emprega para a resolución deste tipo de balances. Na ecuación 1 móstrase a expresión xeral e na ecuación 2 a simplificación ao operar en estado estacionario, isto é, cando non existe acumulación. Este principio é aplicable a calquera proceso (1).

$$S - E + X = A \quad (1)$$

Onde, S: fluxo máxico de saída de material (kg/h)

E: fluxo máxico de entrada de material (kg/h)

X: fluxo máxico xeración de material (kg/h)

A: fluxo máxico de acumulación de material (kg/h)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

En estado estacionario non existiría acumulación, reducindo o termo a cero. Por outra banda, se tampouco existe reacción química no equipo analizado, o balance de materia reduciríase ao mostrado na ecuación 2.

$$S = E \quad (2)$$

Onde, S: fluxo máxico de saída de material (kg/h)

E: fluxo máxico de entrada de material (kg/h)

Cabe resaltar que os balances de materia mostrados no presenta Anexo I soamente inclúen aqueles nos que se produce algún tipo de variación na materia, non sendo así en intercambiadores de calor, compresores, bombas centrífugas e válvulas de expansión. Por tanto, os balances mostrados farán referencia ao proceso en global en primeiro lugar, seguido polos reactores R-201 e R-301, mesturador M-101 e puntos de mestura, condensadores parciais E-202 e E-302, rematando coa columna de destilación T-301.

### 1.1.1. Balance global

Na Táboa 2 preséntanse as correntes de entrada e de saída, resaltando que a diferenza entre ambas é nula, posto que a materia que entra ao proceso debe ser a mesma que a que sae do mesmo.

Táboa 2. Balance de materia global. Fonte: elaboración propia

	Entrada (kg/h)		Saída (kg/h)
	1	4	24
Fenol	0,00	18257,65	0,00
Hidróxeno	778,86	0,00	0,00
Ciclohexanona	0,00	0,00	18939,39
Ciclohexanol	0,00	0,00	97,12
	Suma		Suma
	19036,51		19036,51

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 1.1.2. Reactor R-201

A reacción que se produce no reactor R-201 é a especificada no apartado 5.1. do Documento I: Memoria do presente proxecto.

Na Táboa 3 establécense as correntes de entrada e de saída, tendo en conta a conversión total do fenol tal e como se sustenta na bibliografía empregada e se pon de manifesto no Anexo II Parte I da Memoria relativa ao deseño do reactor R-201.

Táboa 3. Balance de materia reactor R-201. Fonte: Elaboración propia

	Entrada (kg/h)	Saída (kg/h)
	7	8
Fenol	18257,65	0,00
Hidróxeno	1359,61	407,88
Ciclohexanona	0,00	10469,01
Ciclohexanol	0,00	8740,36
	Suma	Suma
	19627,26	19627,26

As posibles diferencias débense á aproximación ao segundo decimal, pero o balance pecha con diferenza nula entre a entrada e a saída.

### 1.1.3. Reactor R-301

Na Táboa 4 móstrase o balance ao presente equipo tendo en conta un 80% de conversión con respecto ao ciclohexanol.

Táboa 4. Balance de materia ao reactor R-301. Fonte: elaboración propia

	Entrada (kg/h)	Saída (kg/h)
	13	14
Fenol	0,00	0,00
Hidróxeno	0,00	172,86
Ciclohexanona	1176,44	9646,82
Ciclohexanol	10804,06	2160,81
	Suma	Suma
	11980,50	11980,50

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 1.1.4. Mesturador M-101

Na Táboa 5 representáanse as correntes de entrada e a de saída do mesturador M-101, verificando o peche do balance.

Táboa 5. Balance de materia do mesturador M-101. Fonte: elaboración propia

	Entrada (kg/h)		Saída (kg/h)
	3	5	6
Fenol	0,00	18257,65	18257,65
Hidróxeno	1359,61	0,00	1359,61
Ciclohexanona	0,00	0,00	0,00
Ciclohexanol	0,00	0,00	0,00
	Suma		Suma
	19617,26		19617,26

Na Táboa 6 e Táboa 7 móstranse os balances de materia dos puntos de mestura máis representativos do proceso, o do reciclado de hidróxeno e o previo á torre de destilación T-301. As variacións na centésima débense, novamente, a aproximacións, non prexudicando en ningún caso o peche do balance se todos os decimais fosen tidos en conta.

Táboa 6. Balance de materia ao punto de mestura na alimentación de hidróxeno. Fonte: elaboración propia

	Entrada (kg/h)		Saída (kg/h)
	2	18	3
Fenol	0,00	0,00	0,00
Hidróxeno	778,86	580,74	1359,61
Ciclohexanona	0,00	0,00	0,00
Ciclohexanol	0,00	0,00	0,00
	Suma		Suma
	1359,61		1359,61

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 7. Balance de materia ao punto de mestura previo á alimentación da torre T-301. Fonte: elaboración propia

	Entrada (kg/h)		Saída (kg/h)
	12	15	19
Fenol	0,00	0,00	0,00
Hidróxeno	0,00	0,00	0,00
Ciclohexanona	10469,01	9646,82	20115,84
Ciclohexanol	8740,36	2160,81	10901,17
	Suma		Suma
	31017,01		31017,01

### 1.1.5. Condensador parcial E-202

Na Táboa 8 móstrase o balance de materia correspondente ao condensador parcial E-202, empregado para separar o hidróxeno dos compoñentes formados no reactor R-201.

Táboa 8. Balance de materia ao condensador parcial E-202. Fonte: elaboración propia

	Entrada (kg/h)		Saída (kg/h)
	8	9	10
Fenol	0,00	0,00	0,00
Hidróxeno	407,88	0,00	407,88
Ciclohexanona	10469,01	10469,01	0,00
Ciclohexanol	8740,36	8740,36	0,00
	Suma		Suma
	19627,26		19627,26

### 1.1.6. Condensador parcial E-302

Na Táboa 9 atópase o balance de materia correspondente ao condensador parcial E-302, emprazado á saída do reactor R-302 cuxa idea de operación é análoga á do condensador parcial E-202, e non é outra que separar o hidróxeno desprendido na reacción de deshidroxenación catalítica do ciclohexanol para dar ciclohexanona.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 9. Balance de materia ao condensador parcial E-302. Fonte: elaboración propia

	Entrada (kg/h)		Saída (kg/h)	
	14	15	16	
Fenol	0,00	0,00	0,00	
Hidróxeno	172,86	0,00	172,86	
Ciclohexanona	9646,82	9646,82	0,00	
Ciclohexanol	2160,81	2160,81	0,00	
	Suma		Suma	
	11980,50		11980,50	

### 1.1.7. Columna de destilación a baleiro T-301

Un dos equipos imprescindíbeis e que gozan de maior importancia dentro do proceso, pola súa presión de operación, a baleiro, constituíndo unha variable clave na óptima separación da mestura de OL e ONA. Este feito fundaméntase na proximidade entre as súas volatilidades, de xeito que o equilibrio está moi próximo entre ambos.

Na Táboa 10 móstrase o balance de materia ao presente equipo, comprobándose o seu correcto peche, con diferenza nula entre a entrada e a saída. Resaltar que a saída que se produce por cabezas, corrente 21, é a corrente que cumpre as condicións de calidade esixidas de ciclohexanona, así como a produción anual para o cal a planta foi deseñada.

Táboa 10. Balance de materia da T-301. Fonte: elaboración propia

	Entrada (kg/h)		Saída (kg/h)	
	20	21	25	
Fenol	0,00	0,00	0,00	
Hidróxeno	0,00	0,00	0,00	
Ciclohexanona	20115,84	18939,39	1176,44	
Ciclohexanol	10901,17	97,12	10804,06	
	Suma		Suma	
	31017,01		31017,01	

Novamente, as variacións na centésima débense á aproximación ao segundo decimal, non comprometendo de ningún xeito o correcto cálculo do balance, sendo a coincidencia absoluta se todos os decimais obtidos fosen considerados.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 1.2. Balances de enerxía

A 1ª Lei da Termodinámica define o Principio de Conservación da Enerxía pola cal unha corrente de saída dun proceso obtense a partir de interaccións enerxéticas sobre a corrente de entrada (2). Na industria química empréganse equipos que se encargan de realizar as transformacións enerxéticas como cambiar a temperatura ou presión dunha corrente, mesturalas ou levar a cabo transformacións químicas, chamados dispositivos de control (2).

Tomando os dispositivos de control como o sistema termodinámico nos que ocorren as transformacións anteriormente nomeadas e aplicando o Principio de Conservación da Enerxía, a ecuación 3 amosa o Balance de Enerxía Xeral (2).

$$E_E - E_S + E_X = E_A \quad (3)$$

Onde:

$E_S$  : fluxo de enerxía de saída en kJ/h

$E_E$  : fluxo de enerxía de entrada en kJ/h

$E_X$  : fluxo de enerxía xerada en kJ/h

$E_A$  : fluxo de enerxía acumulada en kJ/h

Redefinindo a ecuación 4 e desagregando cada termo da mesma obtense a ecuación 4 (2).

$$\left( \dot{Q}_E + \dot{W}_E + \sum_{entrada} \dot{m}_i \vartheta_i \right) - \left( \dot{Q}_S + \dot{W}_S + \sum_{saída} \dot{m}_j \vartheta_j \right) + E_X = \frac{(m_i u_i - m_f u_f)}{dt} \quad (4)$$

Na ecuación 4 pódese observar como se inclúen as transferencias de calor,  $\dot{Q}$ , e/ou traballo,  $\dot{W}$ , ambos en kJ/h. A enerxía total de cada corrente,  $\vartheta$ , móstrase na ecuación 5 (2).

$$\vartheta = h + \frac{v^2}{2} + g \cdot z \quad [kJ/kg] \quad (5)$$

Sendo,  $i$ : o número de correntes de entrada

$j$ , o número de correntes de saída ó sistema de control

$\dot{m}_i$ : caudal de entrada (kg/h)

$\dot{m}_j$ : caudal de saída (kg/h)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O termo de acumulación de enerxía no sistema exprésase como a variación da enerxía interna no volume de control (2). A xeración de enerxía considérase principalmente nos reactores onde se libera ou absorbe un fluxo de calor durante o curso da reacción (2).

Para a realización dos balances de enerxía en cada equipo combínanse as ecuacións 4 e 5 considerando os termos máis relevantes en cada proceso. Isto é, pódese simplificar a ecuación 4 sempre e cando se desprezen algúns dos termos de maneira xustificada.

Por outra parte, a 2ª Lei da Termodinámica aplicada a equipos de proceso establece que o traballo realizado por ou sobre unha corrente non é entregado na súa totalidade. Isto é debido a que existen irreversibilidades respecto a un proceso no que un equipo opera de maneira ideal (2). Deste xeito, introdúcese unha eficiencia isentrópica ou adiabática que pretende corrixir as desviacións da idealidade dun equipo de proceso. Por tanto, nos balances de enerxía ós equipos producíranse perdas enerxéticas que, nalgúns casos, por ter valores pequenos pódense desprezar (2).

As entalpías en cada corrente calcúlase como a ecuación II.7 Anexo II. Cálculos Xustificativos. Parte II: Deseño columna T-301.

### 1.2.1. Válvulas

As válvulas son dispositivos de estrangulamento que teñen por misión diminuír a presión do fluído ó seu paso. Por norma xeral, a ecuación 4 redúcese sensiblemente xa que son equipos nos que non se realiza traballo mecánico, as enerxías potencial e cinética son desprezábais e, debido a que son de pequeno tamaño, a transferencia de calor apenas se considera. Finalmente, o balance de enerxía aplicado a válvulas redúcese a un proceso isoentálpico tal e como se aprecia na ecuación 6 (2).

$$h_{entrada} \cong h_{saída} \quad (6)$$

A continuación, preséntanse os resultados obtidos para as válvulas VLV-101, VLV-201 e VLV-301. As entalpías exprésanse en termos de fluxo simplemente aplicando os pesos moleculares medios en cada corrente empregando os pesos moleculares da táboa 1 do presente Anexo e os caudais máxicos da corrente. Os calores específicos son obtidos mediante o software Aspen Hysys™ como os valores medios en cada corrente.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 11. Balance de enerxía VLV-101. Fonte: Elaboración propia

Corrente	$\overline{C_p}$ (kJ/kmol °C)	T(°C)	h (kJ/h)
1	28,42	25	2,74E+04
2	28,42	25	2,74E+04
Erro (%)	0,00		

A válvula V-101 atópase na saída do tanque de almacenamento de hidróxeno e pretende acondicionar a presión da corrente fresca desde os 2,00E+04 kPa ata 300 kPa. A válvula V-201 cambia a presión da corrente de líquida de ciclohexanona e ciclohexanol que sae do primeiro condensador parcial a 229,2 kPa para posteriormente mesturar a corrente análoga que sae do segundo condensador parcial a 180 kPa.

Táboa 12. Balance de enerxía VLV-201. Fonte: Elaboración propia

Corrente	$\overline{C_p}$ (kJ/kmol °C)	T(°C)	h (kJ/h)
9	260,2	178,5	9,01E+06
12	259,9	178,2	8,98E+06
Erro (%)	0,28		

A válvula VLV-301 garante o acondicionamento da corrente, líquido saturado, á presión de operación da columna, 26,66 kPa.

Táboa 13. Balance de enerxía VLV-301. Fonte: Elaboración propia

Corrente	$\overline{C_p}$ (kJ/kmol °C)	T(°C)	h (kJ/h)
19	226,8	177,9	1,27E+07
20	226,0	115,3	8,18E+06
Erro (%)	35,42		

Como se observa na Táboa 13, a suposición de proceso isoentálpico cómprese para as válvulas VLV-101 e VLV-201, sen embargo na VLV-301, a desviación ten un valor considerable e non satisfai a suposición. Ó igual que a válvula VLV-101, na VLV-201 existe unha caída de presión elevada cun valor de 153,3 kPa sendo moito maior aínda a caída de presión na VLV-101. O motivo polo cal é posible atopar tanta diferenza no peche do balance enerxético reside no tamaño da válvula. Pódese comprobar no presente Anexo

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

no apartado 1.2 Balances de Materia que o caudal máxico da corrente 19 é moito maior que o caudal da corrente 1, polo que a válvula V-301 terá un tamaño maior e suficiente como para que se poidan apreciar perdas de calor. O valor destas perdas obviamente corresponde ó 35,42 % do fluxo calorífico da corrente 19.

### 1.2.2. Mesturador

Son dispositivos que xunta dúas ou máis correntes de proceso e, de novo, as suposicións realizadas nas válvulas son válida para simplificar a ecuación 3 a excepción de que é necesario considerar esta vez un valor para as perdas de fluxo de calor. Posto que se opera con caudais máxicos elevados, a área necesaria da cámara de mestura permite a transferencia de calor ó ambiente (2).

Así, a táboa 15 amosa os valores do balance de enerxía á cámara de mestura M-101 á que entran as correntes 3 e 5, e sendo a corrente 6 a de saída da cámara.

Táboa 14. Propiedades das correntes da M-101. Fonte: Elaboración propia

Corrente	$\bar{c}_p$ (kJ/kmol °C)	T(°C)
3	28,66	125,2
5	171,00	25
6	62,60	59,65

Táboa 15. Balance de enerxía M-101. Fonte: Elaboración propia

$h_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{entrada}$ (kJ/h)	$h_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{saída}$ (kJ/h)
3,24E+06	0,00	0,00	3,24E+06	0,00	1,81E+3

Como se pode apreciar, existe unha diferenza entre as entalpías de entrada e de saída que se manifesta como un fluxo de calor que sae do sistema. A efectos de cálculo, se fose necesario, dado que o valor das perdas de calor é do orde  $10^3$  se poden considerar nulo.

### 1.2.3. Bombas

As bombas son dispositivos para a impulsión de líquidos que o conseguen mediante un aumento de presión na corrente de saída. A enerxía involucrada é principalmente

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

mecánica debido a forza de impulsión do fluído, as enerxías cinéticas e potencial. Estas últimas non soen ser desprezábais nestes dispositivos, en especial a enerxía cinética, mais a súa contribución ó balance de enerxía é pequena en comparación ca enerxía de fluxo, a entalpía (2).

O procedemento rigoroso de cálculo atópase no Anexo II. Parte III. Dimensionamento básico de equipos . A Táboas 16, 17, 18 e 19 amosan unicamente os resultados obtidos no balance de enerxía para comprobar o seu correcto peche.

A bomba P-101 eleva a presión da corrente fresca de fenol de 1 bar ata 3 bar, corresponde ás correntes 4 e 5.

Táboa 16. Balance de enerxía P-101. Fonte: Elaboración propia

$h_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{entrada}$ (kJ/h)	$h_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{saída}$ (kJ/h)
8,29E+05	4,84E+03	0,00	8,32E+05	0,00	1,45E+03

A bomba P-302 é a que provoca baleiro na columna de destilación T-301. Cambia a presión da corrente de entrada 21 de 26,66 kPa a 70 kPa.

Táboa 17. Balance de enerxía P-302. Fonte: Elaboración propia

$h_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{entrada}$ (kJ/h)	$h_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{saída}$ (kJ/h)
4,47E+06	1,38E+03	0,00	4,47E+05	0,00	4,13E+02

A bomba P-303 acondiciona a corrente de ciclohexanona 22 dende os 70 kPa aos 101,3 kPa antes de ser arrefriada no E-305.

Táboa 18. Balance de enerxía P-303. Fonte: Elaboración propia

$h_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{entrada}$ (kJ/h)	$h_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{saída}$ (kJ/h)
4,47E+06	9,94E+02	0,00	4,47E+06	0,00	2,98E+02

A bomba P-304 retorna os fondos da columna T-301 enriquecidos en ciclohexanol que saen na corrente 25 a 50,66 kPa ata 202,6 kPa na corrente 26 que entra ó E-301 previo ó R-301.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 19. Balance de enerxía P-304. Fonte: Elaboración propia

$h_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{entrada}$ (kJ/h)	$h_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{saída}$ (kJ/h)
6,12E+05	3,06E+02	0,00	6,12E+05	0,00	91,7

Na Táboa 19 ponse de manifesto que os fluxos de entalpía son os que máis contribúen ó balance de enerxía. Así mesmo, existen perdas enerxéticas menores en forma de calor debido ó funcionamento das partes móbiles das bombas, como por exemplo o rodete.

### 1.2.4 Compresores

Bombas e compresores comparten a mesma finalidade en canto ambos equipos modifican a presión dunha corrente aumentándoa, a diferenza é que un compresor non opera con correntes líquidas. Por tanto, de forma análoga ás bombas, os efectos das enerxías potencial e cinéticas non son considerábeis e precisan a entrada de enerxía en forma de traballo para o seu funcionamento. Así mesmo, atoparanse perdas caloríficas no equipo polo efecto da compresión do fluído, aínda que non teñen un valor suficientemente elevado para ser consideradas a efectos de cálculos posteriores (2).

O procedemento rigoroso pódese consultar no Anexo III. Dimensionamento básico de equipos.

Na táboa 20 amósase o balance de enerxía para o compresor K-201 o cal aumenta a presión da corrente de H<sub>2</sub>, corrente 11, a 229 kPa que se recicla do primeiro reactor ata 300 kPa.

Táboa 20. Balance de enerxía K-201. Fonte: Elaboración propia

$h_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{entrada}$ (kJ/h)	$h_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{saída}$ (kJ/h)
1,05E+06	5,22E+05	0,00	1,41E+06	0,00	1,57E+05

Finalmente, na táboa 21 amósase o balance de enerxía para o compresor K-301 o cal aumenta a presión da corrente de H<sub>2</sub> (16) a 180 kPa que se recicla do segundo reactor ata 300 kPa.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 21. Balance de enerxía K-301. Fonte: Elaboración propia

hentrada (kJ/h)	$\dot{W}_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{entrada}$ (kJ/h)	hsaída (kJ/h)	$\dot{W}_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{saída}$ (kJ/h)
4,41E+05	5,09E+05	0,00	7,97E+05	0,00	1,53E+05

### 1.2.5. Intercambiadores de calor

Son dispositivos que implican a transferencia de calor entre dúas correntes na dirección da corrente mais quente á mais fría, tamén chamada forza impulsora. Así mesmo, non existe interaccións en forma de traballo nin se consideran as enerxías potenciais e cinéticas. O balance de enerxía aplícase sobre a interface onde ten lugar o intercambio de calor, non sobre o volume total do equipo (2).

No presente Anexo I. Balances de materia e enerxía, presentarase unicamente o balance de enerxía co fin de coñecer as interaccións enerxéticas que teñen lugar. O balance será o mesmo para todos os intercambiadores, o calor intercambiado (cedido ou aportado) obtense sumando os calores latentes e sensibles segundo as ecuacións 6 e 7, respectivamente.

$$\dot{Q}_{sensible} = \dot{m} \bar{C}_p \Delta T \quad \left[ \frac{kJ}{h} \right] \quad (6)$$

$$\dot{Q}_{latente} = \dot{m} \lambda \quad \left[ \frac{kJ}{h} \right] \quad (7)$$

Coñecendo o calor intercambiado pódese obter a entalpía na corrente de saída.

O intercambiador E-201 subministra calor suficiente para quentar a corrente que participa na primeira reacción, dende os 59,65 °C aos 180 °C. Neste proceso o fenol evapórase, polo que se terá en conta o calor latente. En primeiro lugar, elévase a temperatura de entrada ata o punto de ebulición do fenol,  $T_{eb}$ .

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 22. Etapa 1- Saturación do fenol. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_6(^{\circ}\text{C})$	59,65
$T_{\text{eb}}(^{\circ}\text{C})$	167,2
$C_{p6}(\text{kJ/kg}^{\circ}\text{C})$	1,93
$C_{p\text{eb}}(\text{kJ/kg }^{\circ}\text{C})$	2,27
$\bar{C}_p(\text{kJ/kg }^{\circ}\text{C})$	2,10
$\dot{m}_{\text{fenol}}(\text{kg/h})$	18257,65
$\dot{Q}_1 (\text{kJ/h})$	4,12E+06

En segundo lugar, na Táboa 23 preséntase o cambio de fase, calor latente.

Táboa 23. Etapa 2. Vaporización do fenol. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\lambda_{\text{vapor}} (\text{kJ/kg})$	625,31
$\dot{m}_{\text{fenol}}(\text{kg/h})$	18257,65
$\dot{Q}_2 (\text{kJ/h})$	1,14E+07

Finalmente, o fenol xa en fase gas aumenta a temperatura ata  $T_9$ .

Táboa 24. Etapa 3- Sobrequecemento do fenol (gas)

Magnitude	Valor
$T_{\text{eb}}(^{\circ}\text{C})$	167,2
$T_7(^{\circ}\text{C})$	180
$C_{p\text{eb}}(\text{kJ/kg }^{\circ}\text{C})$	2,27
$C_{p7}(\text{kJ/kg }^{\circ}\text{C})$	2,31
$\bar{C}_p(\text{kJ/kg }^{\circ}\text{C})$	2,29
$\dot{m}_{\text{fenol}}(\text{kg/h})$	18257,65
$\dot{Q}_3 (\text{kJ/h})$	5,35E+05

Analogamente, o hidróxeno unicamente un proceso de sobrequecemento.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 25. Etapa 4- Sobrequecemento do H2. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_6(^{\circ}\text{C})$	59,65
$T_7(^{\circ}\text{C})$	180
$C_{p6}(\text{kJ/kg } ^{\circ}\text{C})$	14,25
$C_{p7}(\text{kJ/kg } ^{\circ}\text{C})$	14,40
$\bar{C}_p(\text{kJ/kg } ^{\circ}\text{C})$	14,33
$\dot{m}_{\text{H}_2}(\text{kg/h})$	1359,61
$\dot{Q}_4(\text{kJ/h})$	2,34E+06

O calor total é aportado por unha corrente de vapor de auga de alta presión saturado a 224°C que emprega o seu calor latente de vaporización. Empregando a ecuación 6, obtense na Táboa 26 o caudal de vapor de auga necesario. Por outra banda, a Táboa 27 recolle o balance de enerxía global ó intercambiador E-201.

Táboa 26. Balance de enerxía á utilidade. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\lambda_{\text{vaporH}_2\text{O}}(\text{kJ/kg})$	1841,4
$\dot{Q}_{E-201}(\text{kJ/h})$	1,84E+07
$\dot{m}_{\text{H}_2\text{O}}(\text{kg/h})$	1,0E+04
$v(\text{L/s})$	3

Táboa 27. Balance de enerxía global E-201. Fonte: Elaboración propia

$h_{\text{entrada}}(\text{kJ/h})$	$\dot{W}_{\text{entrada}}(\text{kJ/h})$	$\dot{Q}_{\text{entrada}}(\text{kJ/h})$	$h_{\text{saída}}(\text{kJ/h})$	$\dot{W}_{\text{saída}}(\text{kJ/h})$	$\dot{Q}_{\text{saída}}(\text{kJ/h})$
3,24+06	0,00	1,84E+07	2,17E+07	0,00	0,00

O proceso será idéntico nos demais intercambiadores de calor.

O E-202 é un condensador parcial encargado de condensar a ciclohexanona e o ciclohexanol á saída do reactor na corrente 8, sairá pola corrente 9. A corrente 10 é unha

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

corrente de  $H_2$  non condensada e que se recicla. Ambas correntes, 9 e 10 saen a 178,5 °C. O calor retirado é a diferenza entre as entalpías 9 e 10, e a 8.

A mestura da ciclohexanona e o ciclohexanol é levada á temperatura de condensación.

Táboa 28. Etapa 1. Saturación da mestura ona-ol. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_8(^{\circ}C)$	180
$T_9=T_{con}(^{\circ}C)$	178,5
$\bar{C}_{p_{mestura}}$ (kJ/kg °C)	2,64
$\dot{m}_{mestura}$ (kg/h)	19209,37
$\dot{Q}_{1,E-202}$ (kJ/h)	7,6E+04

Posteriormente, a mestura condensa liberando calor latente.

Táboa 29. Etapa 2. Condensación mestura ona-ol. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\bar{\lambda}_{vapor,mestura}$ (kJ/kg)	397,34
$\dot{m}_{mestura}$ (kg/h)	19209,37
$\dot{Q}_{2,E-202}$ (kJ/h)	7,63E+06

Por outra banda, o hidróxeno arrefriase ata a mesma temperatura na que condensa a mestura.

Táboa 30. Etapa 3- Arrefriamento do hidróxeno á  $T_{con}$ . Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_8(^{\circ}C)$	180
$T_{10}=T_{con}(^{\circ}C)$	178,5
$\bar{C}_{p_{H_2}}$ (kJ/kg °C)	14,4
$\dot{m}_{H_2}$ (kg/h)	407,88
$\dot{Q}_{3,E-202}$ (kJ/h)	8,81E+03

O caudal de utilidade necesario, empregando a ecuación 6 atópase na Táboa 31.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 31. Balance de enerxía á utilidade. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_{en}$ (°C)	30
$T_{sa}$ (°C)	45
$\bar{c}_{p_{H_2O}}$ (kJ/kg °C)	4,225
$\dot{Q}_{E-202}$ (kJ/h)	7,71E+06
$\dot{m}_{cw}$ (kg/h)	1,22E+05
$v$ (L/s)	34

O intercambiador E-301 aportado o calor suficiente para quecer a corrente de entrada ó segundo reactor R-301 desde 120,8 °C a 300 °C.

Táboa 32. Etapa 1. Saturación mestura ol-ona. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_{26}$ (°C)	120,8
$T_{eb}$ (°C)	182,6
$\bar{c}_{p_{mestura}}$ (kJ/kg °C)	2,52
$\dot{m}_{mestura}$ (kg/h)	11980,50
$\dot{Q}_{1,E-301}$ (kJ/h)	1,87E+06

Táboa 33. Etapa 2. Vaporización da mestura ol-ona. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\bar{\lambda}_{vapor,mestura}$ (kJ/kg)	418,30
$\dot{m}_{mestura}$ (kg/h)	11980,50
$\dot{Q}_{2,E-301}$ (kJ/h)	5,01E+06

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 34. Etapa 3- Sobrequecemento mestura ol-ona. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_{eb}(^{\circ}\text{C})$	182,6
$T_{13}(^{\circ}\text{C})$	300
$\overline{Cp}_{mestura}$ (kJ/kg $^{\circ}\text{C}$ )	2,18
$\dot{m}_{mestura}$ (kg/h)	11980,50
$\dot{Q}_{3,E-301}$ (kJ/h)	1,26E+07

Táboa 35. Balance de enerxía á utilidade. Fonte: Elaboración propia e (3).

Magnitude	Valor
$T_{entrada}$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	623,15
$T_{saída}$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	533,15
$Cp_{entrada}$ (kJ/kg K)	2,65
$Cp_{saída}$ (kJ/kg K)	2,38
$\overline{Cp}$ (kJ/kg K)	2,52
$\dot{Q}_{E-301}$ (kJ/h)	1,95E+07
$\dot{m}_{fluido\_térmico}$ (kg/h)	8,60E+04

Finalmente o balance global de enerxía ó E-301 amósase na táboa 36.

Táboa 36. Balance de enerxía global ó E-301. Fonte: Elaboración propia

$h_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{entrada}$ (kJ/h)	$h_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{saída}$ (kJ/h)
3,64+06	0,00	1,95E+07	2,31E+07	0,00	0,00

O E-302 é un condensador parcial totalmente análogo ó E-202, isto é, fai condensar a ciclohexanona e o ciclohexanol á saída do reactor R-301 na corrente 14, sairá pola corrente 15. A corrente 16 é unha corrente de  $\text{H}_2$  non condensada e que se recicla. Ambas correntes, 15 e 16 saen a  $177,7^{\circ}\text{C}$ . O calor retirado é a diferenza entre as entalpías 15 e 16, e a 14.

A mestura da ciclohexanona e o ciclohexanol é levada á temperatura de condensación.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 37. Etapa 1. Saturación da mestura ona-ol. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_{14}(\text{°C})$	300
$T_{15}=T_{\text{con}}(\text{°C})$	177
$\bar{C}_{p_{\text{mestura}}}(\text{kJ/kg °C})$	2,20
$\dot{m}_{\text{mestura}}(\text{kg/h})$	11807,63
$\dot{Q}_{1,E-302}(\text{kJ/h})$	3,17E+06

Posteriormente, a mestura condensa liberando calor latente.

Táboa 38. Etapa 2. Condensación mestura ona-ol. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\bar{\lambda}_{\text{vapor,mestura}}(\text{kJ/kg})$	384,58
$\dot{m}_{\text{mestura}}(\text{kg/h})$	11807,63
$\dot{Q}_{2,E-302}(\text{kJ/h})$	4,54E+06

Por outra banda, o hidróxeno arrefriase ata a mesma temperatura na que condensa a mestura.

Táboa 39. Etapa 3- Arrefriamento do hidróxeno á  $T_{\text{con}}$ . Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_{14}(\text{°C})$	300
$T_{16}=T_{\text{con}}(\text{°C})$	177
$\bar{C}_{p_{H_2}}(\text{kJ/kg °C})$	14,49
$\dot{m}_{H_2}(\text{kg/h})$	172,86
$\dot{Q}_{3,E-302}(\text{kJ/h})$	3,08E+05

O caudal de utilidade necesario, empregando a ecuación 9 atópase na Táboa 40.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 40. Balance de enerxía á utilidade. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_{en}$ (°C)	5
$T_{sa}$ (°C)	15
$\overline{Cp}_{H_2}$ (kJ/kg °C)	4,161
$\dot{Q}_{E-302}$ (kJ/h)	9,13E+06
$\dot{m}_{rw}$ (kg/h)	2,19E+05
$v$ (L/s)	60

O intercambiador E-305 arrefría a corrente do produto final (ciclohexanona), a corrente 23, desde os 109,9 °C aos 25 °C, correspondente á corrente 24.

Táboa 41. Calor intercambiado en E-305. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_{23}$ (°C)	109,9
$T_{24}$ (°C)	25
$Cp_{23}$ (kJ/kg °C)	2,14
$Cp_{24}$ (kJ/kg °C)	1,78
$\overline{Cp}$ (kJ/kg °C)	1,96
$\dot{Q}_{E-305}$ (kJ/h)	3,17E+06
$\dot{m}_{23} = \dot{m}_{24}$ (kg/h)	19036,51

Táboa 42. Balance de enerxía á utilidade. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_{entrada}$ (°C)	5
$T_{saída}$ (°C)	15
$\overline{Cp}$ (kJ/kg °C)	4,161
$\dot{Q}_{E-305}$ (kJ/h)	3,17E+06
$\dot{m}_{rw}$ (kg/h)	7.61E+04
$v$ (L/s)	21,13

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 43. Balance de enerxía global ó E-305. Fonte: Elaboración propia

$h_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{entrada}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{entrada}$ (kJ/h)	$h_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{W}_{saída}$ (kJ/h)	$\dot{Q}_{saída}$ (kJ/h)
4,47+E06	0,00	0,00	1,30E+05	0,00	3,17E+06

Finalmente, os balances de enerxía ós intercambiadores E-303 e E-304 atópanse no Anexo II. Cálculos Xustificativos. Parte II. Deseño columna T-301. Preséntanse o balance de enerxía ó fluído de servizo en cada un deles.

Táboa 44. Balance de enerxía á utilidade E-303. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$T_{entrada}$ (°C)	5
$T_{saída}$ (°C)	15
$\bar{C}_p$ (kJ/kg °C)	4,161
$\dot{Q}_{E-305}$ (kJ/h)	1,12E+08
$\dot{m}_{rw}$ (kg/h)	2.86E+06
$v$ (L/s)	800

Táboa 45. Balance de enerxía á utilidade E-304. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\lambda_{vaporH20,7\text{ bar}}$ (kJ/kg)	2066,3
$\dot{Q}_{E-201}$ (kJ/h)	1,11E+08
$\dot{m}_{H_2O}$ (kg/h)	5,36E+04
$v$ (L/s)	14

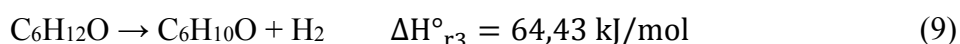
### 1.2.6. Reactores

Nos reactores, o termo de acumulación de enerxía é considerado xa que as reaccións ceden ou absorben un fluxo de calor. O reactor R-201 leva a cabo unha reacción altamente exotérmica, mentres que, no reactor de deshidroxenación R-301 a reacción é endotérmica. Por outra parte, a un reactor multitubular non se lle aplica nin se obtén traballo. Así, só se ten en conta o calor xerado pola reacción química e o calor retirado/aportado. O balance

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

de enerxía ó reactor R-201 atópase no Anexo II. Cálculos Xustificativos. Parte I: Deseño Reactor R-201.

Para o reactor R-301 tense en conta o carácter endotérmico da reacción, polo que o calor xerado pola reacción é un fluxo de calor de entrada ó considerar a mestura de reacción como o volume de control sobre o que se aplica o balance. Este fluxo de calor será aportado por un fluído térmico. A reacción amósase na ecuación 9 e as condicións de reacción preséntanse na Táboa 46.



Táboa 46. Condicións da reacción. Fonte: (4)

Magnitude	Valor
T (°C)	300
P (kPa)	180
Selectividade (%)	100
Conversión (%)	80

O procedemento será o mesmo que o que se empregou no reactor R-201 e as ecuacións atópanse no apartado 4.5 Balance de Enerxía no Anexo II. Cálculos Xustificativos. Parte I: Deseño Reactor R-201. A continuación, amósanse os resultados obtidos do mencionado balance.

Táboa 47. Datos termodinámicos do R-301. Fonte: (4)

Magnitude	Valor
Cp H <sub>2</sub> (kJ/ kmol K)	29,27
Cp ciclohexanona (kJ/ kmol K)	179,27
Cp ciclohexanol (kJ/ kmol K)	190,90
$\Delta H^\circ_{\text{H}_2}$ (kJ/ mol )	0,00
$\Delta H^\circ_{\text{ciclohexanona}}$ (kJ/ mol )	-230,12
$\Delta H^\circ_{\text{ciclohexanol}}$ (kJ/ mol )	-294,55

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Na Táboa 48 móstranse os resultados obtidos no cálculo do calor de reacción.

Táboa 48. Cálculo calor de reacción R-301. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\Delta H_{r_3}$ (kJ/ mol )	69,72
$F_{ciclohexanona}$ (mol/h)	1,07E+05
$\dot{Q}_{reacción}$ (kJ/ h )	7,46E+06

Finalmente, o balance ó fluído térmico calefactor neste caso segue a ecuación 10.

$$\dot{Q}_{reacción} = \dot{Q}_{aportado} = \dot{m}_{fluído\ térmico} C_p T \quad (10)$$

Opera a temperatura constante e a capacidade calorífica é obtida da correspondente ficha técnica (3).

Táboa 49. Balance de enerxía ó fluído térmico calefactor. Elaboración propia

Magnitude	Valor
$C_p$ (kJ/ kg K)	2,65
$T$ (K)	623,15
$\dot{m}_{fluído\ térmico}$ (kg/h)	4,46E+03

## 2. BIBLIOGRAFÍA

1. SINNOT R. e G. TOWLER. *Chemical Engineering Design*. Burlington: Elsevier, 2008. ISBN: 978-0-0706-8423-1
2. ÇENGEL, Y.A. e M. BOLES. *Thermodynamics: an engineering approach*. 7ª ed. Estados Unidos: McGraw-Hill, 2011. ISBN: 978-0-07-352932-5
3. DOW CHEMICAL. *Ficha Técnica Dowtherm* [en liña]. [Consultado abril 2020].  
Dispoñible en: <https://www.dow.com/en-us/pdp.dowtherm-q-heat-transfer-fluid.11233z.html>
4. DIMIAN, A. e C. SORIN. *Chemical Process Design: Coputer-Aided Case Studies*. Alemaña: Wiley-VCH, 2008. ISBN: 978-3-527-31403-4

**ANEXO II:**  
**CÁLCULOS**  
**JUSTIFICATIVOS**

Parte I:  
Diseño Reactor  
R-201

## CONTIDO

1	Obxectivos .....	3
2	Catalizadores .....	3
3	Condições de operación .....	5
3.1	Sistema de reacción .....	7
3.2	Catalizador e modelo cinético.....	8
3.3	Configuración do reactor .....	11
4	Deseño do reactor .....	12
4.1	Consideracións previas .....	12
4.2	Estimación da masa de catalizador .....	13
4.3	Cálculo número de tubos .....	16
4.4	Balance de enerxía .....	17
4.5	Caída de presión por tubos.....	20
4.6	Caída de presión por carcasa .....	22
4.7	Cálculo do coeficiente global de transmisión de calor, U. ....	25
4.7.1	Cálculo do coeficiente de convección de tubos.....	26
4.7.2	Cálculo do coeficiente de convección de carcasa.....	27
5	Deseño mecánico.....	28
5.1	Selección do material de construción .....	28
5.2	Cálculo espesor da parede.....	31
5.3	Espesor illante.....	34
5.4	Esforzos por cargas por cargas combinadas .....	37
5.4.1	Peso total do recipiente.....	38
5.4.2	Carga por vento .....	39
5.4.3	Carga por terremotos .....	39
5.5	Análise de esforzos .....	39
5.6	Deseño de soportes .....	43
6	Referencias .....	<b>¡Error! Marcador no definido.</b>

## 1 Obxectivos

A etapa da reacción química ten unha especial relevancia na síntese de procesos químicos na industria. O principal obxectivo é lograr as cantidades dos produtos desexados mediante a conversión e selectividade axeitada. Á etapa de reacción sempre lle segue unha etapa de separación que consta de unha ou máis unidades de separación dentro da sección. O rendemento do reactor condiciona o desempeño da fase de separación, pois do reactor saen produtos convertidos non desexados ou reactivos parcialmente convertidos que conveñen recircular. A viabilidade económica do proceso verase comprometida en calquera das dúas etapas anteriores non se consegue os resultados esperados. Por iso, a etapa de reacción está suxeita frecuente a procesos de modelización óptima incluso combinada coa etapa de separación para lograr o mellor rendemento nas etapas máis críticas nun proceso en termos de operativos e económicos (1).

No presente Anexo realízanse os cálculos necesarios para dimensionar e deseñar o reactor principal no proceso abordado. Preséntanse as reaccións que teñen lugar, as condicións de operación seleccionadas serán discutidas e xustificadas e introducirase o tipo de reactor empregado. Seguidamente, estímase os parámetros necesarios para a configuración do reactor fixada partindo de datos bibliográficos e coa axuda de expresións xa coñecidas. Finalmente, desenvólvese o deseño mecánico do equipo: selección e xustificación dos materiais e cálculo de espesores segundo os estándares do Código ASME BPV Sección VIII Div. 1 e TEMA.

## 2 Catalizadores

Co obxecto de anticipar o contido que se desenvolverá nos puntos seguinte deste Anexo, comézase introducindo un breve fondo teórico que xeran os principios básicos para o deseño do reactor.

O uso de catalizadores en procesos químicos exténdese dende hai miles de anos xa que se apreciou que o uso deles contribuía a velocidade á que ocorrían as reaccións químicas. O catalizador altera a velocidade das reaccións promovendo unha ruta distintas nas reaccións químicas que afecta á conversión e selectividade das mesmas, xa que reduce a cantidade de enerxía necesaria para que teñan lugar (2).

## Planta de produción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

A principal característica dun catalizador é que non afecta á velocidade de reacción, o equilibrio químico non é alterado. As reaccións que involucran catalizadores poden clasificarse en homoxéneas ou heteroxéneas. Nas reaccións catalíticas homoxéneas ambos reactivos e catalizador atópanse na mesma fase, por contra, as reaccións catalíticas heteroxéneas implican máis dunha fase (2).

A propiedade esencial dun catalizador é que teñen unha área superficial moi pequena que facilita a velocidade de reacción. Son moi común os catalizadores porosos xa que o tamaño dos poros é un factor clave para promover unhas reaccións ou outras, dependendo do tamaño das partículas dos reactivos promocionan ou non dentro do poro. A reacción ten lugar na interfase do fluído co catalizador seguindo as fases da figura i.1. Un tipo especial de catalizadores son os catalizadores soportados que conteñen na súa superficie partículas moi pequenas doutros material, normalmente metálicos (2).

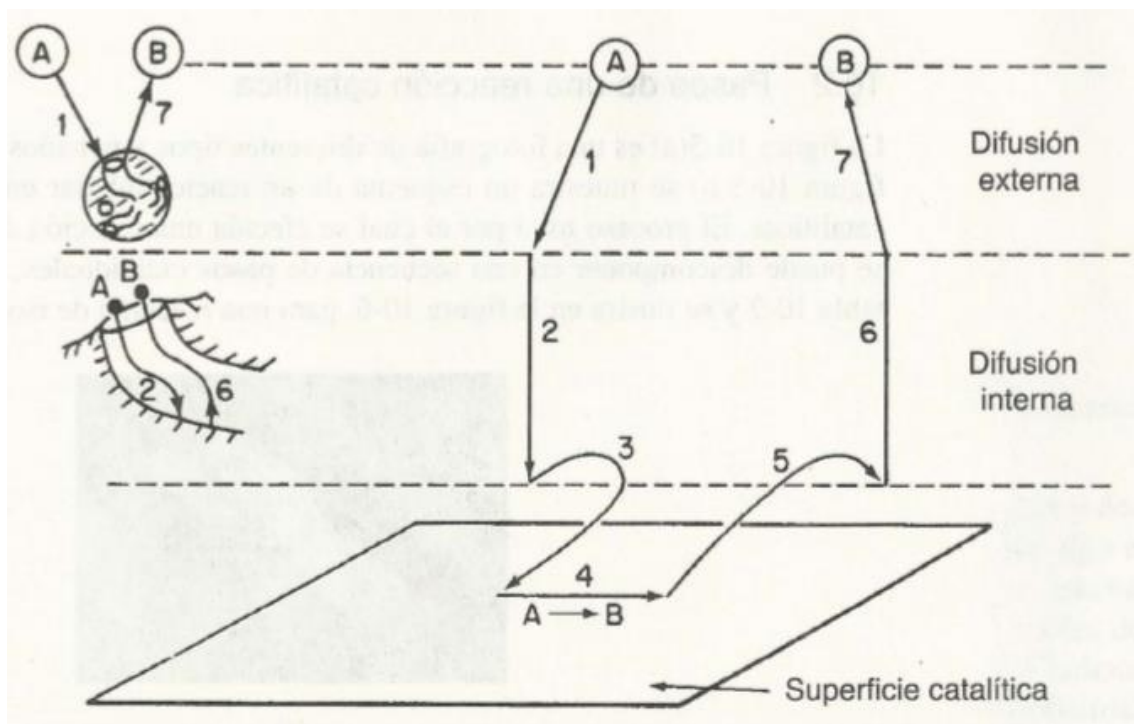


Figura i.1. Esquema das etapas dunha reacción catalítica. Fonte: (2)

Finalmente, os catalizadores teñen unha duración limitada pois, debido ó uso prolongado, as propiedades vense deterioradas por tres razóns: cambio na estrutura

Planta de produción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

cristalina, deposición de substancias que envelenan o catalizador ou por deposición de partículas de carbono (2).

### 3 Condicións de operación

A reacción terá lugar en fase gas en presenza dun catalizador sólido nunhas condicións de operación que cumpran a produción desexada. O fenol é un composto altamente tóxico e que implica un tratamento a posterior por razóns medioambientais. Este feito introduce a primeira simplificación na etapa de reacción do proceso. No lugar de realizar un tratamento con hidróxeno para a súa recuperación, ou incineralo, é posible axustar as condicións de operación para obter unha conversión do fenol elevada e unha selectividade favorábel para a ciclohexanona xa que a reacción é moi sensíbel ás condicións de operación. (3)

Neste senso, os resultados dun estudo termodinámico a unha presión de 3 bar realizado mediante o método de redución da enerxía libre de Gibbs en Aspen Plus<sup>TM</sup> (4), preséntase nas figuras i.2 e i.3.

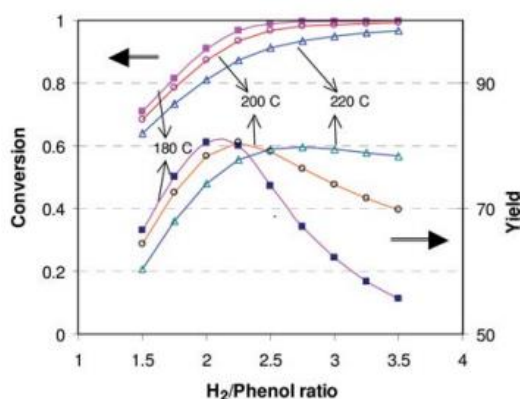


Figura i.2. Curvas de conversión e rendemento para distintas temperaturas. Fonte: (4)

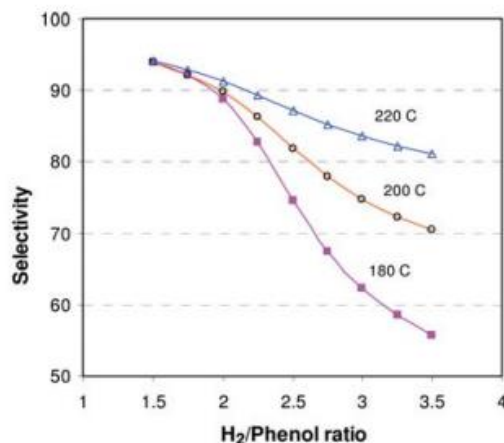


Figura i.3. Curvas de selectividade para distintas temperaturas. Fonte : (4)

Como se pode observar, para relacións de alimentación H<sub>2</sub>:fenol e temperaturas elevadas é posíbel alcanzar a máxima conversión de fenol. Sen embargo, a selectividade para a ciclohexanona é menor a medida que aumenta a relación de alimentación ó reactor. Tal e como se indicou na páxina 1 neste Anexo, é preferible a eliminación do fenol do proceso xa que precisaría un tratamento para as emisións medioambientais. Por este motivo, a reacción ocorrerá en condicións que garantan o 100% de conversión do fenol en detrimento da selectividade cara a ciclohexanona.

Así pois, a selectividade tal e como se pode observar na figura i.3, será lixeiramente máis favorábel para a ciclohexanona, polo que non se obterá a cantidade desexada nesta etapa de reacción. Acéptase entón unha menor produción de ciclohexanona xa que no segundo reactor levarase a cabo a reacción de deshidroxenación do ciclohexanol para dar ciclohexanona en cantidades que satisfán a capacidade de deseño da planta.

Táboa i.1. Condicións de operación. Fonte: (4)

Temperatura (K)	Presión (bar)	X <sub>fenol</sub> (%)	S <sub>ona</sub> (%)	S <sub>ol</sub> (%)
453,15	3	100	55	45

Existe outro motivo puramente enxeñeril relacionado co equilibrio químico polo cal se pretende eliminar todo o fenol da reacción . No caso dunha conversión parcial do fenol, sería de interese recuperar a maior cantidade posible de fenol e recircular unha corrente para a alimentación do reactor. Para iso, é preciso separar posiblemente nunha

## Planta de produción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

operación de destilación, o fenol nunha corrente que contén hidróxeno, ciclohexanona e ciclohexanol. Empregando a ferramenta *Equilibrium Unit* no software Aspen Hysys™ obtéñense as curvas de equilibrio para a mestura mencionada.

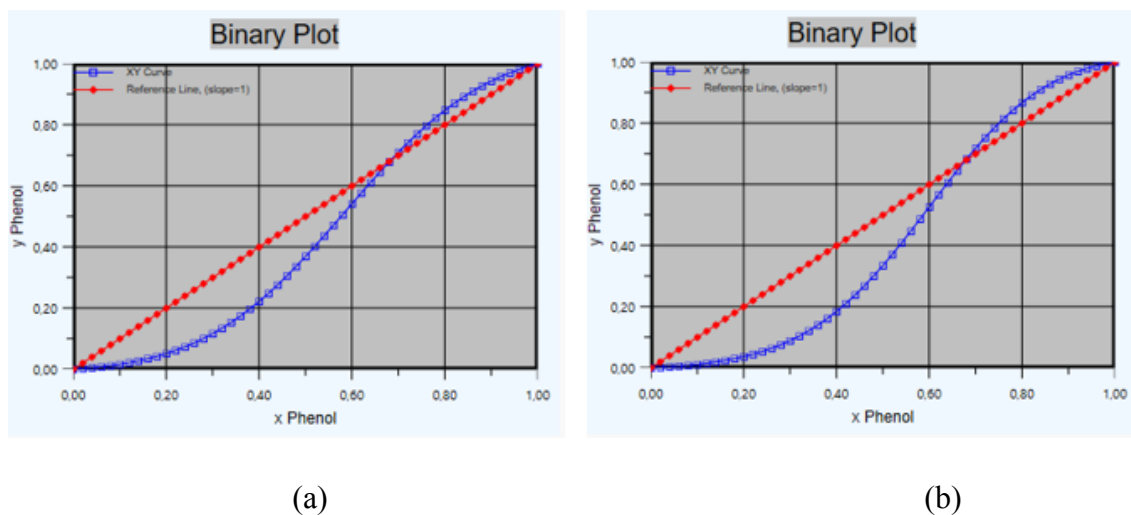


Figura i.4. Curvas de equilibrio a 1 atm do fenol con :

a)ciclohexanona b)ciclohexanol

Na Figura i.4 pódese observar que o fenol forma un azeótropo con tanto a ciclohexanona como co ciclohexanol. As curvas son moi semellantes e o punto de azeótropo atópase entornó ó 60% de composición. Conseguir unha separación o máis completa posible do fenol sería unha tarefa complicada e que encarecía o proxecto. Ambas curvas foron obtidas co paquete termodinámico UNIQUAC-RK.

### 3.1 Sistema de reacción

A ruta química para a obtención da ciclohexanona mediante a hidroxenación de fenol amósase na Figura i.5. Trátase dun modelo de reaccións en serie/paralelo que ocorren de forma consecutiva, onde o produto desexado obtense nunha etapa intermedia do sistema reactivo completo (4).

A formación do ciclohexeno por deshidratación do ciclohexanol é favorábel a temperaturas elevadas. Ó mesmo tempo, o ciclohexeno pode derivar ;por unha parte en compostos de peso molecular elevado por reacción de polimerización, por outra parte; pódense formar benceno (partir de 200°C) e ciclohexano. Posto que nin a temperatura

seleccionada nin a selección do catalizador permiten a aparición de ciclohexeno, non se esperan a aparición destes compostos (4).

Termodinamicamente, a formación de ciclohexeno é moi favorábel, sen embargo, a selectividade é total cara a reacción de hidroxenación. Outras impurezas como o ciclohexil-ciclohexanona tampouco serán consideradas nas condicións e tipo de catalizador seleccionado (4).

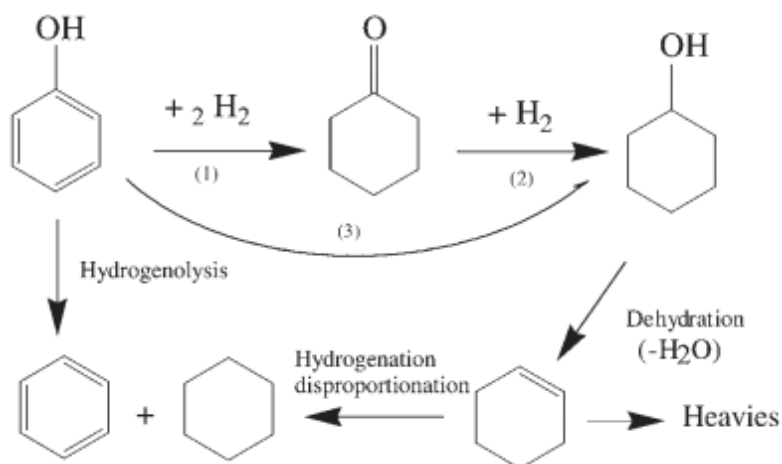
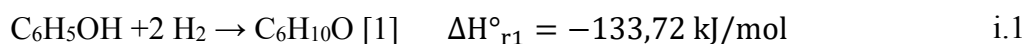


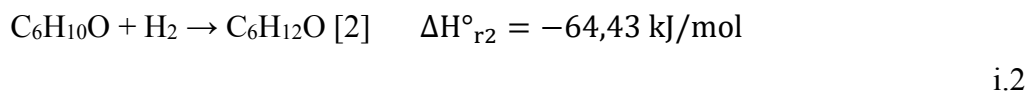
Figura i.5. Esquema de reacción completa. Fonte: (4)

O aspecto termodinámico máis importante é a grande exotermicidade da reacción de hidroxenación (4). O análise termodinámico máis exhaustivo lévese a cabo no apartado 4. Balance de enerxía do presente Anexo. As ecuacións i.1 e i.2 presentan as ecuacións

Reacción hidroxenación de fenol para dar ciclohexanona. Fonte: (4)



Reacción hidroxenación de ciclohexanona para dar ciclohexanol. Fonte: (4)



### 3.2 Catalizador e modelo cinético

Segundo a bibliografía consultada, distintos tipos de catalizadores metálicos soportados foron testados para a hidroxenación de fenol. Os metais que forman estes catalizadores son principalmente Pd, Pt e Ni sendo os dous primeiros metais os máis empregados (5).

## Planta de produción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

Os catalizadores de Pd favorecen a produción de ciclohexanona, por contra, os catalizadores de Pt favorecen a produción de ciclohexanol e o dobre de conversión de fenol (6).

En canto ós materiais soportados atópanse alúmina e zeolita (6), MgO (7) e carbono activo, nanofibras de carbono grafito, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> e grafito (5). Sen embargo, tan só foi posible atopar información bibliográfica clara e precisa que permita describir completamente tanto o comportamento do catalizador, como o modelo cinético, para catalizadores de Pt en xel de sílice.

A elección do catalizador para este proceso está suxeita á obtención dunha expresión cinética que describa o sistema reactivo en condicións semellantes ás da operación. Para un catalizador de Pt en xel de sílice, a información recóllese na táboa i.2 :

Táboa i.2. Características do catalizador. Fonte: (4) (3) (2)

Magnitude	Valor
Diámetro da partícula, $d_p$ (mm)	0,22
Densidade da partícula, $\rho_p$ (kg/m <sup>3</sup> )	1030
$\epsilon$ , fracción oca	0,4
Tortuosidade	3
BET (m <sup>2</sup> /g)	40
Radio do poro (Å)	150

Para o catalizador de Pt/SiO<sub>2</sub>, os resultados dos estudos experimentais nos que se trataron as reaccións i.1 e i.2 por separado (3), obtéñense as expresións non lineais que mellor se adaptan ó comportamento cinético do sistema de reacción. As expresións cinéticas son válidas para valores altos da conversión as cales seguen un modelo LHHW.

Para a reacción de hidroxenación do fenol para dar ciclohexanona, a velocidade de desaparición do fenol exprésase segundo a ecuación i.3

$$r_1 = -k_1 \frac{k_A p_A (k_B p_B)^2}{(1 + k_A p_A + k_B p_B + k_C p_C + k_D p_D)^3} \quad \text{i.3}$$

De maneira análoga, para a reacción de hidroxenación do ciclohexanona para dar ciclohexanol, a expresión amósase na ecuación i.4

$$r_2 = -k_2 \frac{k_C p_C (k_B p_B)}{(1 + k_A p_A + k_B p_B + k_C p_C + k_D p_D)^2} \quad \text{i.4}$$

Estas expresións son válidas para o deseño dun reactor sempre e cando a etapa limitante da reacción catalítica é a reacción química. Isto ocorre para partículas cun diámetro de 0,2-0,25 mm (3).

Sendo os subíndices,

A= fenol

B=hidróxeno

C=ciclohexanona

D=ciclohexanol

k :son as constantes de absorción teñen unidades de atm<sup>-1</sup>

p: as presións parciais de cada compoñente en atm

A constante de velocidade para cada reacción xunto cas constantes de absorción recóllense na táboa i.3. Os valores foron obtidos experimentalmente a 150°C e 1 bar de presión nun reactor de leito fixo e testado a diferentes relacións inicial de hidróxeno/fenol (3).

Táboa i.3. Constantes cinéticas. Fonte: (3)

	Reacción 1	Reacción 2
ki (kmol/ kg h)	877	28,7
k <sub>A</sub> (atm) <sup>-1</sup>	9,3	15
k <sub>B</sub> (atm) <sup>-1</sup>	1,1	0,91
k <sub>C</sub> (atm) <sup>-1</sup>	19	7,7
k <sub>D</sub> (atm) <sup>-1</sup>	8	2,6

As presións parciais dependen da composición da mestura de reacción e a da conversión de ambas reaccións. Á súa vez, a composición de cada compoñente da reacción é función

## Planta de producción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

da relación molar de cada un dos compostos e a concentración molar de fenol inicial,  $n_{A0}$ .

Matemáticamente, defínense segundo as ecuacións i.5-i.8:

$$p_A = (1 - y_I) / (1 + G - 2y_I - y_{II}) P \quad \text{i.5}$$

$$p_B = (G - 2y_I - y_{II}) / (1 + G - 2y_I - y_{II}) P \quad \text{i.6}$$

$$p_C = (y_I - y_{II}) / (1 + G - 2y_I - y_{II}) P \quad \text{i.7}$$

$$p_D = y_{II} / (1 + G - 2y_I - y_{II}) P \quad \text{i.8}$$

Onde as conversións  $y_I$  e  $y_{II}$  son as conversións do fenol e do ciclohexanol, respectivamente. Ambas son directamente dependentes da concentración molar relativa do fenol, ( $n_A/n_{A0} = 1 - y_I$ ), ciclohexanona ( $n_C/n_{A0} = y_I - y_{II}$ ) e ciclohexanol ( $n_D/n_{A0} = y_{II}$ ).

$G$  é a relación molar inicial  $H_2$  / fenol

$P$  é a presión de operación ( 3 bar)

### 3.3 Configuración do reactor

A reacción levarase a cabo un reactor de fluxo en pistón onde o catalizador estará distribuído dentro de tubos. En canto as consideracións térmicas, que se abordarán máis adiante, existen dúas opcións posibles : operación adiabática ou configuración similar a un intercambiador de calor tipo carcasa e tubos cun fluído refrixerante circulando por carcasa (4).

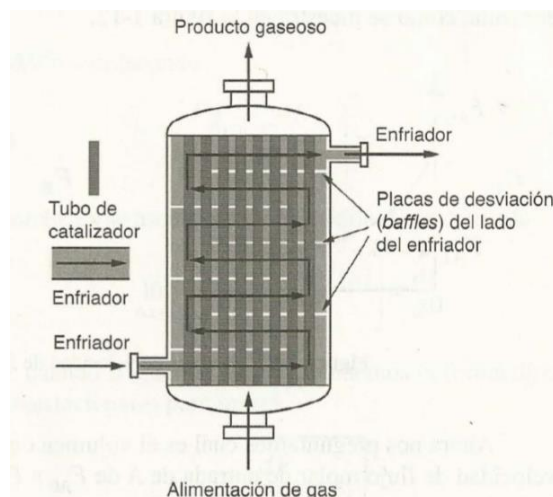


Figura i.6. Reactor multitubular empacado. Fonte: (2)

## 4 Deseño do reactor

### 4.1 Consideracións previas

O deseño de reactores consiste na resolución simultánea de balances de materia, ou ecuacións de deseño do reactor, e os balances de enerxía que forman un sistema de ecuacións.

As ecuacións de deseño son da forma:

$$\frac{dF_A}{dW} = r_1 \quad \text{i.9}$$

$$\frac{dF_B}{dW} = 2r_1 + r_2 \quad \text{i.10}$$

$$\frac{dF_C}{dW} = -r_1 + r_2 \quad \text{i.11}$$

$$\frac{dF_D}{dW} = -r_2 \quad \text{i.12}$$

De novo; A=fenol, B=hidróxeno, C=ciclohexanona e D =ciclohexanol

En canto ó réxime de transmisión de calor as posibilidades son : un RFP adiabático ou RFP isoterma. Se o reactor opera de forma adiabática debido a que ambas reacción son claramente exotérmicas producirase un aumento da temperatura ao longo do volume do reactor segundo a expresión obtida do balance de enerxía:

$$T = T_0 - \left( \frac{\Delta H_{r1}}{C_{pA}} y_I + \frac{\Delta H_{r2}}{C_{pC}} y_{II} \right) \quad \text{i.13}$$

Onde a temperatura final está definida en función de ambos calores de reacción e a conversión exposta no apartado 3.2.Catalizador e Modelo Cinético. Esta configuración é moi sinxela de resolver mais tamén é indesexable por motivos obvios de deseño do equipo e seguridade que volverían inviábel o proxecto. Sendo este motivo máis que de abondo para non abordar o deseño adiabático, as principais razóns para optar por un deseño isoterma son:

## Planta de produción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

As condicións nas que se obtiveron as expresións cinéticas para o catalizador de Pt en xel de sílice son nun reactor de leito catalítico e en condicións isothermas a 150 °C. Por tanto, non se dispón de ningunha información para corrixir a dependencia da constante  $k$  coa temperatura, por exemplo, segundo a expresión de Arrhenius.

Para catalizadores de Pd en soportes metálicos non se atopan evidencias de formación de outros subprodutos como dicitclohexiléter. O único subproduto que si se detecta é o benceno a partir dos 200 °C (5). A presenza deste composto aumentaría de dificultade o proxecto na súa totalidade xa que implicaría un tratamento para a súa eliminación do proceso que se traduce en incremento de custos.

Finalmente, parece evidente que o deseño dun reactor tubular catalítico en condicións isothermas é a solución máis acertada para conseguir o produto desexado sen involucrar un número maior de equipos. Para manter condicións isothermas é preciso empregar un fluído refrixerante que retire o fluxo de calor liberado pola reacción química. Con motivo de facilitar a transmisión de calor dende o leito onde ten lugar a reacción e o fluído refrixerante que circula pola carcasa, o catalizador é distribuído en tubos cilíndricos.

### 4.2 *Estimación da masa de catalizador*

Nun reactor catalítico a cantidade de catalizador necesaria é o parámetro máis interesante a determinar. Sendo neste caso, a única incógnita xa que as demais variables ( $P$ ,  $T$  e conversión) están xa fixadas. Co cálculo da masa de catalizador preténdese, así mesmo, validar os datos cinéticos empregados, e posteriormente, obter o número de tubos requiridos.

Para resolver os sistema de ecuacións cos balances de materia a cada compoñente, faise uso do programa MatLab<sup>®</sup>. Os códigos da función e o programa que resolve o sistema de ecuacións diferenciais atópanse no Anexo III. Emprégase o solucionador de ecuacións diferenciais *ode*. Os resultados amósanse na figura i. 6.

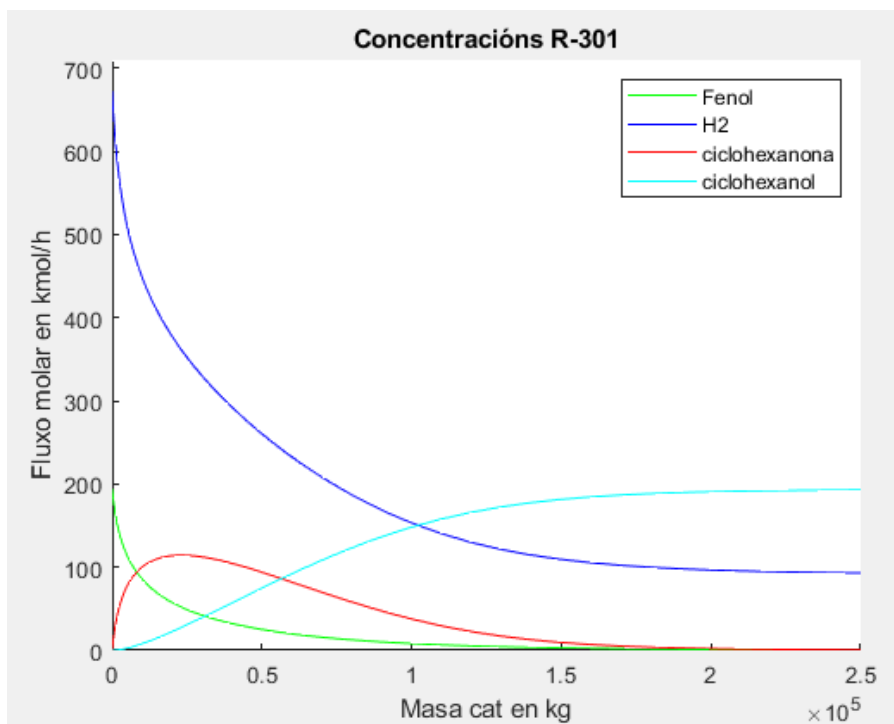


Figura i.7. Perfís de concentracións no reactor. Fonte: Elaboración propia

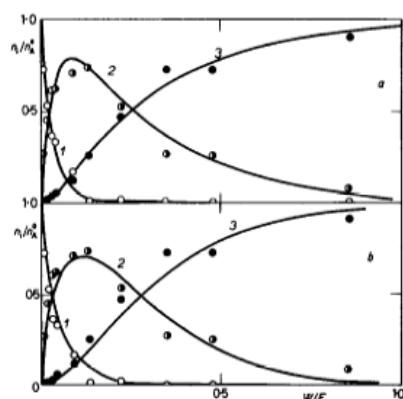


Figura i.8. Curvas de concentración. Fonte: (3)

En primeiro lugar, os perfís de concentracións obtidos mediante a resolución dos balances de materias en MatLab, na figura i.7, amosan unha gran similitude cas curvas obtidas por Hancil and Beránek (3) na figura i.8. Por tanto, pódese concluír que os datos cinéticos empregados para o deseño do reactor son fiables e se axustan ó comportamento do catalizador a 150 °C e 1 atm

## Planta de producción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

En segundo lugar, as conversións supostas no apartado de 3. Condicións de operación, esta cinética é válida para valores de conversión elevados (3).

Por último, co obxecto de estimar a cantidade de catalizador necesario faise uso da figura i.9. Aínda que se supoñen válidos os resultados obtidos, as diferenzas nas condicións de operación non fan posíbel reproducir con exactitude os valores de concentración obtidos na resolución matemática das ecuacións de deseño mediante a resolución dos balances de materia de forma teórica no Anexo I, a suposición do consumo total do fenol non se cumpre. Por este motivo, a estimación da cantidade de catalizador será de maneira aproximada, empregando a figura i.9 e fixando o punto de operación que máis semelle ós caudais obtidos no balance de materia cas conversións e selectividades da táboa i.1. Isto é, onde o caudal de fenol sexa o máis pequeno posíbel e que por tanto se poida desprezar, e onde os caudais de ciclohexanona e ciclohexanol se atopen moi preto e lixeiramente superior o caudal de ciclohexanona.

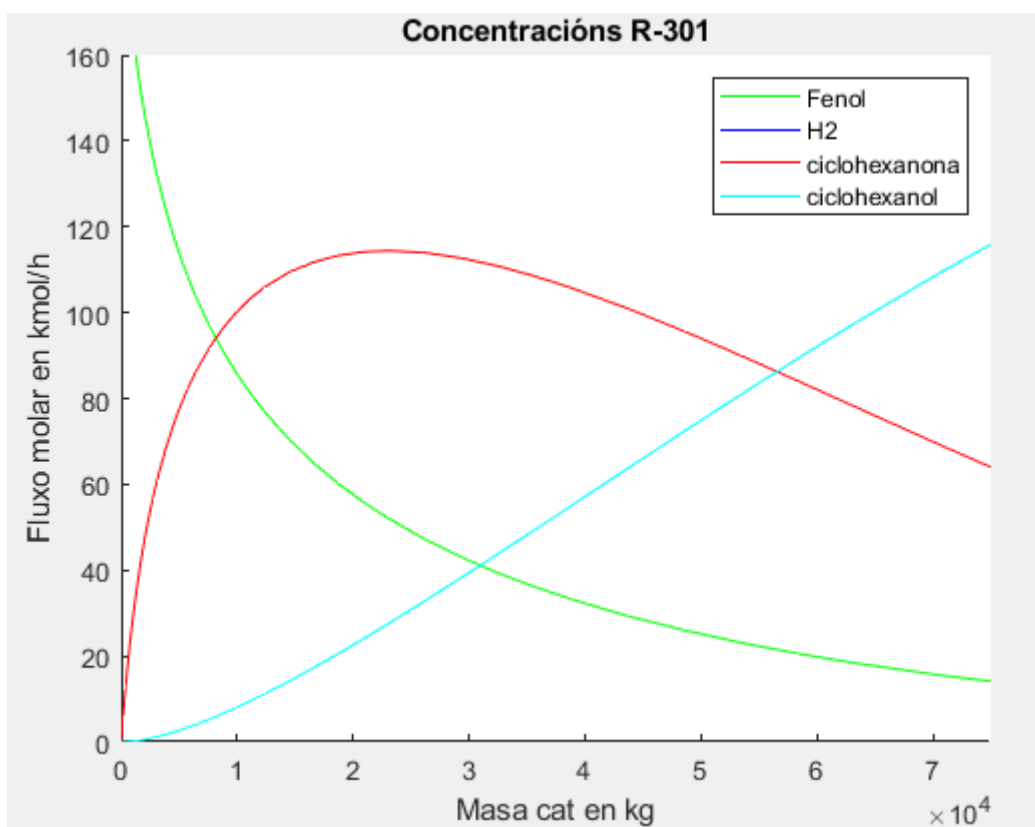


Figura i.9. Ampliación figura i.7. Fonte: elaboración propia

Pódese observar que o punto de operación aproximado as condicións reais do reactor atópase para unha masa de catalizador de 50.000 kg. Por tanto, o reactor opera

isotérmicamente para esa cantidade de catalizador e produce as cantidades de produto reflexadas no Anexo I. Balances de Materia

### 4.3 Cálculo número de tubos

Trátase de determinar cantos tubos fan falla para conter a masa de catalizador calculada. Os tubos encóntranse estandarizados por BWG (Birmingham Wire Gauge) e escóllese un tamaño dúas veces maior que o tamaño estandarizado máis empregado xa que como a cantidade de catalizador é elevada, canto maior sexa o diámetro do tubo menos tubos serán precisos. Para tubos de aceiro *Schedule 40* e DN 80 mm recóllese a información da táboa i.4.

Táboa i.4. Diámetros conducións de aceiro estandarizadas

DN (mm)	do (mm)	di (mm)	Espesor(mm)
80	88,9	77,9	5,49

Escóllese unha lonxitude do tubo estandarizada de 7,32 m por ser un valor típico na industria (8).

O volume que ocupa o catalizador no reactor ven determinado ó dividir a masa de catalizador  $dW$  entre a densidade do leito.

$$dV = \frac{dW}{\rho_{leito}} \quad i.14$$

Onde  $\rho_b$  é a densidade do leito catalítico en  $\text{kg/m}^3$  definido como a densidade da partícula pola fracción de sólidos no leito.

$$\rho_{leito} = \rho_c(1 - \epsilon) \quad i.15$$

Aplícase a expresión de cálculo do volume dun cilindro para determinar o volume que ocupa cada tubo.

$$V_{tubos} = \frac{\pi}{4} d_i^2 L_{tubos} \quad i.16$$

Finalmente, o número de tubos queda calculado

$$N_{tubos} = \frac{dV}{V_{tubos}} \quad i.17$$

Táboa i.6. Volume de catalizador e número de tubos

Magnitude	Valor
dW (kg)	50.000
dV (m <sup>3</sup> )	80,90
ρ <sub>leito</sub> (kg/m <sup>3</sup> )	618
ε	0,4
ρ <sub>c</sub> (kg/m <sup>3</sup> )	1030
d <sub>i</sub> (m)	0,0779
L <sub>tubos</sub> (m)	7,32
V <sub>tubos</sub> (m <sup>3</sup> )	0,035
N <sub>tubos</sub>	2320

#### 4.4 Balance de enerxía

Seguindo a ecuación i.3 no Anexo I. Balances de Materia e Enerxía, considéranse nulas as interaccións de traballo mecánico. Considérase que o volume de control sobre o que se aplica o balance de enerxía é o formado pola corrente gasosa que circula polo interior do tubos. Dado que a reacción é moi exotérmica, durante o transcurso da mesma liberarase un fluxo de calor que se corresponde co calor xerado por reacción química.

$$\sum_j^2 \left( F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i C_{pi} (T_f - T_0) + \dot{Q}_{reacción} \right) = \dot{Q} \quad \left[ \frac{kJ}{h} \right] \quad i.18$$

Sendo

A os moles de composto que define a reacción

i refírese os compostos fenol, hidróxeno, ciclohexanona e ciclohexanol

A relación dos caudais molares dos compostos implicados definido como  $\Theta = \frac{F_{i0}}{F_{A0}}$

A ecuación i.18 é o balance de enerxía en estado estacionario para un sistema non isotermo. O presente deseño persigue unha operación isoterma polo que a diferenza de temperaturas final e inicial é cero polo que o primeiro termo ecuación i.18 anúlase e transfórmase finalmente na ecuación i.19.

Planta de produción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

$$\sum_{j=1}^2 \dot{Q}_j = \dot{Q}_{reacción} \left[ \frac{kJ}{h} \right] \quad i.19$$

Este calor de reacción é retirado polo fluído de carcasa, xa que se pretende manter unha temperatura de operación constante de 180 °C, segundo a ecuación i.19

$$-\dot{Q}_{reacción} = \dot{Q}_{retirado} \left[ \frac{kJ}{h} \right] \quad i.20$$

O calor de reacción calcúlase na ecuación i.21

$$\dot{Q}_{reacción} = \sum_{j=1}^2 F_{A0} X_j \Delta H_{r_j} \left[ \frac{kJ}{h} \right] \quad i.21$$

Sendo j o número de reaccións que teñen lugar. Os caudais molares de cada reacción obtéñense ó resolver o Balance de Materia ó equipo. Para a primeira reacción, A refírese ó fenol, é dicir, o caudal molar inicial de fenol. Para a segunda reacción, A refírese á ciclohexanona, isto é, o caudal molar de ciclohexanona que se forma na reacción.

$$\Delta H_r = \Delta H^{\circ}_R + \left( \frac{\Delta C p_r}{1000} \right) (T - T_R) \left[ \frac{kJ}{mol} \right] \quad i.22$$

O subíndice R indica a temperatura de referencia de 298,15K.

Os calores específicos son obtidos mediante a ecuación i.23 (9).

$$Cp = (a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4) R \quad i.23$$

Sendo R= 8,314 kJ /kmol K e T a temperatura da reacción, 180 °C.

Na táboa i.8 presenta a información termodinámica da reacción:

Táboa i.8. Datos termodinámicos R-201. Fonte: (9)

Magnitude	Valor
Cp fenol (kJ/ kmol K)	149,71
Cp H <sub>2</sub> (kJ/ kmol K)	29,27
Cp ciclohexanona (kJ/ kmol K)	179,27
Cp ciclohexanol (kJ/ kmol K)	190,90
ΔH° fenol (kJ/ mol )	-96,40
ΔH° H <sub>2</sub> (kJ/ mol )	0,00
ΔH° ciclohexanona (kJ/ mol )	-230,12
ΔH° ciclohexanol (kJ/ mol )	-294,55

Onde ΔH° son os calores de formación estándar dos compostos a 298,15 K.

$$\Delta C_p = \sum_{\text{productos}} \Theta_i C_{p_i} - \sum_{\text{reactivos}} \Theta_j C_{p_j} \left[ \frac{\text{kJ}}{\text{kmol K}} \right] \quad \text{i.24}$$

Mediante a ecuación i.24 calcúlase a variación dos calores específicos dos compostos presentes nas reaccións 1 e 2. E onde  $\Theta$  é a relación dos coeficientes estequiométricos de cada composto da reacción co signo correspondente e o coeficiente estequiométrico do reactivo limitante.

O calor de reacción actualizado á temperatura de operación obtense ca ecuación i.25.

$$\Delta H_r = \Delta H^{\circ}_R + \left( \frac{\Delta C_{p_r}}{1000} \right) (T - T_R) \left[ \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \right] \quad \text{i.25}$$

Para ter o fluxo total de calor liberado pola reacción teranse en conta as dúas reaccións que teñen lugar.

Táboa i.9. Calores reacción R-201

Magnitude	Valor
$\Delta H_{r1}$ (kJ/ mol )	-138,21
$\Delta H_{r2}$ (kJ/ mol )	-67,16
$F_{fenol}$ (mol/h)	1,94E+05
$F_{ciclohexanona}$ (mol/h)	1,07E+05
$\dot{Q}_{reacción}$ (kJ/ h )	3,40E+07

Seguindo a ecuación i.20, o calor de reacción é o mesmo que o calor que se retira do sistema. O fluído empregado é auga de caldeira de media presión (bwm), isto é, entra auga líquida saturada en ebulición e producírase vapor de auga saturada a media presión (mps). O calor latente da auga será suficiente para levar a cabo o cambio de fase.

$$\dot{Q}_{retirado} = \dot{m}_{H_2O} \lambda_{vapor_{H_2O}} \quad i.26$$

O balance de enerxía ó fluído de carcasa representado na ecuación i.26 permite coñecer o caudal de auga de caldeira necesario.

Táboa i.11. Balance de enerxía ó fluído térmico

Magnitude	Valor
$\lambda$ (kJ/ kg)	2066,3
$T$ (°C)	165
$\dot{m}_{H_2O}$ (kg/h)	1,65E+04

#### 4.5 Caída de presión por tubos

Un fluxo de caudal cando circula a través dun leito poroso sofre unha caída de presión ,que normalmente, pódese desprezar se a corrente é líquida. A maneira máis común para determinar as perdas de presión por tubos é mediante a ecuación de Ergun (2).

$$\frac{\Delta P}{dz} = -\frac{G}{\rho g c dp} \left( \frac{1-\epsilon}{\epsilon^3} \right) \left[ \frac{150 (1-\epsilon)\mu}{dp} + 1,75G \right] \quad \text{i.27}$$

Sen embargo, unha simplificación desta expresión para números de Reynolds aproximadamente 1000, conduce á Ecuación de Blake-Plummer.

$$\Delta P = 1,75 \frac{\rho u^2}{\Phi dp} \left( \frac{1-\epsilon}{\epsilon^3} \right) L_{tubos} \quad \text{i.28}$$

Definindo o Re en función da velocidade de caudal máxico, a viscosidade do fluído e o diámetro interno dos tubos.

$$Re = \frac{G \mu}{d_i} \quad \text{i.29}$$

Á súa vez ,G calcúlase como a velocidade superficial do gas en m/s pola densidade do fluído en kg/m<sup>3</sup>.

$$G = u \rho \quad \text{i.30}$$

A velocidade do gas en i.22 , onde o fluxo volumétrico é obtido a partir do caudal máxico en kg/h do Anexo 1. Balances de Materia e a densidade da corrente dividido pola sección transversal de fluxo nos tubos e corrixida para unidade de m/s.

$$u = \frac{\text{fluxo volumétrico } \frac{m^3}{h}}{\text{sección tubos } m^2} = \frac{\dot{m}}{\rho \frac{\pi}{4} d_i^2 N_{tubos}} \frac{1}{60^2} \quad \text{i.31}$$

As propiedades físicas da corrente son os valores medios dos datos obtidos en Hysys co paquete termodinámico UNIQUAC.

Táboa i.7. Valores caída de presión por tubos

Magnitude	Valor
$\dot{m}$ (kg/h)	19620
u (m/s)	0,20
$\rho_{media}$ (kg/m <sup>3</sup> )	2,87
G (kg/m <sup>2</sup> s)	0,5
Re	2200
$\epsilon$	0,4
<b><math>\Delta P</math> (kPa)</b>	<b>54,6</b>

#### 4.6 Caída de presión por carcasa

O fluxo do fluído de carcasa non segue un patrón claro e único debido ós elementos internos. Atópase especialmente influenciado pola instalación de deflectores que converte o fluxo caótico polo seu paso. Existen diferentes métodos para calcular o coeficiente de convección e a caída de presión pola carcasa. O método máis empregado é o de Kern (8).

En primeiro lugar determínase o diámetro do feixe de tubos,  $D_b$ . Onde o número de tubo  $N_{tubos}$  e o diámetro exterior dos tubo  $d_o$  son coñecidos.

$$D_b = d_o \left( \frac{N_{tubos}}{K_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} \quad i.32$$

Os parámetros  $n_1$  e  $k_1$  están tabulados e son función da configuración dos tubos e do número de pasos por carcasa .A configuración cadrada ofrece unha caída de presión menor e é a máis cómoda para tarefas de limpeza e mantemento.

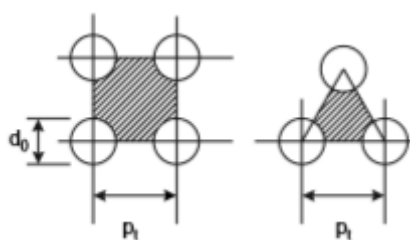


Figura i.10. Disposición dos tubos cadrada (esquerda), triangular (dereita).Fonte : (8)

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
Square pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
$K_1$	0.215	0.156	0.158	0.0402	0.0331
$n_1$	2.207	2.291	2.263	2.617	2.643

Figura i.11.Constantes para a ecuación i.32. Fonte: (8)

Táboa i.12. Valores caída de presión por tubos para un paso por carcasa

Magnitude	Valor	Magnitude	Valor
$p_t=1,25 d_o$ (m)	0,11	$N_{\text{tubos}}$	2320
$k_1$	0,215	$D_b$ (m)	5,974
$n_1$	2,207		

Entre 20- 25% de espazo entre deflectores ( $l_B$ ) ofrece unha boa transferencia de calor e a caída de presión é pequena. A distancia mínima entre tubos chamada claridade ten un valor mínimo de 6,4 mm. O diámetro de carcasa ( $D_s$ ) é a suma do diámetro do feixe de tubos ( $D_b$ ) máis a claridade , é dicir; 5,980 (8).

Defínese a area de fluxo transversal como

$$A_s = \frac{(p_t - d_o) D_s l_B}{p_t} \quad \text{i.33}$$

Calcúlanse as velocidades máxicas,  $G_s$  (kg/m<sup>2</sup>s), e velocidade lineal  $u_s$  (m/s)

$$G_s = \frac{W_s}{A_s} \quad \text{i.34}$$

$$u_s = \frac{G_s}{\rho} \quad \text{i.35}$$

$W_s$  é o caudal máxico do fluído de refrixerante en kg/s . O cálculo implica un balance de enerxía que se desenvolve no Anexo I.

A expresión para determinar o diámetro equivalente ou diámetro hidráulico depende da xeometría da distribución dos tubos. Para unha xeometría cadrada emprégase i.36.

$$d_e = \frac{1,27 (p_t^2 - 0,785 d_o^2)}{d_o} \quad \text{i.36}$$

Calcúlase o Reynolds e o Prandtl

$$Re = \frac{G_s}{\mu} \quad \text{i.37}$$

$$Pr = \frac{C_p \mu}{k_f} \quad \text{i.38}$$

Táboa i.13. Valores ecuacións i.33 – i.38

Magnitude	Valor	Magnitude	Valor
$A_s$ (m <sup>2</sup> )	1,78	Re	3330
$W_s$ (kg/s)	16443,45	$C_p$ ( kJ/kg K)	3,688
$G_s$ (kg/s m <sup>2</sup> )	2,55	$\mu$ (kg/ m s)	8,92E-05
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	437,37	$k_f$ (W/m K)	0,3564
$u_s$ (m/s)	0,0058	Pr	0,923
$d_e$ (m)	0,12		

As propiedades físicas do fluído de carcasa tómanse como os valores medios da auga de caldeira (bwm) que se toma como auga saturada á entrada e o vapor de media presión (mps), 7MPa á saída.

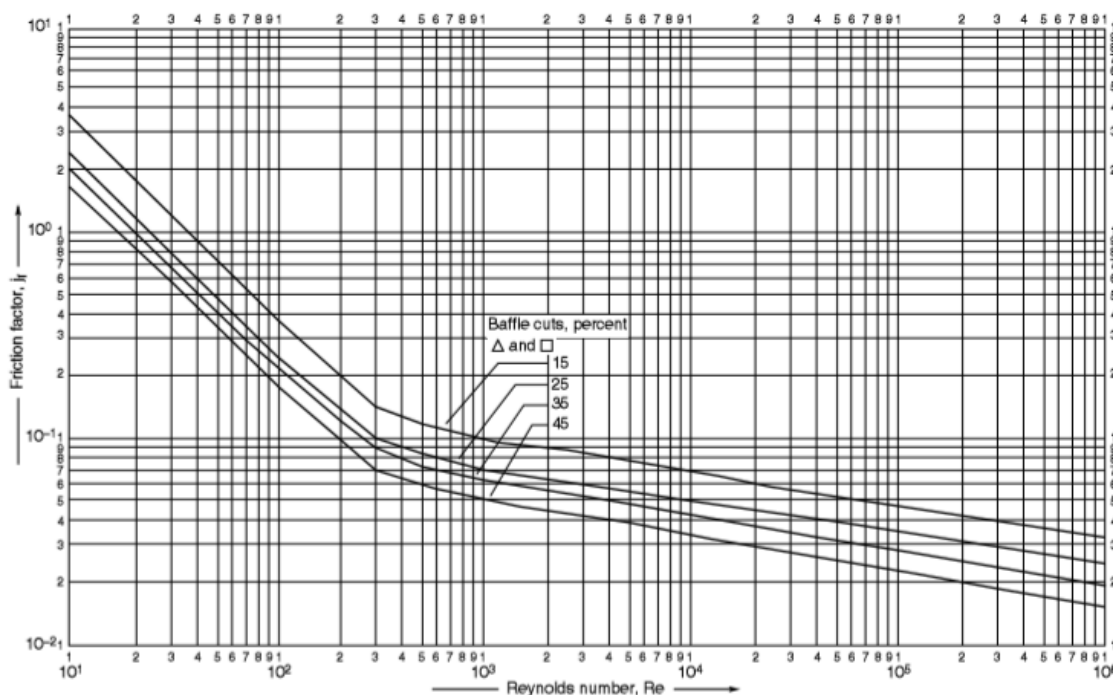


Figura i.12. Coeficiente de fricción carcasa. Fonte: (8)

Na figura i.12 entrando no eixo x co valor do Re da táboa i.13 e para un espazo do 25%, lese o coeficiente  $j_f$  cun valor de 0,06. Finalmente, empregando a ecuación i.36 obtense a caída de presión por carcasa.

$$\Delta P_{carcasa} = 8 j_f \left( \frac{D_s}{d_e} \right) \left( \frac{L_{tubos}}{l_B} \right) \frac{(u_s^2 \rho)}{2} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right) \quad i.39$$

Táboa i.14. Caída de presión total

Magnitude	Valor
$\Delta P$ tubos (kPa)	54,6
$\Delta P$ carcasa (kPa)	0,9
$\Delta P$ total (kPa)	55,5
P operación (kPa)	300
$\Delta P$ (%)	18,5

Se ben os valores obtidos non se poden considerar depreciábeis, especialmente no lado dos tubos, son cifras que se consideran aceptables. Tendo en conta que o reactor R-201 opera con caudais elevados e a conversión máxima, o que implica unha gran cantidade de catalizador, era esperable que o gas na súa circulación a través do leito sufrira unha perda de presión apreciable. Por tanto, é inevitable descartar esta caída de presión mais a efectos de deseño, considérase aceptable.

#### 4.7 Cálculo do coeficiente global de transmisión de calor, $U$ .

Posto que se trata dunha serie de reaccións cun carácter claramente exotérmico, é interesante coñecer como é o mecanismo de transmisión de calor no reactor. Especial atención debe prestarse á transferencia de calor do fluído que circula polos tubos cara o fluído térmico. Posto que a reacción libera un fluxo de calor moi elevado e se pretende manter a temperatura constante dentro dos tubos, a transferencia de calor dese ser moi boa para cumprir este propósito. A ecuación i.40 mostra o fluxo enerxético como unha analogía á Lei de Ohm empregada nos circuitos eléctricos.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{od}} + d_o \left( \frac{\ln \left( \frac{d_o}{d_i} \right)}{2 k_{tubos}} \right) + \frac{d_o}{d_i} \left( \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{id}} \right) \quad \text{i.40}$$

Onde  $h_{id}$  e  $h_{od}$  son as resistencias ós fluxos por convección dentro e fóra dos tubos respectivamente e se atopan tabulados (8). O coeficiente de condución de calor  $k_{tubos}$  é

desexable que sexa o máis alto posible e o máis económico posíbel, a discusión da elección do material dos tubos abordase no apartado 5.1. Selección do material.

#### 4.7.1 Cálculo do coeficiente de convección de tubos

Empregase a expresión i.41 para o arrefriamento dunha corrente gasosa desde un tubo cheo de partículas esféricas (4).

$$Nu = 3,5Re_p^{0,7} e^{\left(-4,6\frac{d_p}{d_{tubos}}\right)} \quad \text{i.41}$$

Sendo  $d_p$  o diámetro da partícula e  $d_{tubos}$  o diámetro interno dos tubos.

A súa vez o número de Nusselt,  $Nu$  defínese a partir do diámetro de tubos  $d_{tubos}$ , a condutividade térmica,  $k_f$  e o coeficiente de convección do fluído de proceso,  $h_i$ .

$$Nu = \frac{h_i d_{tubos}}{k_f} \quad \text{i.42}$$

Cálculo do número adimensional Reynolds,  $Re_p$ , a partir da velocidade superficial da corrente de gas,  $u_s$ , a súa densidade  $\rho$  e a viscosidade  $\mu$ .

$$Re_p = \frac{u_s d_p \rho}{\mu} \quad \text{i.43}$$

Táboa i.15. Coeficiente convección tubos

Magnitude	Valor
$d_p$ (mm)	0,22
$d_{tubos}$ (mm)	77,9
$u_s$ (m/s)	0,20
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	2,43
$\mu$ (kg/m s)	1,75E-05
$k_f$ (W/m K)	0,10
$C_p$ (kJ /kg °C)	2,32
$h_i$ (W /m <sup>2</sup> K)	15,8

Os valores de  $C_p$  e  $k_f$  son os valores medios das correntes de entrada e saída do reactor R-201 en Hysys, paquete UNIQUAC.

#### 4.7.2 Cálculo do coeficiente de convección de carcasa.

Empregase a expresión i.44 para a transmisión de calor desde leito empacado (4).

$$Nu = 2,26Re_p^{0,8}Pr^{0,33} e^{\left(-6\frac{d_p}{d_{tubos}}\right)} \quad i.44$$

Sendo  $d_p$  o diámetro da partícula e  $d_{tubos}$  o diámetro interno dos tubos.

A súa vez o número de Nusselt,  $Nu$ , e o número de Reynolds  $Re_p$  defínense como as ecuacións i.42 e i.43, respectivamente.

O número de  $Pr$  obtense mediante o calor específico,  $C_p$ , a viscosidade do fluído de carcasa  $\mu$  e a condutividade térmica  $k_f$ .

$$Pr = \frac{C_p \mu}{k_f} \quad i.45$$

Táboa i.16. Coeficiente convección carcasa

Magnitude	Valor
$d_p$ (mm)	0,22
$d_{tubos}$ (mm)	77,9
$u_s$ (m/s)	0,006
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	437,37
$\mu$ (kg/m s)	8,92E+05
$k_f$ (W/m K)	0,3564
$C_p$ (kJ /kg °C)	3,69
$Pr$	0,923
$h_{od}$ (W /m <sup>2</sup> K)	43,3

Os valores de  $C_p$ ,  $k_f$  e a viscosidade  $\mu$  son os valores medios do fluído de carcasa que entra como auga de caldeira e sae como vapor saturado a media presión simulada en Hysys, paquete UNIQUAC.

Táboa i.17. Cálculo U ecuación i.40

Magnitude	Valor
$d_o$ (mm)	88,9
$d_i$ (mm)	77,9
$k_{\text{tubos}}$ (W/m K)	63,3
$h_i$ (W /m <sup>2</sup> K)	15,8
$h_{id}$ (W /m <sup>2</sup> K)	5E+03
$h_o$ (W /m <sup>2</sup> K)	43,3
$h_{od}$ (W /m <sup>2</sup> K)	6,25E+03
$U$ (W /m <sup>2</sup> K)	24

O valor do coeficiente global de transmisión de calor  $U_o$  é menor que o que podía esperarse se fose estimado empregando o nomograma de Frank (8), aproximadamente 800 W/m<sup>2</sup> K. Sen embargo, segundo a fonte bibliográfica principal deste proxecto, o valor estaría entre os 70 e 100 W/m<sup>2</sup> K. Segue sendo lixeiramente menor incluso mais mantense dentro da orde de unidades.

Por outra parte, a información de máis valor que se pode extraer é que a transferencia de calor de tubos cara carcasa domina sobre a transferencia de calor da carcasa cara o exterior. Considéranse boas novas pois como tal e como se indicou ó comezo deste apartado, é moi importante asegurar unha correcta transmisión de calor dos tubos cara o fluído térmico para que a temperatura de reacción se manteña constante.

## 5 Deseño mecánico

### 5.1 Selección do material de construción

O material de construción dun recipiente a presión debe ser capaz de aguantar os efectos térmicos, manter a contención do interior do recipiente, ser compatible quimicamente cos produtos do proceso e ser resistente á corrosión (8).

## Planta de producción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

Para a selección do material séguese o Método Ashby (10) polo cal dependendo das propiedades que se pretenden obter nese material, búscase un índice M que se optimiza (maximizar ou minimizar) segundo as necesidades. No caso dun recipiente a presión, un deseño seguro é aquel que segue o criterio de “fuga antes da rotura”. Isto é, prodúcese unha fuga do material que contén momentos antes de que unha fisura se propague pola estrutura do recipiente, podendo así amañala antes de que rompa o recipiente (10).

Segundo a metodoloxía Ashby, o índice M que se busca é a expresión i. 46 (10):

$$M1 = \frac{K_{IC}^2}{\sigma_f} \quad \text{i.46}$$

Sendo

$$\sigma = \frac{p R}{2 t} \quad \text{i.47}$$

Onde ,

$\sigma$ = módulo de elasticidade

p = presión de operación

t= espesor da parede

R= radio

$K_{IC}$  = tenacidade á deformación plana

Finalmente a condición segura para o criterio “leak before break” alcánzase para

$$p \leq \frac{4}{\pi R} \left( \frac{K_{IC}^2}{\sigma_f} \right) \quad \text{i.48}$$

Polo tanto, o índice M debe ser maximizado empregando a figura i.13

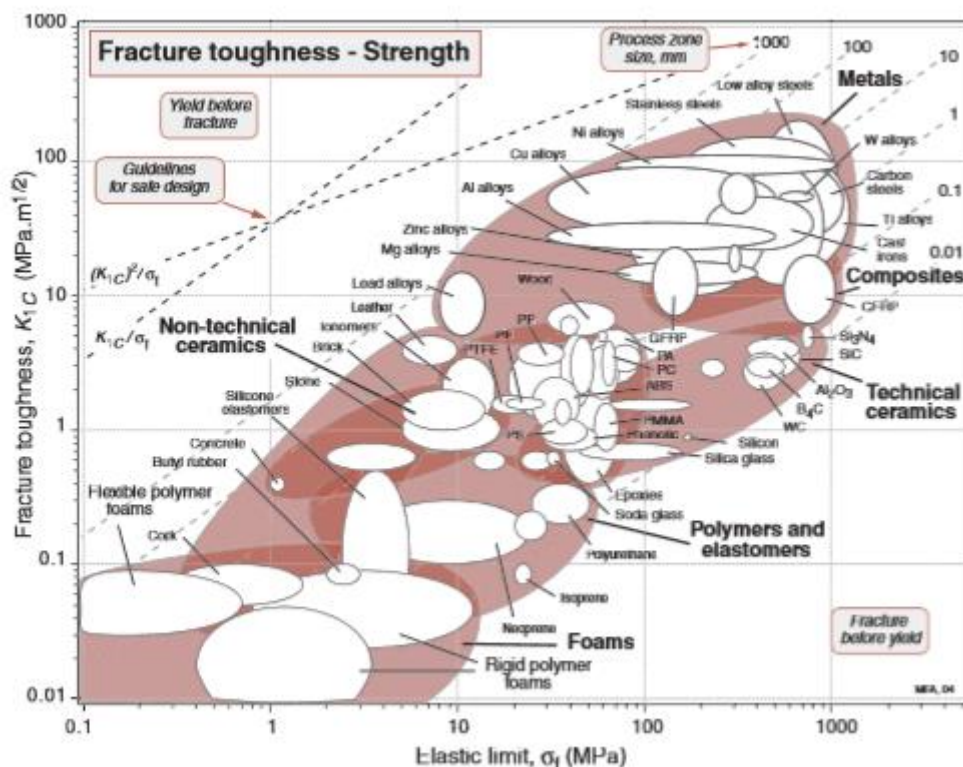


Figura i.14 Tenacidade á rotura vs módulo elástico. Fonte: (10)

Para obter o valor máximo do índice M1 só é preciso localizar a liña auxiliar que define M e desprazala trazando liñas paralelas e fixar os materiais que cumpre esa condición. Neste caso ademais compre que o material teña o modulo de elasticidade o máis elevado posible.

Isto é no referido ó material para a carcasa, pola contra, o material para os tubos debe satisfacer un criterio ben distinto. A principal característica do material dos tubos debe ser a condución de calor, tal e como se comentou no apartado Cálculo de convección de carcasa. Entón o índice a maximizar neste caso é a ecuación i.48

$$M2 = \frac{\lambda}{a^2} \quad \text{i.49}$$

É dicir, debe prevalecer a condutividade térmica,  $\lambda$ , á difusividade térmica,  $a$ .

De novo faise uso dunha gráfica coma a da figura i.13 para obter os materiais para o maior valor de M2 e procédese do mesmo xeito.

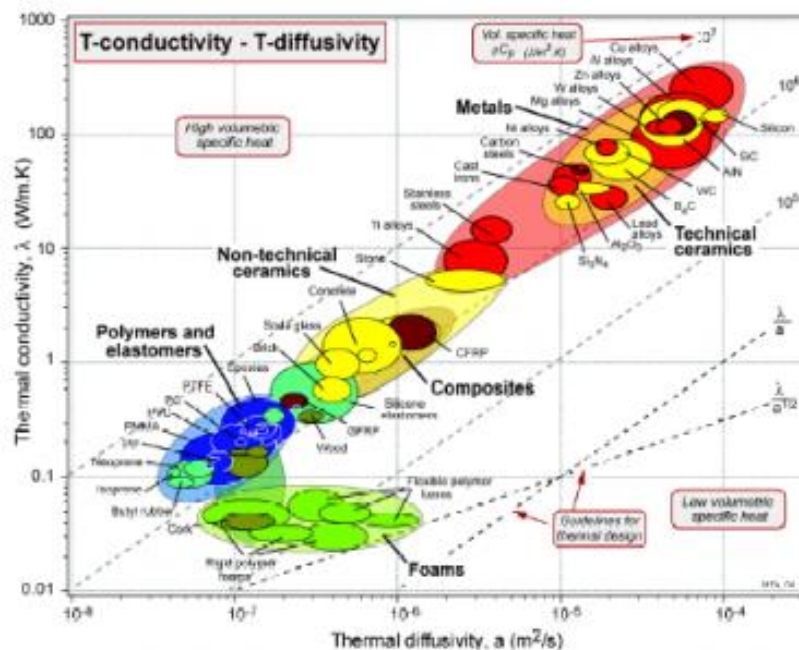


Figura i.15. Condutividade térmica vs difusividade térmica. Fonte: (9)

Os posibles materiais para a carcasa e que por tanto maximizan M1 son : aceiros de baixa aleación, aceiro inoxidable e aceiros ó carbono. Para os tubos o material que mellor maximiza M2 son aleacións de cobre. Finalmente, o criterio decisivo será económico, o custo co cobre é moito maior que o de calquera aceiro que tamén satisfai o índice M2 .Os aceiros son materiais moi comúns na industria, que se adaptan a multitude de procesos e equipos. Asemade, o aceiro ó carbono ten un valor para a transmisión de calor moderadamente alto na bibliografía onde se poden atopar datos da condutividade térmica (11).

Por tanto os material para carcasa será: aceiro inoxidable 316

Para tubos: aceiro ó carbono AISI 1010

### 5.2 Cálculo espesor da parede

Para o cálculo do espesor da parede séguense a metodoloxía presente no Sinnot (8), que a súa vez trata os estándares do Código ASME BPV Sección VIII Div. 1

En primeiro lugar, defínese a temperatura e presión de deseño como un sobredimensionamento da presión e temperatura de deseño, tal e como se mostra nas ecuacións i.50 e i.51.

$$P_{deseño} = P_i = P_{operación} \cdot 1,1 \quad i.50$$

$$T_{deseño} = T_i = T_{operación} + 50^{\circ}\text{F} \quad i.51$$

As expresións para o cálculo do espesor en función dos esforzos radial e lonxitudinal para recipientes cilíndricos, respectivamente son

$$\text{Esfuerzo radial: } t = \frac{P_i d_i}{2 S E - 1,2 P_i} \quad i.52$$

$$\text{Esfuerzo lonxitudinal: } t = \frac{P_i d_i}{4 S E - 0,8 P_i} \quad i.53$$

Outras consideracións son,

eficacia de soldadura,  $S=1$

$E= 120\text{MPa}$

Táboa i.18. Espesores parede

Espesor	t (mm)
Radial	8,23
Lonxitudinal	4,1

Os cabezais poden ser tipo plano ou con forma de bóveda. Estes últimos poden ser esféricos, elípticos ou toriesféricos.

$$\text{Plano: } t = D_e \sqrt{\frac{C P_i}{S E}} \quad i.54$$

$$\text{Hemiesférico: } t = \frac{P_i d_i}{4 S E - 0,4 P_i} \quad i.55$$

$$\text{Elíptico: } t = \frac{P_i d_i}{2 S E - 0,2 P_i} \quad i.56$$

$$\text{Toriesférico: } t = \frac{0,885 P_i d_i}{S E - 0,1 P_i} \quad i.57$$

Táboa i.19. Espesores cabezais

Cabezal	t (mm)
Plano	61
Hemisférico	4,11
Elíptico	8,22
Toriesférico	14,55

Selecciónase o maior valor do espesor da parede calculados polos esforzos radial e lonxitudinal. Dado que o diámetro do recipiente é superior ó maior diámetro estandarizado por TEMA, non existe un valor mínimo para o espesor (8).

Por este motivo, engádense o valor do espesor mínimo para o diámetro máis alto según TEMA recollido no Sinnot cun valor de 12 mm (8). En canto á corrosión do material, asúmense os 4 mm para corrixir a corrosión como valor máximo (8).

Por tanto, o espesor final será  $8,23 \text{ mm} + 12 \text{ mm} + 4 \text{ mm} = 24,23 \text{ mm}$ . O resultado semella un espesor aceptable para un recipiente de gran diámetro e elevados caudais de proceso.

A discusión para o tipo de cabezal está condicionada polo custo de fabricación e a presión de operación de cada tipo de cabezal. Os cabezais planos son empregados para baixas presións aínda que son os máis baratos. Dentro dos cabezais de bóveda : os cabezais elípticos son escollidos para presións superiores a 15 bar; os hemisféricos son máis robustos e soportan presións elevadas ós toriesféricos. Por criterios económicos, escóllese o uso de cabezais toriesféricos ,xa que son máis baratos que os hemisféricos.

Os cabezais toriesféricos teñen una relación 3:1 . Isto quere dicir que a altura dos cabezais toriesféricos é 3 veces menor que o diámetro exterior da carcasa  $D_o$ . A altura de cada cabezal toriesférico será de un terzo de 5,98 , aprox. 2 m . Como se teñen dous cabezais, a altura total do recipiente é de 11,32 m.

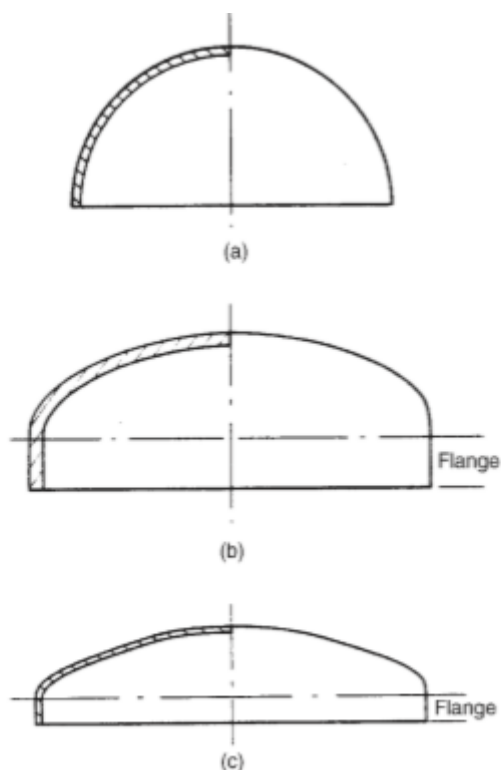


Figura i.15 Cabezais abovedados a) hemisférico b) elíptico c) toriesférico. Fonte: (8)

### 5.3 *Espesor illante*

O illante ten como obxectivos principais reducir as perdas de calor cara o ambiente e manter unha condición de seguridade ó tocar.

Por motivos de eficiencia enerxética resulta interesante evitar que grandes cantidades de calor escapen pola parede do reactor. O fluído térmico absorbe todo o fluxo de calor que se libera froito da reacción exotérmica ó longo do reactor e se supón un estado de equilibrio térmico entre o fluído de carcasa e o gas. É dicir, que o fluído térmico extrae durante o transcurso da reacción a cantidade de calor precisa para que a corrente gasosa se manteña a 180 °C en todo momento. Baixo esta suposición, se en determinados puntos do reactor se producen fugas de calor, alteraría este suposto equilibrio dos fluxos de calor.

En materia de seguridade, que se aborda en profundidade no estudo de Seguridade no documento de Memoria, ó tratarse dunha reacción moi exotérmica é primordial que o fluxo de calor pola reacción non afecte ó equipos do arredor e ademais, manteña unha temperatura na superficie exterior do reactor a cal non supoña riscos para os operarios de planta o realizar labores de mantemento.

A resolución é análoga a un circuíto eléctrico onde os espesores da parede do reactor e illante, que é a incógnita, actúan como dúas resistencias en serie que se opoñen ó fluxo calorífico neste caso. No exterior do reactor, supóñense condicións de aire a 25 °C que así mesmo significa unha resistencia convectiva combinada coa resistencia de radiación en paralelo.

A temperatura na parede interior do reactor,  $T_1$ , suponse a máxima temperatura que alcanza o fluído térmico na carcasa, 200°C. Por outra banda, a temperatura na superficie exterior do reactor,  $T_s$  suponse dun valor de 50 °C segundo bibliografía, (11).

O criterio para seleccionar o material illante é que teña una pobre condución térmica, é dicir, unha constante de condutividade térmica baixa a un prezo económico. Existen unha variedade grande de materiais deseñados especialmente con propiedades illantes en procesos industriais. Escóllese un material illante de lá mineral subministrado pola empresa Diaterm Distribuciones SAU (12).

Realízase o balance de enerxía á parede do reactor en estado estacionario e onde non se xera calor por reacción química. Por tanto, o fluxo de calor que entra á parede interior do reactor é o mesmo que sae pola parede exterior do reactor ó ambiente (11).

$$E_{entrada} = E_{saida} \quad i.58$$

O fluxo de calor é a relación entre a forza impulsora e a resistencia que se atopa ó paso. A forza impulsora nos fenómenos de transmisión de calor é a diferenza de temperaturas e a oposición ó paso son as resistencia á transmisión de calor, a inversa das constantes de condutividade térmica ( $k_A$  para a parede do reactor e  $k_B$  para o material illante). Seguindo as expresións para unha xeometría cilíndrica, a expresión i.57 transfórmase en :

$$\frac{T_1 - T_s}{\frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{2 \pi L_{tubos} k_A} + \frac{\ln\left(\frac{r_3}{r_2}\right)}{2 \pi L_{tubos} k_B}} = \frac{T_s - T_\infty}{\frac{1}{2 \pi r_3 (h_\infty + h_r)}} \quad i.59$$

## Planta de produción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

O radio  $r_1$  é a distancia dende o centro reactor ata a parede interior do mesmo,  $r_2$  é o espesor da parede do reactor engadido ó radio  $r_1$ . O radio  $r_3$  é o radio  $r_2$  máis o espesor do illante,  $L_B$ .

$T_1$  é a temperatura da parede interior do reactor

$T_s$  é a temperatura do exterior do reactor

$T_\infty$  é a temperatura do fluído exterior, aire en condicións estándar.

O coeficiente de convección por radiación,  $h_r$  é función da constante de Boltzman  $\sigma$ , a constante de emisividade da superficie,  $\epsilon$ , e as temperaturas  $T_s$  e  $T_\infty$ .

$$h_r = \epsilon \sigma (T_s - T_\infty) (T_s^2 + T_\infty^2) \quad \text{i.60}$$

A ecuación i.58 foi resolta empregando o solucionador da calculadora HP PRIME, os valores de cada magnitude e do espesor amósanse na táboa i.20. O valor das constantes proceden do Incropera (11).

Táboa i.20. Cálculo do espesor do illante

Magnitude	Valor
Radio, $r_1$ (m)	2,99
Radio, $r_2$ (m)	3,01
$\epsilon$	0,17
$T_\infty$ (°C)	25
$h_{\infty, \text{aire}}$ (W/m <sup>2</sup> K)	6
$k_A$ (W/m K)	15,1
$k_B$ (W/m K)	0,046
$L_B$ (m)	0,030
$T_1$ (°C)	165
$T_s$ (°C)	50
$h_r$ (W/m <sup>2</sup> K)	0,65

Estímase o caudal de calor que se perde polas paredes do reactor a pesares de engadir material illante. Seguindo o balance de enerxía da ecuación i.57 e a expresión para o fluxo de calor na ecuación i.58, as perdas de calor obtéñense como:

$$q_{perdas} = \frac{T_1 - T_s}{\frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{2 \pi L_{tubos} k_A} + \frac{\ln\left(\frac{r_3}{r_2}\right)}{2 \pi L_{tubos} k_B}} \quad \text{i.61}$$

Para  $L_{tubos} = 7,32 \text{ m}$ , o fluxo calorífico que sae do reactor é de 23,42 kW. Isto é un 0,26 % do calor total que se libera na reacción.

#### 5.4 Esforzos por cargas por cargas combinadas

Un recipiente a presión non só soporta cargas debidas á presión interna ou externa. Existen cargas polo propio peso do recipiente, esforzos pola exposición ó vento ou ó terremotos. Para o deseño do reactor R-201, faise o deseño de cargas no peor escenario posible co fin que o esforzo máximo permitido non sexa superado en ningún punto do equipo. (8)

O deseño mecánico segue a estrutura atopada no Sinnott (8).

Táboa i.21. Información para o deseño de cargas

Magnitude	Valor
$\rho_{carcasa} \text{ (kg/m}^3\text{)}$	8283
$\rho_{tubos} \text{ (kg/m}^3\text{)}$	783
altura total, h (m)	11,32
diámetro ,D <sub>o</sub> (m)	5,98
espesor, t (m)	0,02423
espesor illante, L <sub>B</sub> (m)	0,03
$\rho_{illante} \text{ (kg/m}^3\text{)}$	190
Volume catalizador, V <sub>c</sub> (m <sup>3</sup> )	80,90
$\rho_{leito} \text{ (kg/m}^3\text{)}$	618
N <sub>tubos</sub>	2320
u <sub>w</sub> (km/h)	150
a <sub>e</sub>	0,12

#### 5.4.1 Peso total do recipiente

O peso total ten en conta o peso non só do recipiente, tamén se engade o peso do catalizador, o peso dos tubos de catalizador e o illante.

Para calcular o peso do recipiente, farase uso da expresión i.60. O factor  $C_V$  comprende os accesorios internos do recipiente e toma valor de 1,15 para columnas de destilación con pratos e 1,08 para recipientes con menos internos.

$$W_v = C_v \pi \rho_{carcasa} (D_o + t) 9,81 (h + 0,8(D_o + t)) t 10^{-3} \quad i.62$$

O peso de catalizador é determinado seguindo a fórmula do produto da masa pola aceleración da gravidade,  $9,81 \text{ m/s}^2$ . A masa obtense multiplicando a densidade do leito polo volume de catalizador total.

$$W_c = V_C \rho_{leito} 9,81 \quad i.63$$

De maneira análoga, a masa total dos tubos que forman o reactor obtense polo produto do volume que ocupa cada tubo,  $V_{tubos}$ , e a densidade do material dos tubos que é aceiro ó carbono AISI 1010,  $\rho_{tubos}$ .

$$W_t = V_{tubos} N_{tubos} \rho_{tubos} 9,81 \quad i.64$$

E por último, a densidade do material illante lá mineral está tabulado (11). O volume que ocupa determínase aplicando unha xeometría rectangular de area da base  $= D_o \times h$ , e multiplicado pola altura que nese caso é o espesor,  $L_B$ .

$$W_{illante} = \rho_{illante} \pi D_o h L_B 9,81 \quad i.65$$

Táboa i.22. Información para o deseño de cargas

Magnitude ( kN)	Valor
$W_V$	643,18
$W_C$	490,46
$V_t$ (m <sup>3</sup> )	6,95E+05
$W_t$	1,24
$2 \times W_{illante}$	15,38
<b><math>W_T</math></b>	<b>1150,26</b>

#### 5.4.2 Carga por vento

Debido a distintos accesorios atracado ó depósito como poden ser conducións ou escaleiras, emprégase un factor de 0,07.

Sendo  $D_e$  o diámetro total do recipiente incluíndo o espesor do illante a ambos lados, 6,10 m.

$$F_w = 0,07 u_w^2 D_e \quad i.66$$

#### 5.4.3 Carga por terremotos

O valor da aceleración da terra foi obtido a partir da información presenta na Memoria no apartado Xustificación da localización que a súa vez foi obtido do Instituto Nacional de Geografía.

$$F_s = a_e \left( \frac{W_T}{9,81} \right) \quad i.67$$

### 5.5 *Análise de esforzos*

As cargas calculadas provocan que o material do recipiente soporte esforzos. Con este análise trátase de comprobar se o deseño mecánico pode aguantar estes esforzos e se o deseño mecánico do recipiente é válido (8).

## Planta de produción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

A presión interna ou externa provocan os principais tipos de esforzos que un recipiente soporta. Na figura i.16 amósanse os esforzos lonxitudinais e radiais como os principais esforzos a ter en conta. Así como as presións exercen esforzos sobre o recipiente, tamén o propio peso do recipiente exerce un esforzo  $\sigma_w$ . A diferenza dos esforzos principais,  $\sigma_w$  só se considera en recipiente de gran altura (8).

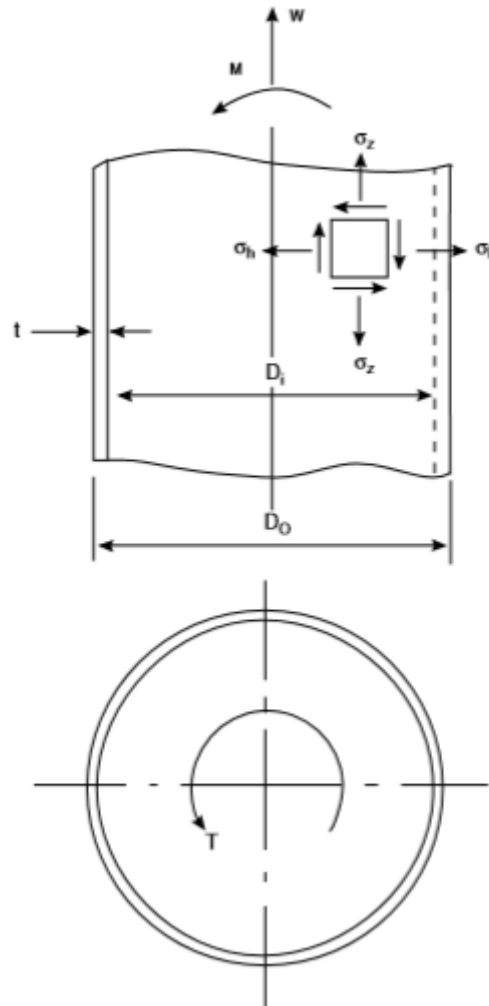


Figura i.16. Principais esforzos en recipientes cilíndricos. Fonte: (8)

As expresións que definen estes esforzos son as que seguen. Os esforzos mídense en Pa que é a unidade de presión no SI, por tanto o cálculo é análogo a calcular una presión. É dicir, unha forza dividida por unidade de superficie. Para os esforzos lonxitudinais e radiais existen as ecuacións i.68 e i. 69 (8).

$$\sigma_L = \frac{P_i D_i}{4 t} \quad \text{i.68}$$

$$\sigma_h = \frac{P_i D_i}{2 t} \quad \text{i.69}$$

Ambas expresións inclúen a presión de deseño,  $P_i$ , o diámetro interno da carcasa  $D_i$  e o espesor da carcasa,  $t$ .

Para calcular o esforzo por peso  $\sigma_w$ , a expresión cambia xa que non intervén a presión que se exerce sobre o recipiente. Atendendo á figura i.16, a forza é o propio peso  $W_T$  do recipiente e a area é a base do cilindro (incluído o espesor da carcasa) (8).

$$\sigma_w = \frac{W_T}{\pi (D_i + t)t} \quad \text{i.70}$$

O seguinte tipo de esforzos son os relacionados coas cargas por vento e movementos de terra (terremotos) denominados esforzos de pandeo  $\sigma_b$ . A modo de exemplo ilústrase o cálculo para o esforzo de pandeo por cargas de vento (8).

O primeiro paso é calcular o momento de inercia  $I_V$ . Depende dos diámetro interno da carcasa  $D_i$  e do diámetro total da carcasa  $D_o$  ( suma de  $D_i + 2t$ ) (8).

$$I_V = \frac{\pi}{64} (D_i^4 - D_o^4) \quad \text{i.71}$$

A continuación, determínase o momento total de pandeo por cargas de vento  $M_V$ . Onde  $F_w$  é a presión dinámica do vento (8).

$$M_V = \frac{F_w h}{2} \quad \text{i.72}$$

Finalmente,  $\sigma_b$  determínase como

$$\sigma_b = \pm \frac{M_V}{I_V} \left( \frac{D_i}{2} + t \right) \quad \text{i.73}$$

Pode ter signo positivo ou negativo en función de en que lado do eixo se sitúe. O signo positivo significa esforzo de compresión e o signo negativo é para un esforzo de tracción (8).

Os esforzos lonxitudinais resultantes pola carga do vento,  $\sigma_z$ , poden ser : contra do vento (1\*) ou favor do vento (2\*)

$$\sigma_z(1 *) = \sigma_L + \sigma_w + \sigma_B \quad \text{i.74}$$

$$\sigma_z(2 *) = \sigma_L + \sigma_w - \sigma_B$$

O esforzo radial pódese desprezar e tomar como  $\pi/2$ .

Táboa i.23. Resumo cargas combinadas e esforzos.

Magnitude	Valor
$F_w$ (kN )	9,45
$F_s$ (kN )	14,07
$\sigma_L$ (kN)	20,4
$\sigma_h$ (kN)	40,8
$\sigma_w$ (kN)	2,5
$\sigma_b$ (kN)	1,45
$I_V$ (m <sup>4</sup> )	5,2
$M_V$ (kN m)	33,24
$\sigma_z$ (kN) (1)	17,4
$\sigma_z$ (kN) (2)	15,6

A maior diferenza entre os principais esforzos ocorre cando  $\sigma_L - \sigma_z = 40,8 - 15,6 = 25,2$  kN. A estabilidade elástica,  $\sigma_c$  é o punto a partir do cal pola acción das cargas combinadas o depósito pode romper. O módulo E para o material aceiro inoxidable AISI 316 é 200 MPa a temperatura ambiente (8).

$$\sigma_c = E \left( \frac{t}{D_o} \right) \quad i.76$$

O valor máximo do esforzo por compresión prodúcese cando sobre o recipiente non se exerce presión,  $\sigma_w + \sigma_b$  (8).

$\sigma_c$  ten un valor de 79,3 MPa moi inferior do valor de esforzo máximo  $E = 200$  MPa. Por outra banda, a suma dos esforzos por compresión cando no se exerce presión no recipiente é de 4,72. De novo é un valor moi inferior a  $\sigma_c$ . Conclúese que pasa as dimensións actuais do recipiente, non se alcanza ningún punto no cal se poida producir o colapso do material, por tanto o deseño mecánico é satisfactorio (8).

### 5.6 Deseño de soportes

As estruturas de soporte dos recipientes a presión depende de; tamaño, forma e peso do recipiente, temperatura e presión de deseño, disposición e elementos internos e externos (8).

Para o un recipiente cilíndrico en disposición vertical, os soportes máis empregados son os de tipo saias. Os soportes engaden esforzos por cargas á parede do recipiente e para un deseño correcto deben cumprir (8):

- As cargas por esforzos deben ser menores que o esforzo máximo de deseño (8)
- Facilitar o mantemento do recipiente (8)

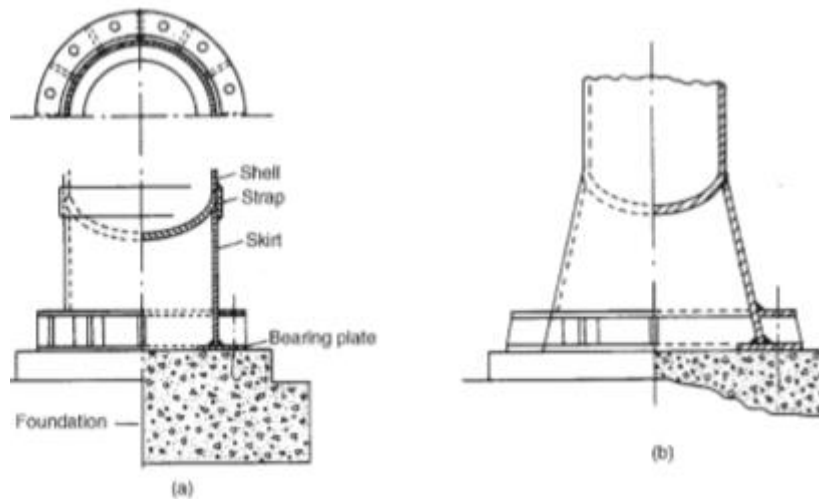


Figura i.17. Tipos de soldaduras para saias. Fonte: (8)

Os tipos de esforzos poden ser de compresión ou de tracción e defínense como:

$$\sigma_s = \sigma_{bs} - \sigma_{ws} \quad (\text{tracción}) \quad \text{i.77}$$

$$\sigma_s = \sigma_{bs} + \sigma_{ws} \quad (\text{compresión}) \quad \text{i.78}$$

Os esforzos por pandeo  $\sigma_{bs}$  e por peso  $\sigma_{ws}$  defínense como :

$$\sigma_{bs} = \frac{4 M_s}{\pi(D_s + t_s)t_s D_s} \quad \text{i.79}$$

$$\sigma_{ws} = \frac{W_T}{\pi(D_s + t_s)t_s} \quad \text{i.80}$$

## Planta de produción de ciclohexanona por hidroxenación de fenol

Onde  $M_s$  é o momento máximo de pandeo medido na base da saia en kN m,  $W_T$  é o peso total do recipiente,  $D_s$  é o diámetro interno da saia que na base tómasse como  $D_i$ . O deseño da saia abarca como principal obxectivo determinar o seu espesor  $t_s$ , non debe ser menor de 6 mm (8).

Para calcular o espesor, débense cumprir dous requisitos de deseño simultaneamente.

$$\sigma_s \text{ (tracción)} < f_s J \sin(\vartheta_s) \quad \text{i.81}$$

$$\sigma_s \text{ (compresión)} < 0,125 E \left( \frac{t_s}{D_s} \right) \sin(\vartheta_s) \quad \text{i.82}$$

$f_s$  é o máximo esforzo por carga a 20 °C,  $J$  é a eficiencia da soldadura e  $\vartheta_s$  ángulo da base con valores entre 80 e 90 ° (8).

Volvendo á expresión i. 75 na que aparece a magnitude  $W_T$  definida como o peso total do recipiente. Trátase do peso máximo que soporta o reactor que ocorre cando está operando, é dicir, débese incluír o peso do aceite térmico que circula pola carcasa,  $W_{ft}$ . De novo, trátase de calcular a masa do fluído térmico e logo multiplicar pola constante da gravidade 9,81 m/s<sup>2</sup>. Neste caso, a masa de aceite térmico que circula pola carcasa pode ser aproximada mediante o seu caudal máxico,  $W_s$ , serían entón 104.616,34 kg (8) .

$$W_{ft} = 100450,24 \times 9,81 \quad \text{i.83}$$

Por tanto  $W_T = W_V + W_{ft} = 1150,26 + 985,42 = 2135,68$  kN

Resolvendo as ecuacións i.77 ata i.82 para unha saia cilíndrica  $\vartheta_s = 90^\circ$ ,  $f_s = 135$  MPa e  $E = 200.000$  MPa (8), satisfáanse os criterios i.81 e i.82 para un espesor  $t_s = 10$  mm.

Táboa i.24. Deseño saia

Criterio	Valor
$\sigma_s \text{ (tracción)} < f_s J \sin(\vartheta_s)$	12,01 < 102,6
$\sigma_s \text{ (compresión)} < 0,125 E \left( \frac{t_s}{D_s} \right) \sin(\vartheta_s)$	5,40 < 37,4

## 6 REFERENCIAS

1. SEIDER, Warren D. et al. *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation*. 3ªed. Estado Unidos de América : John Wiley & Sons, Inc., 2009. ISBN 13: 978-0470-04895-5
2. FOGGLER, H.Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*, 4ª ed. México : Pearson Educación, 2008. ISBN 13: 978-970-26-1198-1.
3. HANCIL.V, L.BERÁNEK. *Kinetics of consecutive heterogenous catalytic reaction: gas phase hydrogenation of phenol on a platinum catalyst*[en línea]. Chemical Engineering Science. 1970, Vol. 25, 1121-1126[consultado abril 2020] Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250970850011>
4. DIMIAN, Alexandre C. e Costin Sorin,BILDEA, *Chemical Process Design: Computer-Aided Case Studies*. Alemaña : Wiley-VCH, 2008. ISBN: 978-3-527-31403-4.
5. PARK, Colin e Mark A ,KEANE. *Catalyst support effects: gas-phase hydrogenation of pheno over palladium*[en línea]. 183-194, s.l. : Journal of Colloid and Interface Science, 2003, Vol. 266.[consultado abril 2020] Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0021979703001711>
6. TALUKDAR, A.K, K.G ,BHATTACHARYYA e S, SIVASANKER. *Hydrogenation of phenol over supported platinum and palladium catalysts* [en línea]229-239, Amsterdam : Elsevier, 1993, Vol. 96. [consultado abril 2020] Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0926860X90800124>
7. MAHATA, Nagengranath e V, VISHWANATHAN. *Kinetics of phenol hydrogenation over supported palladium catalyst*. [en línea]267-270, India : Elsevier, 1997, Vol. 120.[consultado abril 2020] Disponible en : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S138111699600430X>
8. SINNOT, R. K. *Coulson & Richardson's :Chemical Engineering Design*, 4ª ed, vol.6. Oxford : Elsevier, 2005. ISBN 0 7506 6538 6.
9. POLING, Bruce E, John M, PRAUSNITZ e John P, O'CONNELL, *The Properties of Gases and Liquids*, 5ª ed. Estados Unidos de América : McGraw-Hill, 2001. 0-07-011682-2.
10. ASHBY, Michael F. *Materials Selection in Mechanical Design*, 3ª ed. Italia : Pergamon Press, 1992. ISBN 0 7506 6168 2.
11. INCROPERA, Frank P. et al. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, 6ªed. Estados Unidos de América : John Wiley & Sons, 2007. ISBN 13: 978-0-471-45728-2.
12. *DIATERM DISTRIBUCIONS ,SAU* . [consultado abril 2020] Disponible en: <https://diaterm.com/>

**PARTE II:**  
**DESEÑO COLUMNA**  
**T-301**

Índice Anexo II. Cálculos xustificativos. Parte II

1. INTRODUCCIÓN .....	5
2. INFLUENCIA DO REFLUXO NA DESTILACIÓN.....	6
3. PRESIÓN DE OPERACIÓN E A INFLUENCIA NA SEPARACIÓN.....	6
3.1. Datos de equilibrio á presión de operación .....	7
4. TIPOS DE COLUMNA E SELECCIÓN .....	8
5. DESEÑO TERMODINÁMICO .....	8
5.1. Balances de materia.....	8
5.1.1. Balance de materia global á T-301 .....	8
5.1.2. Balance de materia por compoñente na T-301 .....	9
5.1.3. Balance de materia E-303.....	9
5.1.4. Balance de materia E-304.....	9
5.1.5. Caracterización da corrente de alimentación.....	9
5.1.6. Resultados dos balances de materia.....	10
5.2. Balances de enerxía .....	12
5.2.1. Balance de enerxía global ao equipo T-301 .....	13
5.2.2. Balance de enerxía E-303 .....	13
5.2.3. Balance de enerxía E-304 .....	13
5.2.4. Resultados do balance de enerxía.....	14
5.3. Cálculo das temperaturas de rocío e burbulla.....	15
5.3.1. Temperatura de rocío.....	15
5.3.2. Temperatura de burbulla.....	15
5.3.3. Volatilidade absoluta e relativa .....	15
5.4. Método McCabe-Thiele.....	18
5.4.1. Determinación do refluxo mínimo .....	19
5.4.2. Resultado do método McCabe-Thiele.....	21

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

5.5. Método <i>Shortcut</i> .....	22
5.5.1. Ecuación de Fenske .....	22
5.5.2. Ecuación de Underwood.....	22
5.5.3. Número de etapas reais.....	23
5.5.4. Prato óptimo de alimentación .....	23
5.5.5. Resultados do método <i>Shortcut</i> .....	24
5.6. Deseño rigoroso. Método MESH .....	25
5.7. Perfís de temperatura e composición ao longo da columna T-301.....	29
5.8. Conclusión do deseño termodinámico.....	30
6. DESEÑO HIDRÁULICO .....	31
6.1. Tipos de pratos .....	31
6.2. Eficiencia dos pratos.....	33
6.3. Recompilación de datos físicos e termodinámicos.....	34
6.4. Separación entre pratos.....	34
6.5. Cálculo do diámetro da torre T-301 .....	35
6.6. Selección do patrón de fluxo .....	38
6.7. Estrutura do prato .....	39
6.8. Estudo do fenómeno “goteo” .....	40
6.9. Caída de presión .....	42
6.10. Deseño do retorno da baixante .....	45
6.11. Cálculo do tempo de residencia na baixante .....	47
6.12. Obtención da xeometría do prato e cálculo da disposición do pitch .....	47
6.13. Comprobación da inundación cos datos de deseño obtidos .....	50
6.14. Comprobación do arrastre .....	50
6.15. Altura da columna T-301.....	51
6.16. Compoñentes e accesorios da torre T-301.....	52
7. DESEÑO MECÁNICO .....	52

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

7.1. Temperatura de operación .....	53
7.2. Presión de deseño .....	53
7.3. Selección do material.....	54
7.4. Cálculo do espesor do corpo da columna .....	56
7.5. Cálculo do espesor dos cabezais.....	58
7.6. Cálculo do espesor de illante .....	60
7.7. Cálculo das cargas debidas ao peso .....	64
7.7.1. Cálculo da carga debida ao peso do recipiente baleiro.....	64
7.7.2. Cálculo da carga debida ao peso do illante.....	65
7.7.3. Cálculo da carga debida ao peso do líquido no interior da T-301 .....	65
7.7.4. Cálculo da carga debida ao peso dos pratos que compoñen a torre T-301 ...	65
7.7.5. Cargas debidas á acción do vento.....	66
7.7.6. Resultados dos cálculos de pesos e cargas por vento .....	66
7.8. Análise de esforzos. Esforzos primarios e principais .....	67
7.9. Deseño do soporte tipo saia .....	69
8. BIBLIOGRAFÍA .....	72

## 1. INTRODUCCIÓN

A destilación é a técnica de separación máis estendida na industria. Baséase na diferenza de volatilidades entre os compostos a separar, extraendo pola parte superior (cabezas) o compoñente máis volátil e polo fondo (colas), o máis pesado.

Dentro dunha columna de destilación existen multitude de configuracións en función da dificultade da separación, por exemplo, dispoñer de correntes laterais para separar compoñentes de volatilidade media entre todos os compostos a separar, ou tamén poden contar con paredes divididas, entre outras moitas tecnoloxías dispoñibles na industria.

Na Figura II.1 móstranse dous esquemas básicos que pode adoitara unha columna de destilación, cun condensador total como o empregado no presente proxecto e un calderín; actuando este último como unha etapa de equilibrio. Na mesma Figura II.1 (b) móstrase a variante da columna de destilación con dúas entradas de alimentación e dúas correntes laterais, o que aumentaría a complexidade da separación e polo tanto, o seu deseño termodinámico.

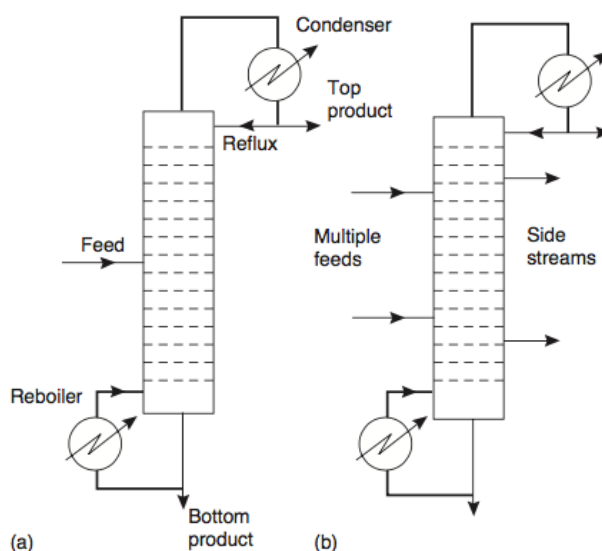


Figura II.1. (a) Columna de destilación cunha única entrada de alimentación e sen correntes laterais. (b) Columna de destilación con múltiples correntes de alimentación e múltiples correntes laterais. Fonte: (1)

## 2. INFLUENCIA DO REFLUXO NA DESTILACIÓN

O refluxo xoga un papel moi importante nunha separación mediante destilación, posto que en función do valor seleccionado, aumentarán ou diminuirán os custos económicos, así como a pureza obtida. Isto débese a que cun maior refluxo, as etapas de equilibrio diminúen, pero tamén o caudal que sae polo destilado, co cal o valor seleccionado debe manter un equilibrio entre custo e operación para lograr o obxectivo, en canto a termos de pureza se refire.

O ratio de refluxo,  $R$ , defínese como na ecuación II.1:

$$R = \frac{L}{D} \quad (\text{II.1})$$

Onde,  $L$ : fluxo molar de volta á columna (kmol/h)

$D$ : fluxo molar de destilado (kmol/h)

Hai diversos tipos de refluxo que se deben abordar previamente a tratar de atopar o valor óptimo a empregar. Estes refluxos son:

- Refluxo total. É o que se obtén logo de non obter ningún caudal de destilado, senón que se introduce todo o condensado na columna de destilación. Esta operación leva ao que se coñece como o mínimo número de etapas.
- Refluxo mínimo. É aquel que leva a obter un número infinito de etapas de equilibrio.

Como resulta lóxico, o valor empregado na operación real debe estar entre ambos extremos, posto que sempre se deberá comprender a operación entre un valor infinito de etapas de equilibrio e un valor mínimo de pratos a empregar, quedando o rango perfectamente definido entrámbolos dous valores. De xeito común, e segundo a bibliografía empregada, os devanditos valores adoitan estar entre un 20-50% máis que o valor indicado polo refluxo mínimo (1).

## 3. PRESIÓN DE OPERACIÓN E A INFLUENCIA NA SEPARACIÓN

Na separación da ciclohexanona e do ciclohexanol, as condicións de operación resultan esenciais para lograr o obxectivo de pureza desexado. Isto débese a que as liñas

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

de equilibrio están moi próximas a unha da outra, facendo indispensable operar a baleiro para lograr unha separación eficiente. Cabe destacar que o equilibrio é máis favorable canto máis baixas sexan presións, de maneira que se facilita a purificación da ciclohexanona por cabezas, ao ser menos volátil, saíndo o ciclohexanol por colas.

A presión da columna T-301 será de 26,66 kPa, en base a artigos científicos para os cales se dispoñen de datos de equilibrio e de valores de coeficientes de actividade, tanto do ciclohexanol como da ciclohexanona (2).

### 3.1. Datos de equilibrio á presión de operación

Na Táboa II.1. móstranse os datos de equilibrio a 26,66 kPa segundo o estudo de Burguet et al (2).

Táboa II.1. Datos de equilibrio del sistema ciclohexanona (1) + ciclohexanol (2) a 26,66 kPa. Fonte: (2)

$x_1$	$y_1$	T (K)	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,000	0,000	394,75		
0,046	0,082	393,85	1,252	0,999
0,096	0,157	392,85	1,198	1,006
0,143	0,216	392,15	1,128	1,015
0,183	0,280	391,45	1,166	1,006
0,241	0,347	390,85	1,117	1,007
0,269	0,383	390,35	1,123	1,007
0,309	0,415	389,95	1,075	1,026
0,368	0,487	388,95	1,094	1,024
0,396	0,511	388,75	1,072	1,031
0,494	0,606	387,45	1,062	1,048
0,542	0,647	386,85	1,057	1,060
0,648	0,733	385,85	1,033	1,091
0,753	0,817	384,85	1,024	1,114
0,802	0,854	384,55	1,017	1,118
0,852	0,893	384,15	1,013	1,123
0,919	0,940	383,65	1,006	1,167
1,000	1,000	383,05		

#### 4. TIPOS DE COLUMNA E SELECCIÓN

Na industria existen diversos tipos de columna de destilación para realizar a separación de dous o máis compoñentes en base á súa diferenza de volatilidades. Estes tipos son, comunmente, de pratos ou de recheo, con todas as variantes de cada unha delas, no que a deseño se refire.

A selección para o presente proxecto baséase en torno ás recomendacións marcadas na bibliografía proposta por R. Sinnott e G. Towler (1).

Tal e como se sinala na monografía, a selección fundaméntase no seu custo, aínda que existen diversos factores que fan innecesaria a súa avaliación económica de cara a poder escoller con garantías calquera delas (1). Existe unha lista de características propias de cada unha, que serán nas que se apoia a decisión adoptada para o deseño da columna de destilación T-301.

A elección é unha columna de pratos, debido a que son válidas para un rango moi amplo de caudais de líquido, caso no que se atopa este proxecto, debido ao gran refluxo ao que hai que operar para lograr unha separación eficiente en canto a custo, o que se traduce nun número de pratos axeitado. Asemade, pode realizarse un mantemento preventivo de xeito máis sinxelo que na súa homóloga de recheo, ademais de dispoñer dunha maior facilidade para o arrefriar neste tipo de columnas e favorecer o intercambio de calor (1).

#### 5. DESEÑO TERMODINÁMICO

##### 5.1. Balances de materia

##### 5.1.1. Balance de materia global á T-301

Os balances de materia nunha columna de destilación resultan moi sinxelos de realizar, xa que ao traballar en estado estacionario, o que entra equivale ao que sae para que se conserve a masa.

$$F = D + B \quad (\text{II.2})$$

Sendo: F: fluxo molar na alimentación (kmol/h)

D: fluxo molar de destilado (kmol/h)

B: fluxo molar por colas (kmol/h)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 5.1.2. Balance de materia por compoñente na T-301

Tendo en conta as fraccións molares do compoñente:

$$Fz_F = Dx_D + Bx_B \quad (\text{II.3})$$

Sendo:  $z_F$ : fracción molar da alimentación

$x_D$ : fracción molar do destilado

$x_B$ : fracción molar da corrente de colas

### 5.1.3. Balance de materia E-303

En estado estacionario:

$$V = L + D \quad (\text{II.4})$$

Sendo:  $V$ : fluxo molar de vapor en cabezas (kmol/h)

$L$ : fluxo molar de refluxo (kmol/h)

$D$ : fluxo molar de destilado (kmol/h)

### 5.1.4. Balance de materia E-304

En estado estacionario:

$$L^* = V^* + B \quad (\text{II.5})$$

Sendo:  $L^*$ : fluxo molar de líquido por colas (kmol/h)

$V^*$ : fluxo molar de vapor que volta á columna (kmol/h)

$B$ : fluxo molar da corrente de colas (kmol/h)

### 5.1.5. Caracterización da corrente de alimentación

É importante destacar que a alimentación da corrente é líquido saturado, polo que  $q=1$ .

Para o cálculo de  $L^*$  empregárase a ecuación II.6.

$$L^* = L + qF \quad (\text{II.6})$$

Sendo:  $q$ : fracción de líquido saturado (0 para vapor saturado, 1 para líquido saturado).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 5.1.6. Resultados dos balances de materia

Logo de empregar as ecuacións II.1, II.2, II.3, II.4, II.5 e II.6, obtéñense os datos mostrados nas Táboas II.2, II.3 e II.4.

- Corrente de alimentación

Táboa II.2. Fluxos e composicións molares da corrente de alimentación. Fonte: Elaboración propia

	Ciclohexanona	Ciclohexanol	Total
Fluxo molar (kmol/h)	205,26	109,02	314,28
Fracción molar	0,653	0,347	1,000

- Corrente de cabezas

Táboa II.3. Fluxos e composicións molares da corrente de cabezas. Fonte: Elaboración propia

	Ciclohexanona	Ciclohexanol	Total
Fluxo molar (kmol/h)	193,26	0,97	194,23
Fracción molar	0,995	0,005	1,000

- Corrente de colas

Táboa II.4. Fluxos e composicións molares da corrente de colas. Fonte: Elaboración propia

	Ciclohexanona	Ciclohexanol	Total
Fluxo molar (kmol/h)	12,00	108,05	120,05
Fracción molar	0,990	0,010	1,000

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### - Balance de materia global T-301

Táboa II.5. Balance de materia global á T-301. Fonte: Elaboración propia

F (kmol/h)	314,28
B (kmol/h)	120,05
D (kmol/h)	194,23
F=D+B (kmol/h)	314,28

### - Balance de materia E-303

Táboa II.6. Balance de ao condensador. Fonte: Elaboración propia

V (kmol/h)	2529,99
L (kmol/h)	2330,76
D (kmol/h)	194,23

Trabállase a un refluxo  $R=12$ , debido á dificultade da separación, e así lograr a máxima eficiencia. De xeito contrario, as liñas de equilibrio estarían demasiado próximas, facendo necesaria a utilización dun número de etapas de equilibrio moi elevado.

### - Balance de materia E-304

Os resultados mostrados foron obtidos co deseño rigoroso ou método MESH, collendo os datos convintes necesarios para a exposición mostrada na Táboa II.7.

Táboa II.7. Balance de materia ao calderín. Fonte: Elaboración propia

V* (kmol/h)	1867,06
L* (kmol/h)	1987,14
B (kmol/h)	120,05
B+V* (kmol/h)	1987,11
Desviación relativa (%)	0,0015

O balance ten unha mínima desviación á hora de pechar, pero dita diferenza considérase perfectamente normal, debido a que o deseño rigoroso fai unha serie de simplificacións

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

con respecto á idealidade que poden ter inducido a tal desviación. Por exemplo, considerar que o ratio de líquido e vapor se manteñen constantes, o cal se considera que é así, pero na realidade difire un pouco dese comportamento previamente suposto.

## 5.2. Balances de enerxía

Para os balances de enerxía requírense as entalpías de cada unha das correntes. Polo tanto emprégase a ecuación II.7 para o cálculo da entalpía das correntes de líquido saturado e II.9 para as correntes de vapor saturado (3).

$$h_i = C_{p,i}T \quad (\text{II.7})$$

Sendo:  $h_i$ : entalpía do composto  $i$  do líquido saturado (kJ/kmol)

$C_{p,i}$ : calor específico do líquido do composto  $i$  (kJ/kmol°C)

$T$ : temperatura (°C)

As entalpías hai que corrixilas pola fracción molar de cada un dos compostos, segundo a ecuación II.8 (3).

$$h = \sum h_i x_i \quad (\text{II.8})$$

No caso de que se trate dunha corrente de vapor saturado, o procedemento será similar, coa diferenza do calor latente, que se debe engadir (3).

$$H_i = C_{p,i}T + \lambda \quad (\text{II.9})$$

Sendo,  $H_i$ : entalpía do vapor saturado do compoñente  $i$  (kJ/kmol)

$\lambda$ : calor latente de vaporización (kJ/mol)

De xeito similar á ecuación II.8, as entalpías de débense corrixir, neste caso pola fracción molar de vapor de cada un dos compostos (3).

$$H = \sum H_i y_i \quad (\text{II.10})$$

Na Táboa II.8 resúmense os calores específicos e os calores de vaporización para o ciclohexanol e a ciclohexanona.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.8. Datos termodinámicos do ciclohexanol e ciclohexanona. Fonte: Aspen Hysys™

	Ciclohexanol	Ciclohexanona
Cp (kJ/kmol°C)	255,3	209,3
$\lambda$ (kJ/kmol)	62000	44000

### 5.2.1. Balance de enerxía global ao equipo T-301

Este tipo de balances realízanse do mesmo xeito, tendo en conta a enerxía desprendida do condensador e a enerxía calorífica aportada no calderín. Polo tanto, tense unha expresión como a da ecuación II.11 (3):

$$Fh_F + Q_C + Q_R = Dh_D + Bh_B \quad (\text{II.11})$$

Sendo,  $h_F$ : entalpía da corrente de alimentación (kJ/kmol)

$Q_C$ : enerxía aportada do condensador (kJ/kmol) (Aportada porque sairá negativa)

$Q_R$ : enerxía aportada no calderín (kJ/kmol)

$h_D$ : entalpía da corrente de destilado (kJ/kmol)

$h_B$ : entalpía da corrente de colas (kJ/kmol)

### 5.2.2. Balance de enerxía E-303

$$VH_V + Q_C = Dh_D + Lh_L \quad (\text{II.12})$$

Sendo,  $H_V$ : entalpía do vapor de cabezas (kJ/kmol)

$h_L$ : entalpía da corrente de refluxo (kJ/kmol)

### 5.2.3. Balance de enerxía E-304

$$L^*h_{L^*} + Q_R = Bh_B + V^*H_{V^*} \quad (\text{II.13})$$

Sendo,  $h_{L^*}$ : entalpía do líquido de colas (kJ/kmol)

$H_{V^*}$ : entalpía do vapor de colas (kJ/kmol)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 5.2.4. Resultados do balance de enerxía

#### - E-303

Empregando a ecuación II.12 obtéñense os datos presentados na Táboa II.9.

Táboa II.9. Balance de enerxía E-303. Fonte: Elaboración propia

$H_V$ (kJ/kmol)	67125,73
$h_L$ (kJ/kmol)	23035,73
$h_D$ (kJ/kmol)	23035,73
$Q_C$ (kJ/h)	$-1,11 \cdot 10^8$

#### - E-304

Empregando a ecuación II.13 móstranse os valores obtidos na Táboa II.10

Táboa II.10. Balance de enerxía E-304. Fonte: Elaboración propia

$H_{V^*}$ (kJ/kmol)	89625,74
$h_{L^*}$ (kJ/kmol)	30287,07
$h_B$ (kJ/kmol)	30287,07
$Q_R$ (kJ/h)	$+1,11 \cdot 10^8$

#### - Balance de enerxía global á torre T-301

Para comprobar que o balance de enerxía pecha correctamente, emprégase a ecuación II.11, comparando así os valores de  $Q_R$  obtidos mediante as ecuacións I.11 e II.13.

Táboa II.11. Balance de enerxía T-301. Fonte: Elaboración propia

$Q_C$ (kJ/h)	$-1,11 \cdot 10^8$
$h_F$ (kJ/kmol)	25425,32
$h_D$ (kJ/kmol)	23035,73
$h_B$ (kJ/kmol)	30287,07
$Q_R$ (kJ/h)	$+1,11 \cdot 10^8$

Como se pode apreciar, ambos valores  $Q_R$  das táboas II.11 e II.12 son idénticos, polo que se conclúe que o balance enerxético pecha correctamente.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 5.3. Cálculo das temperaturas de rocío e burbulla

#### 5.3.1. Temperatura de rocío

Defínese como a temperatura á que aparece a primeira gota de líquido no seno dun vapor saturado. O seu cálculo realízase mediante o equilibrio líquido-vapor, expresado na ecuación II.14 (1).

$$\sum x_i = \sum \frac{y_i}{K_i} \quad (\text{II.14})$$

Sendo,  $x_i$ : fracción molar de líquido do compoñente  $i$ .

$y_i$ : fracción molar de vapor do compoñente  $i$ .

$K_i$ : volatilidade absoluta do compoñente  $i$ .

#### 5.3.2. Temperatura de burbulla

De xeito análogo á temperatura de rocío, exposta no apartado 5.3., a temperatura de burbulla defínese como a primeira burbulla no seno dun líquido. O cálculo lévase a cabo tendo en conta o equilibrio líquido-vapor, tal e como se expresa na ecuación II.15 (1).

$$\sum y_i = \sum K_i x_i \quad (\text{II.15})$$

#### 5.3.3. Volatilidade absoluta e relativa

Na ecuación II.15 aparece o parámetro  $K_i$ , como a volatilidade absoluta do compoñente  $i$ . Esta volatilidade calcúlase de acordo coa ecuación II.16 (1).

$$K_i = \frac{P_i^{sat}}{P_{total}} \quad (\text{II.16})$$

Sendo,  $P_i^{sat}$ : presión de vapor no punto de saturación do compoñente  $i$  (kPa)

$P_{total}$ : presión total do sistema (kPa)

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

A volatilidade relativa é unha medida comparativa entre as volatilidades de dous ou máis compoñentes; a súa expresión ven dada pola ecuación II.17 (3).

$$\alpha_{i-j} = \frac{K_i}{K_j} \quad (\text{II.17})$$

Sendo,  $\alpha_{i-j}$ : volatilidade relativa do compoñente i con respecto ao j.

Para poder obter as temperaturas de rocío e burbulla, é preciso poder empregar a ecuación II.16. Para iso, debe coñecerse o valor da presión de vapor no punto de saturación, e para tal cálculo, emprégase a Ecuación de Antoine, exposta na ecuación II.18 (2).

$$\ln(P_i^{sat}/kPa) = A_i - \frac{B_i}{(T/K) + C_i} \quad (\text{II.18})$$

Sendo,  $A_i$ ,  $B_i$  e  $C_i$ : coeficientes A, B e C do compoñente i

T: temperatura (K)

Os valores empregados para os parámetros A, B e C da ecuación II.18 son os que se amosan na Táboa II.12 para cada un dos compostos (2).

Táboa II.12. Valores dos parámetros da ecuación de Antonie. Fonte: (2)

	Ciclohexanona	Ciclohexanol
A	14,00725	13,94898
B	3402,602	2905,618
C	-65,8948	-122,3649

Cos datos dos parámetros da Táboa II.12, o procedemento para o cálculo, ben para a temperatura de rocío como para a de burbulla, é iterativo, de maneira que se procura un valor da temperatura que satisfaga a ecuación II.14 ou II.15, respectivamente. Así, coa combinación das ecuacións II.14 ou II.15, xunto coas ecuacións II.16 e II.18, obtense o valor de temperatura procurado.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.13. Resultado punto de rocío cabezas. Fonte: Elaboración propia

	$x_i$	$P_i^{\text{sat}}$ (kPa)	$K_i$
Ciclohexanona	0,995	26,578	1,0029
Ciclohexanol	0,005	16,521	0,6234
T. Cabezas (K)			383,09

Táboa II.14. Resultado punto de burbulla da alimentación. Fonte: Elaboración propia

	$x_i$	$P_i^{\text{sat}}$ (kPa)	$K_i$
Ciclohexanona	0,653	29,320	1,1350
Ciclohexanol	0,347	18,699	0,7456
T. Aliment.(K)			387,13

Táboa II.15. Resultado punto de burbulla de colas. Fonte: Elaboración propia

	$x_i$	$P_i^{\text{sat}}$ (kPa)	$K_i$
Ciclohexanona	0,100	36,482	1,6312
Ciclohexanol	0,900	24,591	0,9298
T. Colas (K)			393,96

Para o cálculo da volatilidade relativa media, a mellor aproximación é a media xeométrica entre ambas volatilidades, de cabezas e de colas, tal e como se plasma na ecuación II.19 (3).

$$\alpha_{av.(i-j)} = \sqrt{\alpha_{cabezas} * \alpha_{colas}} \quad (\text{II.19})$$

Táboa II.16. Cálculo de volatilidades. Fonte: Elaboración propia

$\alpha_{cabezas}$	1,6088
$\alpha_{colas}$	1,7544
$\alpha_{media}$	1,6800

#### 5.4. Método McCabe-Thiele

Trátase dun método gráfico para a determinación das etapas teóricas nunha columna de destilación. Baseouse no método de Lewis, e cada etapa emprega os balances de materia e a relación de equilibrio (3).

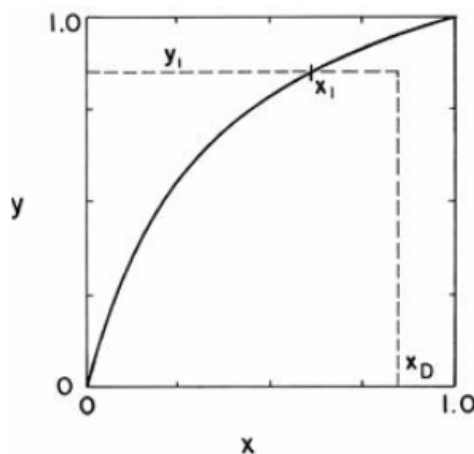


Figura II.2. Etapa de equilibrio para o plato superior segundo o método McCabe-Thiele. Fonte: (3)

Para levar a cabo a implementación deste método hai que supoñer o que Lewis chamou *Constant Molal Overflow (CMO)*, que quer dicir que o calor latente por mol permanece constante. Así, as rectas de operación superior e inferior teñen a forma que se indica nas ecuacións II.20a e II.20b respectivamente (3).

A recta de operación da corrente de alimentación ven representada pola recta da ecuación II.20c (3).

$$y = \frac{L}{V}x + \left(1 - \frac{L}{V}\right)x_D \quad (\text{II.20a})$$

$$y = \frac{L^*}{V^*}x + \left(\frac{L^*}{V^*} - 1\right)x_B \quad (\text{II.20b})$$

$$y = \frac{q}{q-1}x + \frac{1}{1-q}z_F \quad (\text{II.20c})$$

Na Figura II.3 móstrase de maneira gráfica o valor de  $q$  en función das características da corrente de alimentación. Isto é, se se trata dun líquido subarrefriado ou saturado, unha mestura de líquido-vapor ou tamén vapor saturado ou sobrequecido.

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

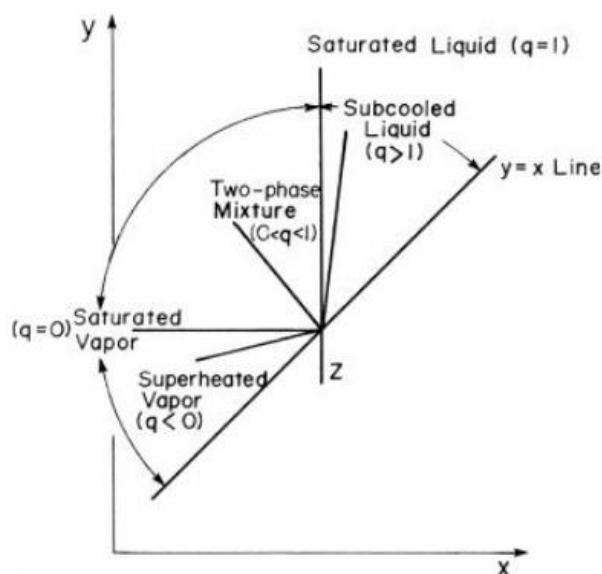


Figura II.3. Valores de  $q$  na corrente de alimentación en función das características da mesma. Fonte: (3)

### 5.4.1. Determinación do refluxo mínimo

Na Figura II.4 móstrase o cálculo da pendente para a posterior obtención do refluxo mínimo.

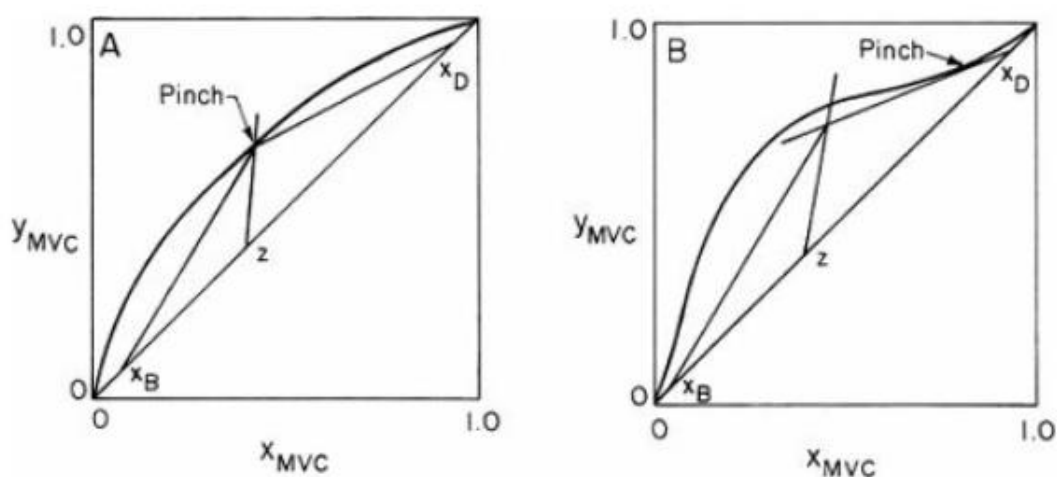


Figura II.4. Obtención da pendente do refluxo mínimo co punto *pinch*. Fonte: (3)

A obtención do punto *pinch* dependerá da forma que teña a curva de equilibrio do sistema binario que forman a ciclohexanona e o ciclohexanol.

Na Figura II.5 represéntase o anterior sistema, co punto *pinch* e a recta de operación superior pasando polo mesmo. Deste xeito obtense a pendente da recta ( $L/V$ ) e con ela, o refluxo mínimo a empregar na separación, que ven dado pola ecuación II.21.

## Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

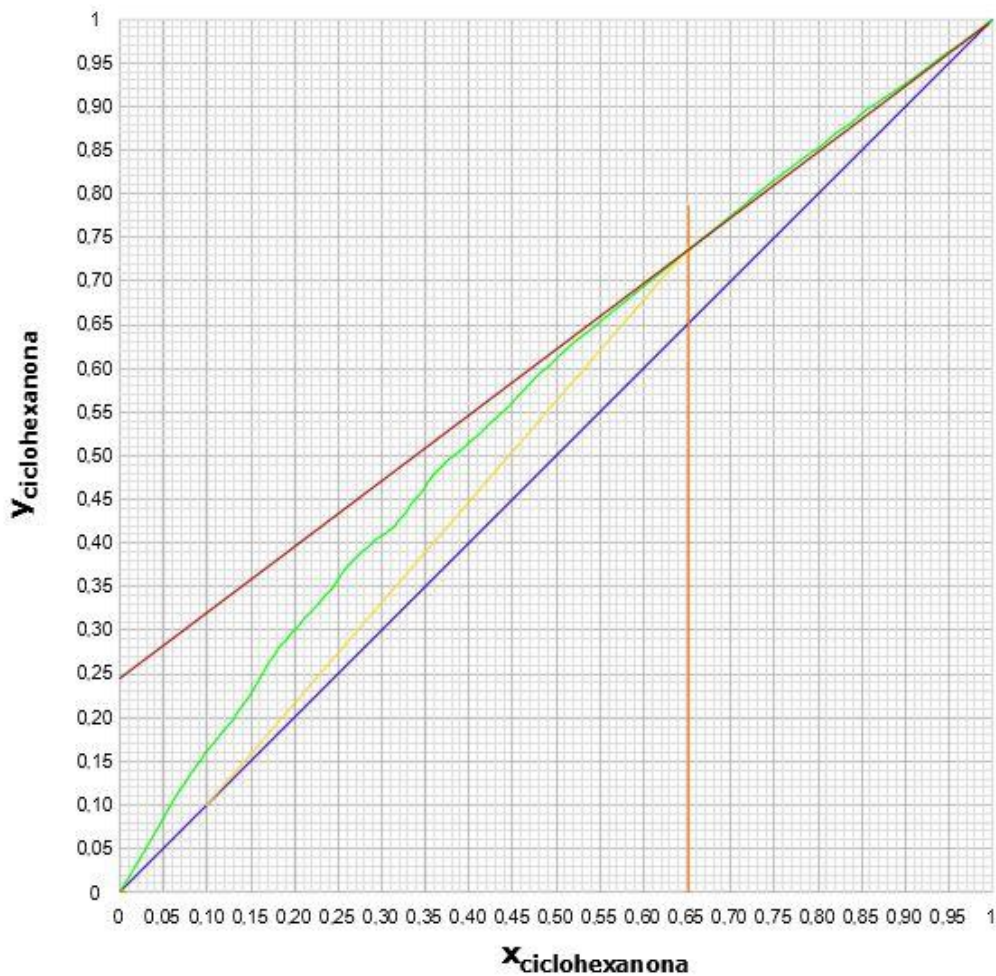


Figura II.5. Representación gráfica para a obtención do refluxo mínimo. (A liña vermella é a que se emprega para o cálculo do refluxo mínimo) Fonte: elaboración propia en AutoCAD®

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{min} = \frac{\left(\frac{L}{V}\right)_{min}}{1 - \left(\frac{L}{V}\right)_{min}} \quad (II.21)$$

Onde,  $(L/D)_{min}$ : refluxo mínimo a empregar

$(L/V)_{min}$ : pendente da recta superior pasando polo punto pinch.

O resultado da ecuación II.21 é un refluxo mínimo de 2,99. Dada a dificultade da separación, cabe resaltar a necesidade de traballar cun refluxo que sae fóra dos valores estándares de 1,2-1,5 veces o refluxo mínimo (1). É por iso que se decide traballar co valor de refluxo igual a 12.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 5.4.2. Resultado do método McCabe-Thiele

A Figura II.6 reflexa a representación gráfica coas etapas de equilibrio necesarias para lograr a separación.

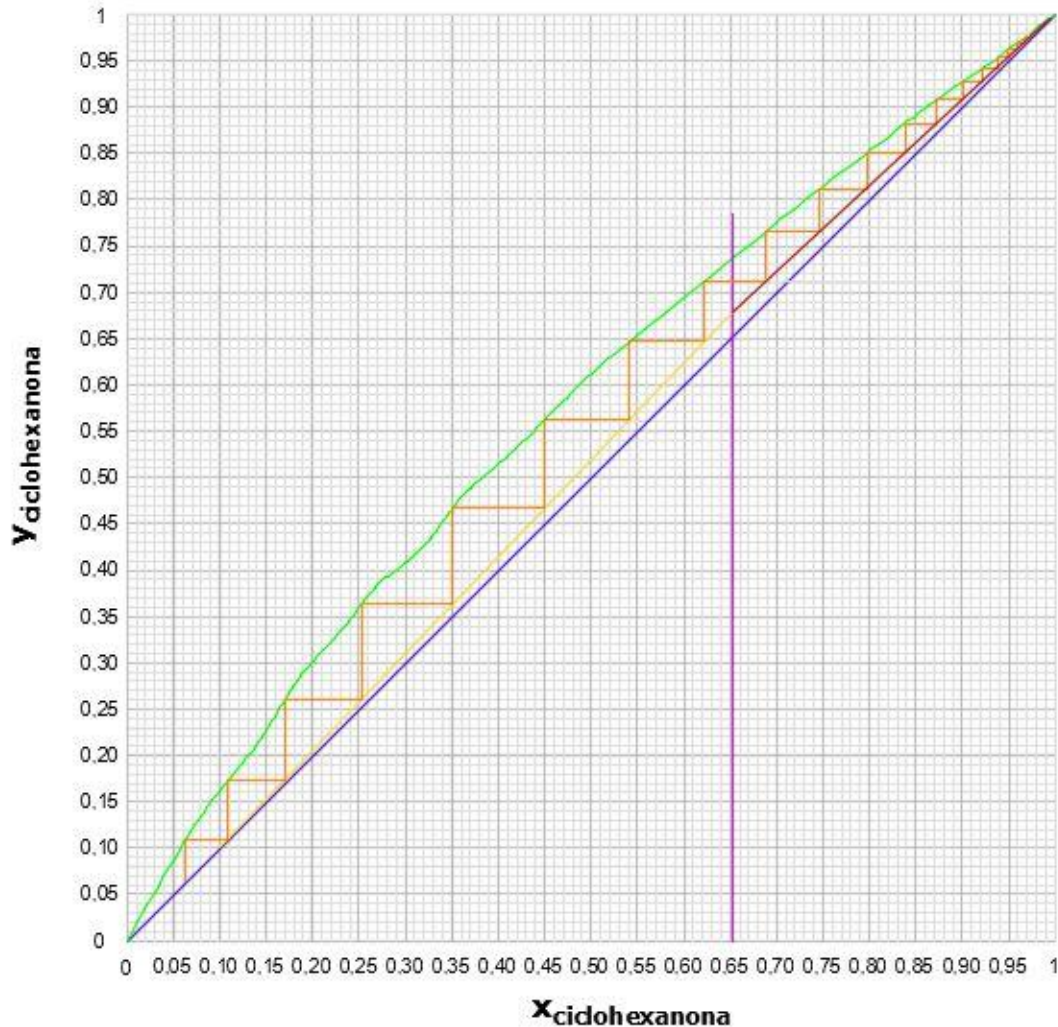


Figura II.6. Método McCabe-Thiele. Lenda: violeta: recta de operación da alimentación, amarela: recta de operación inferior, vermella: recta de operación superior, verde: datos de equilibrio, azul: recta equilibrio  $x=y$ , laranxa: etapas de equilibrio. Fonte: elaboración propia en AutoCAD®

Non resulta necesario representar analiticamente as rectas de operación, xa que este deseño se realizou en AutoCAD®, onde é posible realizar todo de xeito gráfico.

Tal e como se pode observar na Figura II.6, hai 26 etapas de equilibrio e a alimentación óptima realizaríase no octavo prato (ou sétimo, xa que o calderín conta como unha etapa de equilibrio) comezando dende colas.

### 5.5. Método *Shortcut*

Este método baséase nas ecuacións de Fenske, Underwood e Chang (entre outros autores para a última das etapas propostas por Chang) para a obtención do número mínimo de pratos (ou refluxo total), refluxo mínimo e número de etapas de equilibrio reais.

Estes métodos empréganse para mesturas multicompoñente na súa maioría, pero tamén son válidas para realizar unha aproximación bastante precisa e sinxela en sistemas binarios.

#### 5.5.1. Ecuación de Fenske

Tamén coñecido como refluxo total, emprega a expresión mostrada na ecuación II.22 para resolver o número de etapas de equilibrio necesarias en condicións de refluxo total. Este número inclúe o calderín, posto que tamén é considerado unha etapa de equilibrio (3).

$$N_{min} = \frac{\log \frac{\left(\frac{x_A}{x_B}\right)_{cabezas}}{\left(\frac{x_A}{x_B}\right)_{colas}}}{\log \alpha_{AB}} \quad (II.22)$$

Onde,  $N_{min}$ : número mínimo de etapas de equilibrio

$\log \alpha_{AB}$ : volatilidade relativa do composto A en relación co B

A volatilidade relativa obtense da Táboa II.16, necesaria para poder obter os resultados mostrados na Táboa II.17 xunto cos demais resultados derivados dos cálculos do método *shortcut*.

#### 5.5.2. Ecuación de Underwood

Ecuación para o cálculo do refluxo mínimo, que se realiza en dúas etapas. Nun primeiro lugar obtense o parámetro  $\theta$  da ecuación II.23 e posteriormente o valor do refluxo mínimo mediante a ecuación II.24.

O valor do parámetro  $\theta$  debe estar comprendido entre as volatilidades relativas dos dous compoñentes por separado.

$$\sum \frac{\alpha_i Z_{iF}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad (II.23)$$

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Sendo,  $\alpha_i$ : volatilidade relativa do compoñente i

$z_{iF}$ : fracción molar do compoñente i na corrente de alimentación

q: calidade da corrente de alimentación (q=1, líquido saturado)

$\theta$ : parámetro empregado na ecuación II.24

$$\sum \frac{\alpha_i (x_{iD})_{min}}{\alpha_i - \theta} = \left(\frac{L}{D}\right)_{min} + 1 \quad (II.24)$$

Sendo,  $x_{iD}$ : fracción molar do compoñente i na corrente de destilado.

$(L/D)_{min}$ : refluxo mínimo

### 5.5.3. Número de etapas reais

Mediante a ecuación de Chang, cos datos de refluxo mínimo e o número mínimo de etapas, obtense, mediante a ecuación II.25, o resultado das etapas de equilibrio reais que serían necesarias para a separación coas especificacións requiridas polo sistema que definen o ciclohexanol e a ciclohexanona (3).

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[ 1,490 + 0,315 \frac{\frac{L}{D} - \left(\frac{L}{D}\right)_{min}}{\frac{L}{D} + 1} - \frac{1,805}{\left(\frac{\frac{L}{D} - \left(\frac{L}{D}\right)_{min}}{\frac{L}{D} + 1}\right)^{0,1}} \right] \quad (II.25)$$

Onde, N: número de etapas de equilibrio reais

L/D: refluxo real empregado (nesta separación, como se comentou, é 12 veces superior ao refluxo mínimo)

### 5.5.4. Prato óptimo de alimentación

Unha vez é coñecido o número de etapas de equilibrio que deberá haber, hai que coñecer o lugar exacto onde se debe introducir a corrente de alimentación para que ese número de pratos non aumente. Isto é, decidir cal será o prato no cal a alimentación entrará de maneira que a separación sexa óptima.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Consta de dúas etapas como o apartado 5.5.2., neste caso, empregando nunha primeira etapa a ecuación de Fenske, estimando onde será a alimentación óptima se existisen unhas condicións de refluxo total (3). Isto faise mediante a ecuación II.26.

Seguidamente, mediante a ecuación II.27, obtense o prato no que se debe alimentar a corrente á torre de destilación T-301.

$$N_{f,min} = \frac{\log \left( \frac{\left( \frac{x_A}{x_B} \right)_{cabezas}}{\left( \frac{z_A}{z_B} \right)} \right)}{\log \alpha_{AB}} \quad (II.26)$$

Onde,  $N_{f,min}$ : o prato de alimentación óptimo en condicións de refluxo máximo

$z_A$ : fracción molar do composto A na corrente de alimentación (ciclohexanona)

$z_B$ : fracción molar do composto B na corrente de alimentación (ciclohexanol)

$$\frac{N_{f,min}}{N_{min}} = \frac{N_f}{N} \quad (II.27)$$

Sendo,  $N_f$ : prato de alimentación óptima

### 5.5.5. Resultados do método *Shortcut*

Na Táboa II.17 móstranse os resultados obtidos para o deseño termodinámico mediante este método de aproximación.

Táboa II.17. Resultados do método *Shortcut*

$N_{min}$	17,22 (18)
$\theta$	1,14
$(L/D)_{min}$	2,75
$(L/D)$	12
$N$	20,24 (21)
$N_{f,min}$	10,72 (11)
$N_f$	12,59 (13)

O resultado é unha columna con 21 pratos teóricos cuxa alimentación é no prato 13 comezando dende a zona de destilado.

### 5.6. Deseño rigoroso. Método MESH

MESH corresponden ás siglas inglesas de balance de materia, equilibrio, sumatorio e balance de enerxía.

Neste método, trátase de facer o balance de materia e enerxía a cada etapa, tendo en conta as relacións de equilibrio coa ecuación de Antoine (ecuación II.18) e que o sumatorio das fraccións molares ten que ser igual á unidade.

Por outra banda, é moi importante recordar que se considera para facer os cálculos que a relación  $L_n/V_{n+1}$  se mantén constante, ou variando moi pouco.

Na Figura 7 móstranse as correntes que interveñen nun prato  $n$  dunha columna de destilación.

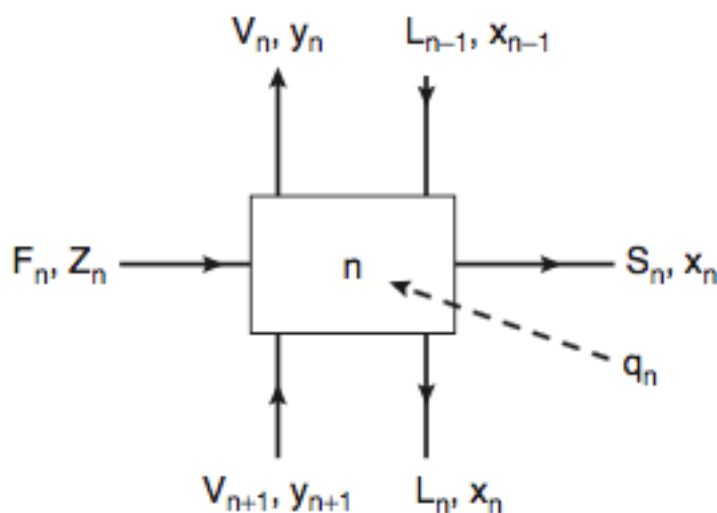


Figura II.7. Representación das correntes que interveñen no prato  $n$  dunha columna de destilación. Fonte: (1)

Con relación á Figura 7, os balances de materia e enerxía móstranse nas ecuacións II.28 e II.29 respectivamente (1).

$$F_n z_n + L_{n-1} x_{n-1} + V_{n+1} y_{n+1} = V_n y_n + S_n x_n + L_n x_n \quad (\text{II.28})$$

$$F_n h_f + L_{n-1} h_{n-1} + V_{n+1} H_{n+1} + q = V_n H_n + S_n h_n + L_n h_n \quad (\text{II.29})$$

Sendo,  $F_n$ : caudal de alimentación de que entra no prato  $n$  (kmol/h)

$L_{n-1}$ : caudal de líquido que ven do prato anterior (kmol/h)

$V_{n+1}$ : caudal de vapor que ven do prato seguinte (kmol/h)

$V_n$ : caudal de vapor que sae do prato  $n$  (kmol/h)

$L_n$ : caudal de líquido que sae do prato  $n$  (kmol/h)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

$S_n$ : caudal de líquido que se extrae pola corrente lateral (kmol/h)

$z$ : fracción molar da corrente de alimentación

$x$ : fracción molar do líquido

$y$ : fracción molar do vapor

Tendo en conta que non existen correntes laterais nin se aporta enerxía externa, os balances reduciríanse ás ecuacións II.30 e II.31 (1).

$$F_n z_n + L_{n-1} x_{n-1} + V_{n+1} y_{n+1} = V_n y_n + L_n x_n \quad (\text{II.30})$$

$$F_n h_f + L_{n-1} h_{n-1} + V_{n+1} H_{n+1} = V_n H_n + L_n h_n \quad (\text{II.31})$$

Mantendo a relación  $L_n/V_{n+1}$  constante, tendo en conta os balances de materia, tanto global como de compoñente, chégase á expresión II.32 (1).

$$y_{n+1} = \frac{L_n}{V_{n+1}} (x_n - x_{n-1}) + y_n \quad (\text{II.32})$$

Co fin de clarificar o procedemento, faise unha iteración para o primeiro prato comezando desde cabezas.

Este método execútase de cabezas ata a alimentación e de colas ata a alimentación, pero dada a simplicidade dunha mestura binaria, o método realizarase desde cabezas a colas con resultados moi satisfactorios.

Os balances de materia, globais e por compoñente e os balances de enerxía, exemplifícanse nas ecuacións II.33, II.34 e II.35 respectivamente (1).

$$L_0 + V_2 = V_1 + L_1 \quad (\text{II.33})$$

$$L_0 x_0 + V_2 y_2 = V_1 y_1 + L_1 x_1 \quad (\text{II.34})$$

$$L_0 h_0 + V_2 H_2 = V_1 H_1 + L_1 h_1 \quad (\text{II.35})$$

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O procedemento estruturado en pasos definidos sería o que segue (1):

- 1) Sabendo a composición de  $y_1$  que está en equilibrio con  $x_0$  xa que condensa todo o vapor no condensador total, pode obterse o valor de  $x_1$  e a temperatura de rocío, empregando as ecuacións II.14, II.16 e II.18.
- 2) Unha vez obtida a temperatura resultante da ecuación II.18, xa se poden calcular as entalpías do prato 1,  $h_1$  e  $H_1$ . Asemade, coa ecuación II.32 obteríase a composición de  $y_2$  e polo tanto a súa entalpía  $H_2$ , necesaria para empregar na ecuación II.35
- 3) Resólvese o sistema de ecuacións resultante das ecuacións II.33 e II.35, obtendo os valores de  $L_1$  e  $V_2$ .

Na Táboa II.18 preséntanse os resultados do deseño rigoroso obtidos segundo o procedemento descrito.

Como pode observarse, a relación  $L/V$  mantense constante ao longo de todo o equipo, e os resultados obtidos concordan cos valores agardados.

O resultado é unha columna de destilación cun total de vinte etapas de equilibrio teóricas, contando o calderín. A alimentación realizaríase no prato 12 comezando dende a parte superior.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.18. Resultados do deseño rigoroso. Método MESH. Fonte: Elaboración propia

Prato	T (K)	x <sub>ONA</sub>	x <sub>OL</sub>	y <sub>ONA</sub>	y <sub>OL</sub>	L (kmol/h)	V (kmol/h)	L/V
Cabezas	383,09	0,995	0,005	0,995	0,005	2330,76	2524,99	0,92
1	383,09	0,992	0,008	0,995	0,005	2325,16	2524,99	0,92
2	383,32	0,987	0,013	0,992	0,008	2322,33	2519,39	0,92
3	383,39	0,981	0,019	0,988	0,012	2315,82	2516,56	0,92
4	383,50	0,971	0,029	0,982	0,018	2306,27	2510,05	0,92
5	383,66	0,958	0,042	0,973	0,027	2292,92	2500,50	0,92
6	383,86	0,939	0,061	0,961	0,039	2273,81	2487,15	0,92
7	384,19	0,912	0,088	0,943	0,057	2260,70	2468,04	0,92
8	384,56	0,877	0,123	0,919	0,081	2210,27	2454,93	0,92
9	385,09	0,831	0,169	0,886	0,114	2179,83	2401,50	0,92
10	385,73	0,775	0,225	0,844	0,156	2131,86	2371,06	0,92
11	386,48	0,709	0,291	0,792	0,208	2078,91	2323,09	0,92
12	387,31	0,638	0,362	0,732	0,268	2341,24	2270,14	0,92
13	388,15	0,565	0,435	0,667	0,333	2281,01	2218,19	1,06
14	389,09	0,485	0,515	0,590	0,410	2219,10	2157,96	1,06
15	390,05	0,402	0,598	0,505	0,495	2159,38	2096,05	1,06
16	390,98	0,323	0,677	0,418	0,582	2105,43	2036,33	1,06
17	391,83	0,251	0,749	0,334	0,666	2059,23	1982,38	1,06
18	392,57	0,189	0,811	0,257	0,743	2021,49	1936,18	1,06
19	393,17	0,138	0,862	0,191	0,809	1987,14	1898,44	1,06
Colas	393,96	0,100	0,900	0,137	0,863	1987,14	1867,06	1,06

### 5.7. Perfís de temperatura e composición ao longo da columna T-301

Grazas ao análise rigoroso da T-301, pódese obter o perfil de temperatura ao longo da columna T-301, xa que se obtivo a temperatura de rocío en cada etapa, prato a prato, comezando pola parte superior, tal e como se mostra na Figura II.8.

Asemade, na Figura II.9, represéntase a fracción de líquido e vapor de cada un dos compoñentes da separación, o ciclohexanol e a ciclohexanona, ao longo do equipo de separación. Desta maneira, compróbase como o compoñente máis volátil se enriquece cara a sección de cabezas e o menos volátil se comporta do mesmo xeito cara a sección de colas.

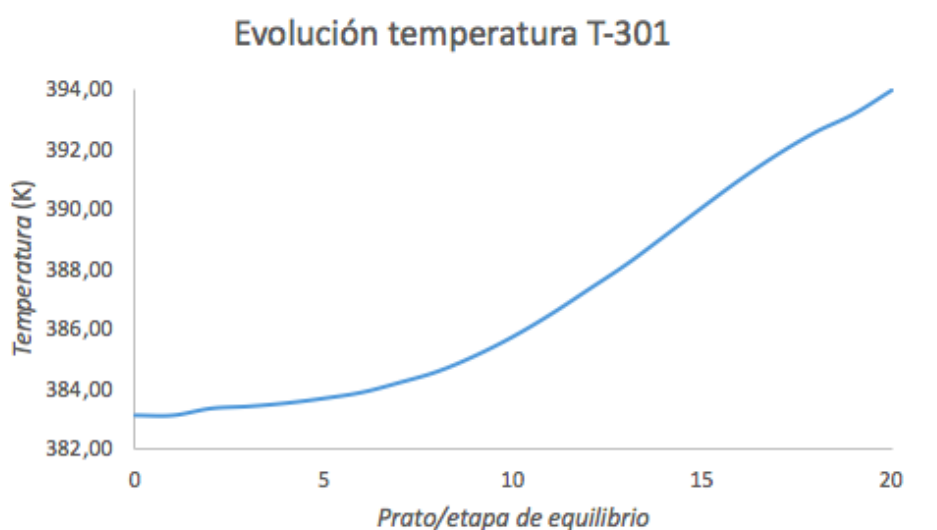


Figura II.8. Evolución da temperatura ao longo da columna de destilación T-301. Fonte: elaboración propia

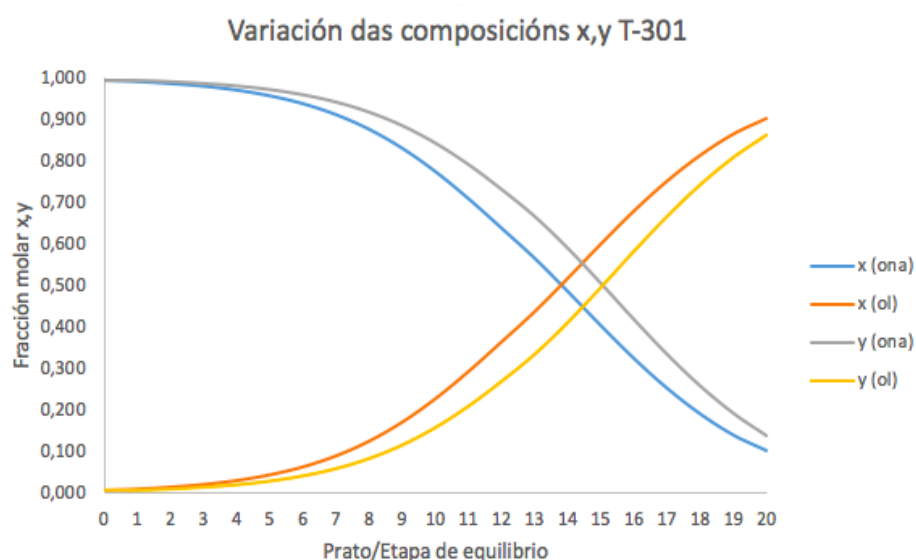


Figura II.9. Evolución da composición de líquido e vapor da mestura binaria ao longo da torre de destilación T-301. Fonte: elaboración propia

### 5.8. Conclusión do deseño termodinámico

Na Táboa II.19, resúmense os resultados obtidos cos diferentes métodos empregados no presente proxecto. Estes métodos foron o McCabe-Thiele, o *Shortcut* e o deseño rigoroso ou método MESH.

Táboa II.19. Resultados dos deseños executados. Fonte: Elaboración propia

Método	$N_{\min}$	$(L/D)_{\min}$	N	$N_f$
McCabe-Thiele	-	2,96	26	18
<i>Shortcut</i>	17,22	2,75	21	13
MESH	-	-	20	12

Os resultados obtidos no método gráfico están lixeiramente en discordancia cos dous últimos método de deseño aplicados. Isto débese a que o método McCabe-Thiele é un método gráfico, isto é, unha aproximación do que acontece na realidade.

O método *Shortcut* reflexa con bastante precisión o que ocorre na realidade, cunha diferenza mínima entre o obtido de xeito rigoroso (MESH) e o proporcionado polo devandito método aproximado.

Cabe resaltar por tanto a coherencia dos datos e a precisión no deseño termodinámico, dándose por finalizado o mesmo de xeito correcto.

## 6. DESEÑO HIDRÁULICO

O deseño hidráulico ten como obxectivo principal o cálculo do diámetro interno da columna de destilación T-301, así como os detalles do prato e demais elementos internos do devandito equipo de separación.

A execución do deseño hidráulico realízase coa metodoloxía dos autores Towler, G. e Sinnott, R., mediante etapas ben definidas que levan a coñecer os datos procurados (1).

### 6.1. Tipos de pratos

Na Figura II.10 móstrase un esquema do interior da columna de destilación, onde se sitúan os diversos pratos sometidos a fluxo cruzado, co caudal de líquido dirixíndose dun prato a outro pola baixante.

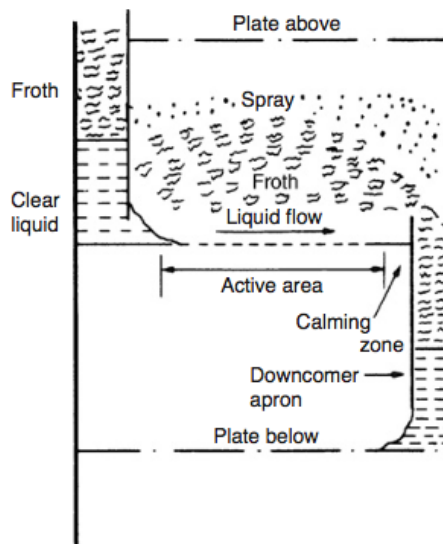


Figura II.10. Esquema do interior dunha columna de destilación con pratos perforados. Fonte: (1)

A zona onde intervén cada unha das diversas configuracións de prato é a chamada área activa, onde se produce o contacto entre o líquido e o vapor, lugar onde se alcanza o equilibrio (1).

- Pratos perforados: son o esquema máis simple que pode adoitar unha torre de destilación, tal e como se mostra na Figura II.10. O líquido queda retido polo vapor que sobe do prato anterior, de maneira que non gotea polos furados e cae ao prato seguinte, senón que o fai pola baixante (1).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Na Figura II.11 móstrase un esquema deste tipo de pratos.

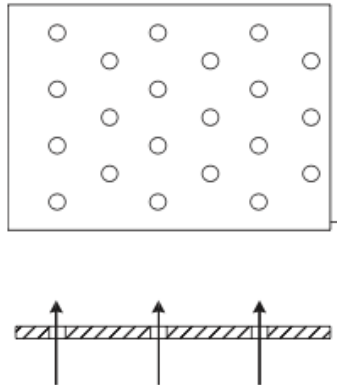


Figura II.11. Ilustración dun prato perforado. Fonte: (1)

- Pratos de burbulla: o vapor pasa a través dunhas pequenas conducións e seguen o seu recorrido marcado segundo as coberturas superiores, forzándoo a ir cara abaixo novamente tal e como se aprecia na Figura II.12.

Este tipo de pratos melloran o contacto entre o líquido e o vapor, pero son substancialmente máis custosos que os pratos perforados (1).

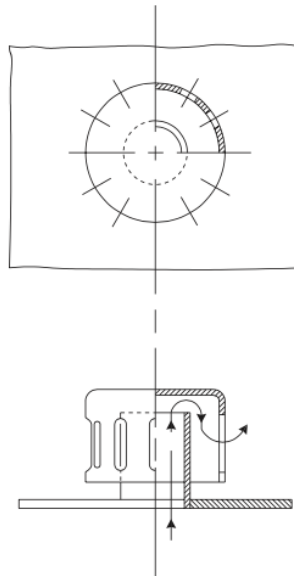


Figura II.12. Esquema dun prato de burbulla. Fonte: (1)

- Pratos de válvula: nesta configuración mostrada na Figura II.13, o vapor debe ter unha presión suficiente para erguer a válvula e permitir o fluxo de vapor. No caso de que a devandita presión non sexa a suficiente, o vapor non pasa a través das mesmas, pero impide o goteo do líquido a través das válvulas. Isto

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

non ocorre por exemplo nos pratos perforados, onde se a presión do vapor non é a suficiente, o líquido gotearía ata o prato seguinte, coa correspondente diminución da eficiencia da columna (1).

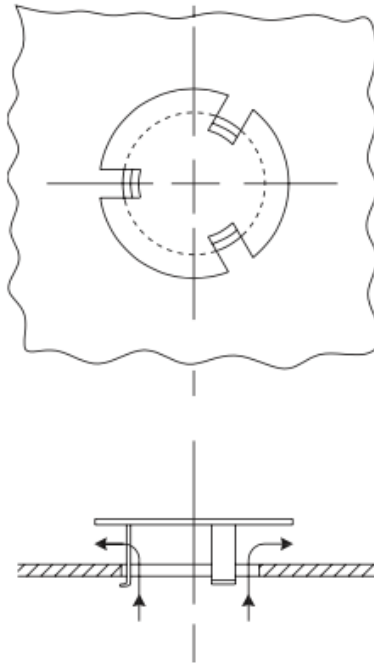


Figura II.13. Esquema dun prato de válvulas. Fonte: (1)

A elección do tipo de prato a empregar na columna T-301 baséase no custo, por iso se decide empregar pratos perforados, posto que son suficientes para lograr a separación desexada e ademais reducen o custo total do equipo instalado na planta.

A caída de presión vai xogar un papel moi importante na destilación a baleiro, e os pratos perforados son os que máis garantías ofrecen con respecto a este parámetro.

### 6.2. Eficiencia dos pratos

Existen diversos métodos propostos por unha gran variedade de autores para estimar a eficiencia acadada en cada prato.

Por exemplo, a eficiencia pode obterse pola correlación de O'Connell, o método Aiche, o de Van Winkle ou a eficiencia de Murphree (1).

Ao tratarse dun deseño preliminar, a eficiencia pode estimarse entre o 30 e o 70% (1), polo que se selecciona un valor en torno ao 67% para o actual deseño, dando un total de 30 pratos reais.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.20. Determinación dos pratos reais T-301. Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$E_0$ (%)	67
$N_{teóricas}$	20
$N_{reais}$	30

### 6.3. Recompilación de datos físicos e termodinámicos

O método proposto por G. Towler e R. Sinnott recomenda ter os datos físicos e termodinámicos necesarios ben caracterizados previamente a proceder ao cálculo dos parámetros que definirán o diámetro da columna, así como as demais dimensións características de cada un dos pratos que conformarán a columna de destilación.

Os datos móstranse na Táboa II.21

Táboa II.21. Datos físicos e termodinámicos. Fonte: Aspen Hysys™

Parámetro	CABEZAS	COLAS
T (K)	383,09	393,96
Presión (kPa)	26,66	50,66
Densidade líquido (kg/m <sup>3</sup> )	856,3	851,3
Densidade vapor (kg/m <sup>3</sup> )	0,9207	1,2312
Tensión superficial (N/m)	0,02282	0,01804
Viscosidade líquido (Pa*m)	0,5027	1,13

### 6.4. Separación entre pratos

A distancia existente entre pratos é un factor determinante de cara á altura final que terá a torre T-301. Para columnas con diámetros superiores a un metro, acostuman a ter un espazado de entre 0,3-0,6 m (1). Polo tanto a selección para este deseño decidiuse que fose de 600 mm.

### 6.5. Cálculo do diámetro da torre T-301

O diámetro ven determinado pola porcentaxe de inundación á cal se opere. Neste deseño, a inundación será do 85% como primeira aproximación. Posteriormente comprobarase se o dato estimado é correcto.

Mediante o factor de fluxo líquido-vapor,  $F_{LV}$ , obtense o coeficiente  $K_1$ , segundo a gráfica da Figura II.14.

O primeiro paso é obter o devandito factor, segundo a ecuación II.36 e posteriormente procederese ao cálculo da velocidade de inundación segundo a ecuación II.37 (1).

$$F_{LV} = \frac{L_w}{V_w} \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_l}} \quad (\text{II.36})$$

Onde,  $F_{LV}$ : factor líquido-vapor

$L_w$ : caudal de líquido (kg/s)

$V_w$ : caudal de vapor (kg/s)

$\rho_v$ : densidade do vapor (kg/m<sup>3</sup>)

$\rho_l$ : densidade do líquido (kg/m<sup>3</sup>)

$$u_f = K_1 \sqrt{\frac{\rho_l - \rho_v}{\rho_v}} \quad (\text{II.37})$$

Onde,  $u_f$ : velocidade de inundación (m/s)

$K_1$ : factor obtido da Figura II.14

Para tensións superficiais distintas a 0,02 N/m o factor  $K_1$  debe corrixirse segundo a ecuación II.38 (1).

$$K_{1,corrixido} = K_1 \left( \frac{\sigma}{0,02} \right)^{0,2} \quad (\text{II.38})$$

Onde,  $\sigma$ : tensión superficial (N/m)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

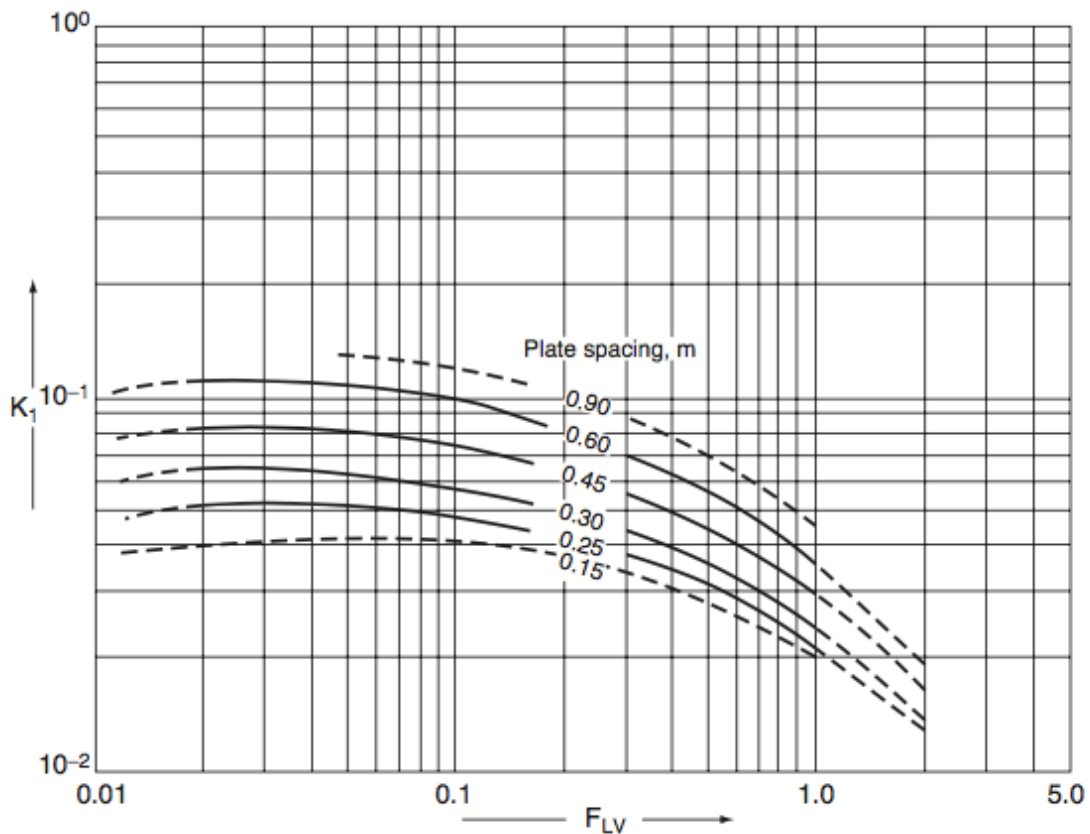


Figura II.14. Gráfica para a obtención do factor  $F_{LV}$ . Fonte: (1)

Este método mostra unha serie de restricións que se expoñen a continuación (1):

- O burato debe ter un diámetro inferior a 6,5 mm. De empregar un diámetro maior, o arrastre sería excesivo.
- A altura pertencente ao rebosadeiro debe ser inferior ao 15% do valor correspondente ao espazado entre pratos escollido.
- Non sexa un sistema con formación de espuma
- A área activa debe ter un ratio maior de 0,10. É o caso actual, ao tratarse do 12% ou 0,12

Posteriormente, procédese ao cálculo do caudal de vapor máximo (ecuación II.39) e por último a área neta (ecuación II.40) e a área total, sendo a área da baixante un 12% (ecuación II.41) (1).

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

$$Q_{v,m\acute{a}x} = \frac{V_w}{\rho_v} \quad (\text{II.39})$$

Onde  $Q_{v,m\acute{a}x}$ : caudal de vapor máximo (m<sup>3</sup>/s)

$$A_n = \frac{Q_{v,m\acute{a}x}}{u_n} \quad (\text{II.40})$$

Sendo  $A_n$ : área neta (m<sup>2</sup>)

$u_n$ : velocidade de inundación do vapor ao 85% (m/s)

$$A_c = \frac{A_n}{1 - 0,12} \quad (\text{II.41})$$

Sendo:  $A_c$ : área total do prato (m<sup>2</sup>)

O diámetro da columna obterase mediante a ecuación II.42 (1).

$$D_c = \sqrt{\frac{4 * A_c}{\pi}} \quad (\text{II.41})$$

Onde,  $D_c$ : diámetro da columna (m)

Táboa II.22. Factores para o cálculo da columna

Parámetro	Cabezas	Colas
FLV	0,0303	0,0405
K <sub>1</sub>	0,120	0,110
K <sub>1, corrixida</sub>	0,123	0,108
u <sub>f</sub> (m/s)	3,755	2,831
u <sub>n</sub> (m/s) (85% inund.)	3,192	2,407
Q <sub>v,m\acute{a}x</sub> (m <sup>3</sup> /s)	74,770	42,106
A <sub>n</sub> (m <sup>2</sup> )	23,424	17,496
A <sub>c</sub> (m <sup>2</sup> )	26,618	19,881
D <sub>c</sub> (m)	5,822	5,031

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

A diferenza obtida entres ámbolos dous valores é menor ao 20% recomendado pola bibliografía (1). Como diámetro estandarizado tomarase o valor de  $D_c = 6$  m.

### 6.6. Selección do patrón de fluxo

O caudal de líquido calcúlase segundo a ecuación II.42 e posteriormente coa Figura II.15 obteríase o patrón de fluxo (1).

$$Q_L = \frac{L_w}{\rho_l} \quad (\text{II.40})$$

Onde,  $Q_L$ : caudal de líquido ( $\text{m}^3/\text{s}$ )

$L_w$ : caudal máxico de líquido ( $\text{kg}/\text{s}$ )

$\rho_l$ : densidade do líquido ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )

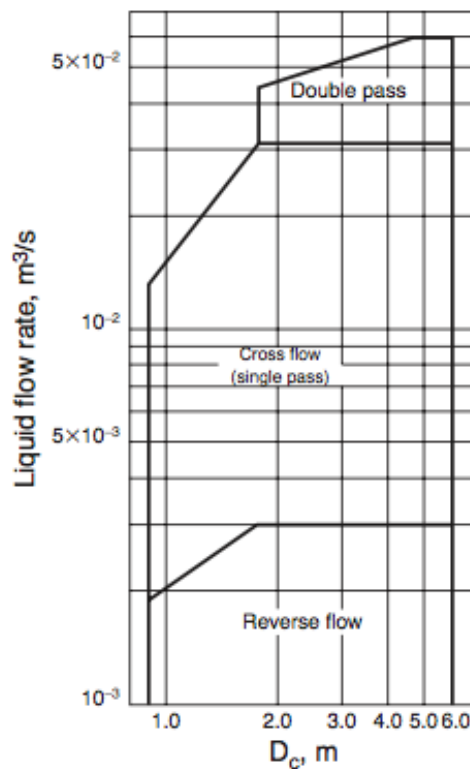


Figura II.15. Gráfica para a selección do patrón de fluxo. Fonte: (1)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Os datos obtidos coa utilización da ecuación II.40 e a Figura II.15 móstranse na Táboa II.23.

Táboa II.23. Datos para a selección do patrón de fluxo. Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Cabezas	Colas
$L_w$ (kg/s)	63,55	55,17
$Q_L$ (m <sup>3</sup> /s)	0,0742	0,0648
$D_c$ (m)	6,000	
Patrón fluxo	Fluxo cruzado de dobre paso	

O fluxo escollido é fluxo cruzado de paso simple, para o cal o método de G. Towler e R. Sinnott ofrece o seu método, pese a que o indicado na Figura II.15 sería fluxo cruzado con dobre paso. Como primeira aproximación de deseño, ao tratarse dunha elaboración preliminar, enténdese como asumible.

Realízase deste xeito debido a que todos os parámetros dos apartados posteriores están en función do patrón de fluxo cruzado con paso simple.

### 6.7. Estrutura do prato

A partir da área do prato e da súa área neta, determínanse as demais áreas características do prato, mostradas nas ecuacións II.41, II.42, II.43, II.44 e II.45 (1).

Os cálculos realízanse co novo diámetro de columna  $D_c = 6$  m.

$$A_c = \frac{\pi D_c^2}{4} \quad (\text{II.41})$$

Onde,  $A_c$ : área total transversal que ten a columna (m<sup>2</sup>)

$D_c$ : diámetro da columna estandarizado (m)

$$A_d = 0,12A_c \quad (\text{II.42})$$

Sendo,  $A_d$ : área da baixante (m<sup>2</sup>)

$$A_n = A_c - A_d \quad (\text{II.43})$$

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Onde,  $A_n$ : área neta dispoñible ( $m^2$ )

$$A_a = A_c - 2A_d \quad (II.44)$$

Sendo,  $A_a$ : área activa ou de burbulleo ( $m^2$ )

$$A_p = 0,1A_a \quad (II.45)$$

Onde,  $A_p$ : área perforada (excluíndo zonas de calma e do soporte, é un 10% da área activa,  $A_a$ )

Os valores da lonxitude do rebosadeiro,  $l_w$  (m), do diámetro do orificio,  $d_0$  (mm), da altura do rebosadeiro,  $h_w$  (mm) e o espesor do prato (mm) en función do material empregado na súa construción foron obtidos segundo bibliografía (1).

O resultado das dimensións que caracterizan a estrutura do prato detállanse na Táboa II.24

Táboa II.24. Parámetros que caracterizan a estrutura do prato na torre T-301. Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Cabezas
$D_c$ (m)	6,000
$A_c$ ( $m^2$ )	28,274
$A_d$ ( $m^2$ )	3,393
$A_n$ ( $m^2$ )	24,881
$A_a$ ( $m^2$ )	21,488
$A_p$ ( $m^2$ )	2,149
$L_w$ (m)	4,620
$d_0$ (mm)	5,000
$h_w$ (mm)	12,000
Espesor prato (mm)	5,000

### 6.8. Estudo do fenómeno “goteo”

A velocidade á que opera o vapor (para un 70% de *turndown*) debe ser maior que a velocidade de goteo,  $u_h$ , para asegurar a operación estable da columna de destilación (1).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

A ecuación II.46. permite calcular o parámetro necesario para obter o coeficiente  $K_2$  co que se precisa na ecuación II.47 para obter a devandita velocidade.

Posteriormente, coa ecuación II.48 compróbase o valor da velocidade de operación do vapor,  $u_v$  (m/s), verificando que o seu valor é maior que a velocidade á que existe goteo.

$$u_h = \frac{[K_2 - 0,90(25,4 - d_h)]}{(\rho_v)^{1/2}} \quad (\text{II.45})$$

Sendo,  $u_h$ : velocidade mínima do vapor á cal se produce o goteo (m/s)

$K_2$ : parámetro que se obtén da Figura II.16

$d_h$ : diámetro do burato (mm) (5 mm no presente deseño)

$\rho_v$ : densidade do vapor ( $\text{kg/m}^3$ )

$$h_{ow} = 750 \left[ \frac{L_w}{\rho_l l_w} \right]^{2/3} \quad (\text{II.46})$$

Onde,  $h_{ow}$ : altura do líquido sobre o rebosadeiro (mm)

$L_w$ : caudal máxico de líquido (kg/s)

$\rho_l$ : densidade do líquido ( $\text{kg/m}^3$ )

$l_w$ : lonxitude do rebosadeiro (m)

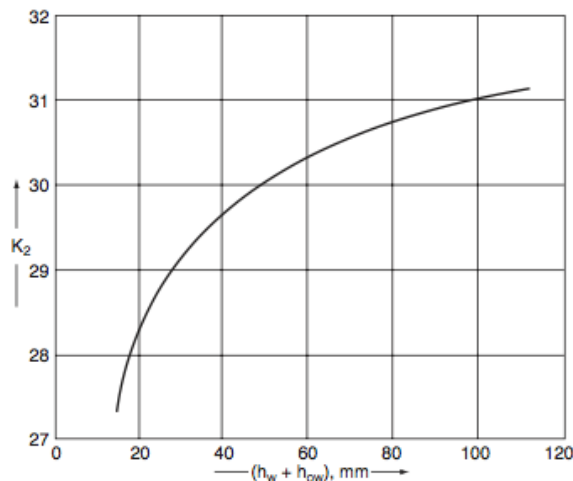


Figura II.16. Gráfica para o cálculo do parámetro  $K_2$  proposto por Eduljee (1959). Fonte: (1)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Na Táboa II.25 móstranse os resultados obtidos para a sección de cabezas e de colas e compróbase que a velocidade de goteo é inferior á velocidade de operación do vapor, de maneira que se asegure a estabilidade da operación.

Para poder facer esta comprobación, mediante as ecuacións II.47 e II.48 obtéñense os valores de  $Q_{v,\min}$  ( $\text{m}^3/\text{s}$ ) e  $u_v$  ( $\text{m}/\text{s}$ ), respectivamente.

$$Q_{v,\min} = 0,7Q_{v,\max} \quad (\text{II.47})$$

Onde,  $Q_{v,\min}$ : caudal mínimo de vapor para un 70% de *turndown* ( $\text{m}^3/\text{s}$ )

$$u_v = \frac{Q_{v,\min}}{A_p} \quad (\text{II.48})$$

Sendo,  $u_v$ : velocidade de operación do vapor ( $\text{m}/\text{s}$ )

Táboa II.25. Resultados da comprobación da velocidade de goteo. Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Cabezas	Colas
$L_{w,\max}$ (kg/s)	63,546	55,174
$L_{w,\min}$ (kg/s) 70% <i>turndown</i>	44,482	38,622
$h_{ow}$ (mm)	37,642	34,393
$h_w+h_{ow}$ (mm)	49,642	46,393
$K_2$	30,000	29,800
$u_h$ (m/s)	12,131	10,310
$Q_{v,\min}$ ( $\text{m}^3/\text{s}$ ) 70% <i>turndown</i>	52,339	29,474
$u_v$ (m/s)	24,357	13,716

Efectivamente, como  $u_v > u_h$ , non existe goteo na operación da torre T-301 e a comprobación dáse por rematada.

### 6.9. Caída de presión

Na Táboa II.21 supúxose unha caída de presión de 0,8 kPa por prato, de maneira que en cabezas sería de 26,66 kPa e en colas de 50,66 kPa.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Agora debe comprobarse que esa estimación estea ben fundamentada en base á caída de presión real. En caso de non ser así habería que volver iterar cos datos físicos e termodinámicos da sección de colas á presión que fose convinte.

No deseño actual, a caída de presión cobra vital importancia ao tratarse dunha destilación a baleiro, polo que un  $\Delta P$  elevado suporía unha porcentaxe máis que significativa sobre a presión de operación, feito que se trata de minimizar.

A ecuación empregada para o cálculo de  $\Delta P$  é a II.49 (1).

$$\Delta P_t = 9,81 * 10^{-3} * h_t \rho_l \quad (\text{II.49})$$

Onde,  $\Delta P_t$ : caída de presión total (Pa)

$h_t$ : caída de presión total (mm de líquido)

Para o cálculo de  $h_t$  empregárase a ecuación II.50 (1).

$$h_t = h_d + (h_w + h_{ow}) + h_r \quad (\text{II.50})$$

Sendo,  $h_d$ :  $\Delta P$  prato seco (mm líquido)

$h_r$ :  $\Delta P$  residual (mm líquido)

De maneira que para o cálculo de  $h_d$  se emprega a ecuación II.51 e para a obtención de  $h_r$  segundo propuxeron Hunt et al. (1955) empregárase a ecuación II.52 (1).

$$h_d = 51 \left[ \frac{u_h}{C_0} \right]^2 \frac{\rho_v}{\rho_l} \quad (\text{II.51})$$

Onde,  $u_h$ : velocidade máxima de vapor (m/s)

$C_0$ : coeficiente en función do orificio (ver Figura II.17)

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

E por último,

$$h_r = \frac{12,5 * 10^3}{\rho_l} \quad (II.52)$$

Todos os parámetros restantes xa foran calculados e amosados nas Táboas II.24 e II.25.

A Figura II.17 mostra un diagrama no que se obtén o valor do coeficiente en función do orificio.

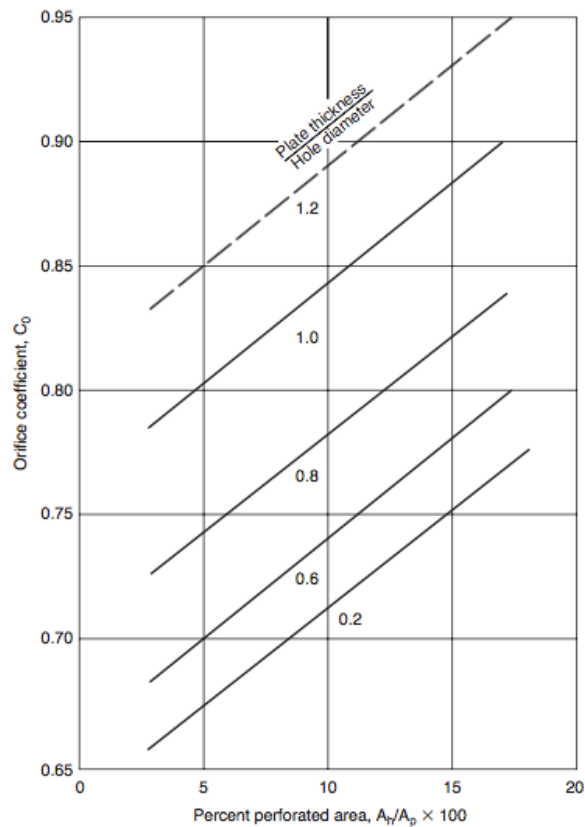


Figura II.17. Gráfica para a obtención do factor  $C_0$ . Fonte: (1)

Os datos obtidos para a caída de presión móstranse na Táboa II.26

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.26. Resultados do cálculo da caída de presión

Parámetro	Cabezas	Colas
$u_{h,máx}$ (m/s)	34,80	19,59
$C_0$	0,84	0,84
$h_d$ (mm)	94,09	40,14
$A_h/A_p$	10 %	
$h_r$ (mm)	14,598	14,683
$h_t$ (mm)	158,331	101,212
$\Delta P_t$ (Pa)	1330,031	845,250
$h_{t,suposto}$ (mm)	142,852	143,691

A caída de presión suposta en cabezas é lixeiramente inferior á real, pero vese claramente compensada polo exceso de caída de presión estimada na zona de colas. Por esa razón considérase de que o valor de 0,8 kPa inicial é unha boa predición para proceder co deseño hidráulico.

### 6.10. Deseño do retorno da baixante

Na Figura II.18 móstrase o esquema interior da columna de destilación T-301 cos parámetros de deseño da baixante que se calcularán no presente apartado.

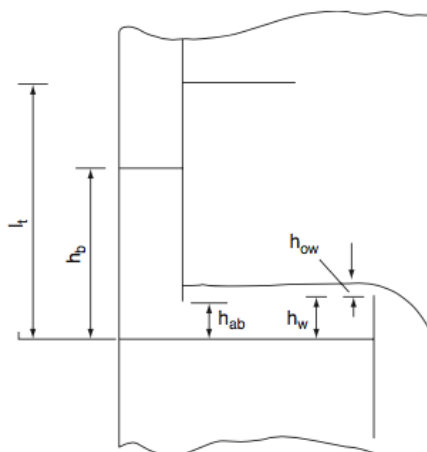


Figura II.18. Esquema da baixante dos pratos da torre T-301. Fonte: (1)

Mediante a ecuación II.53 calcúlase o parámetro  $h_b$ , ou altura da baixante, para o cal se fará uso da ecuación II.54 para obter o parámetro  $h_{dc}$ .

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

$$h_b = (h_w + h_{ow}) + h_t + h_{dc} \quad (II.53)$$

Onde,  $h_b$ : altura da baixante, medida dende a superficie do prato (mm)

$h_{dc}$ : p rdida de carga na baixante (mm)

Seguidamente,

$$h_{dc} = 166 \left[ \frac{L_{wd}}{\rho_l A_m} \right]^2 \quad (II.54)$$

Sendo,  $L_{wd}$ : caudal m sico de l quido m is alto (kg/s)

$A_m$ : o valor menor entre  $A_d$  e  $A_{ap}$  ( $m^2$ ). Ecuaci n II.55 e II.56

$$A_{ap} = h_{ap} l_w \quad (II.55)$$

Onde,  $A_{ap}$ :  rea debaixo da baixante ( $mm^2$ )

$h_{ap}$ : altura dende o fondo do prato   baixante (mm)

$$h_{ap} = h_w - [5 - 10 \text{ mm}] \quad (II.56)$$

Por  ltimo o dese o debe cumprir a ecuaci n II.57

$$h_b < \frac{1}{2} (l_t + h_w) \quad (II.57)$$

Na T boa II.27 pres ntanse os resultados obtidos

T boa II.27. Resultados do dese o da baixante. Fonte: Elaboraci n propia

Par�metro	Cabezas	Colas
$h_{ap}$ (mm)	4,500	
$A_{ap}$ ( $m^2$ )	20,79	
$A_d$ ( $m^2$ )	3,393	
$h_{dc}$ (mm)	0,079	0,061
$h_b$ (mm)	208,053	147,666
$l_t$ (mm)	600	
$0,5(l_t + h_w)$	306	

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Tal e como se expón na Táboa II.27, cómprese a inecuación II.57 polo que o deseño da baixante se considera realizado e correcto.

### 6.11. Cálculo do tempo de residencia na baixante

Mediante a ecuación II.57 compróbase que os tempos de residencia,  $t_r$ , sexan superiores a 3 s (1).

$$t_r = \frac{A_d h_b \rho_L}{L_w} \quad (\text{II.57})$$

Onde,  $t_r$ : tempo de residencia (s)

Os datos obtidos móstranse na Táboa II.28

Táboa II.28. Resultados do deseño da baixante. Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Cabezas	Colas
$t_r$ (s)	9,51	7,73

### 6.12. Obtención da xeometría do prato e cálculo da disposición do pitch

Empregando a Figura II.19 e cos ratio do eixo de abscisas xa calculado, pódense obter  $l_h$ , como se mostra na figura e o ángulo do reboadeiro,  $\theta_c^0$  (1).

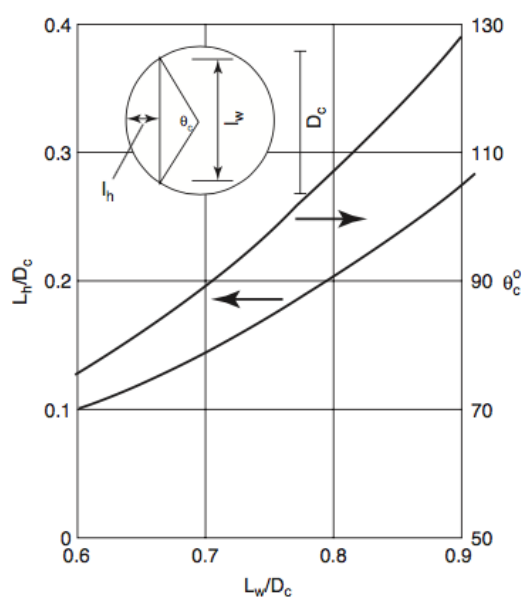


Figura II.19. Gráfica para obter os detalles do prato. Fonte: (1)

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Empregando as ecuacións II.58, II.59, II.60, II.61, II.62 e II.63 (1), obtéñense os detalles do prato. Tense en conta un espesor do anel de suxeición de 50 mm.

$$\theta_{subtendido} = 180^{\circ} - \theta_c^0 \quad (II.58)$$

$$L_{se} = (D_c - 50 * 10^{-3}) \pi \frac{\theta_{subtendido}}{180^{\circ}} \quad (II.59)$$

Onde,  $L_{se}$ : lonxitude correspondente ao anel de suxeición (m)

$$A_{np} = 50 * 10^{-3} * L_{se} \quad (II.60)$$

Sendo,  $A_{np}$ : área non perforada (m<sup>2</sup>)

$$L_{calma} = (D_c - 50 * 10^{-3}) * \text{sen} \left( \frac{\theta_c^0}{2} \right) \quad (II.61)$$

Onde,  $L_{calma}$ : lonxitude media correspondente ao área de calma (m)

$$A_{calma} = 2 * L_{calma} * 50 * 10^{-3} \quad (II.62)$$

Sendo,  $A_{calma}$ : área das zonas de calma (m<sup>2</sup>)

$$A_p = A_a - A_{calma} - A_{np} \quad (II.63)$$

Onde,  $A_p$ : área total das perforacións (m<sup>2</sup>)

Ao coñecer a relación  $A_h/A_p$ , onde  $A_h$  é a área dos buratos (m<sup>2</sup>), xa se pode coñecer a lonxitude do pitch do prato,  $l_p$  (mm), empregando a Figura II.20 (1).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

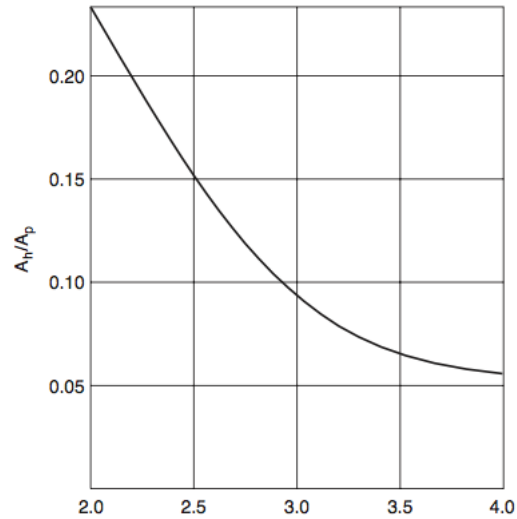


Figura II.20. Gráfica para a obtención do pitch. Fonte: (1)

Na Táboa II.29 móstranse os detalles de cada prato calculados no presente apartado seguindo as diversas ecuacións e figuras indicadas.

Táboa II.29. Parámetros do prato

Parámetro	Valor
$l_w/D_c$	0,77
$l_h/D_c$	0,18
$l_h$ (m)	1,08
$\theta_c^0$ (°)	105
$\theta_{subtendido}^0$ (°)	75
$L_{se}$ (m)	7,789
$A_{np}$ (m <sup>2</sup> )	0,389
$L_{calma}$ (m)	4,687
$A_{calma}$ (m <sup>2</sup> )	0,469
$A_p$ (m <sup>2</sup> )	20,630
$A_h/A_p$	0,104
$l_p/d_h$	2,85
$l_p$ (mm)	14,25
Área orificio (m <sup>2</sup> )	$1,96 \cdot 10^{-5}$
Número de buratos	109440

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 6.13. Comprobación da inundación cos datos de deseño obtidos

É importante coñecer se a inundación do 85% coa que se traballou ao longo de todo o deseño hidráulico foi adecuado. Para iso, empréganse as ecuacións II.64 e II.65 (1).

$$u_h = \frac{Q_{v,máx}}{A_n} \quad (\text{II.64})$$

Onde,  $u_h$ : velocidade de vapor co diámetro de columna estandarizado (m/s)

$$\% \text{ inundación} = \frac{u_h}{u_f} \quad (\text{II.65})$$

Os datos obtidos son os que se mostran na Táboa II.30

Táboa II.30. Recálculo da inundación

Parámetro	Cabezas	Colas
$u_v$ (m/s)	3,005	1,692
$u_f$ (m/s)	3,755	2,831
% inundación	80,00	59,77

En ámbolos dous casos, a inundación é menor que a suposta inicialmente (85%), polo que se valida o deseño realizado.

### 6.14. Comprobación do arrastre

Para os valores de  $FLV$  xa calculados hai que comprobar que o arrastre,  $\psi$ , cumpra que  $\psi < 0,1$ .

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

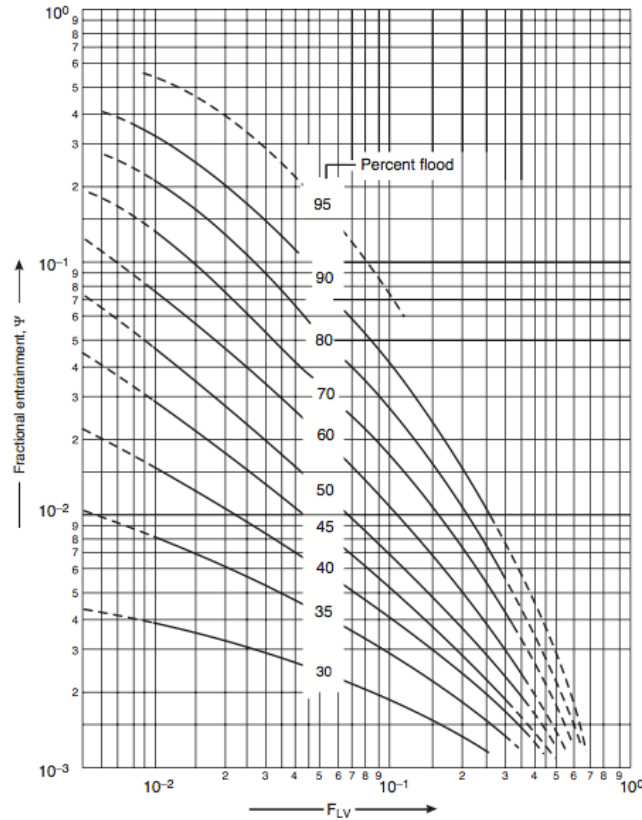


Figura II.21. Gráfica para a comprobación do arrastre. Fonte: (1)

Os valores obtidos preséntanse na Táboa II.31

Táboa II.31. Comprobación do arrastre

Parámetro	Cabezas	Colas
$F_{LV}$	0,0303	0,0405
$\psi$	0,09	0,027

En ámbolos casos o arrastre é menor a 0,1. Conclúese conque o arrastre existente na torre T-301 é aceptable ao estar por debaixo do valor recomendado (1).

### 6.15. Altura da columna T-301

Hai multitude de bibliografía que propón diversidade de metodoloxías para poder obter a altura da columna, tendo en conta o espesor dos pratos, o espazado entre eles, así como alturas libres de na zona de cabezas e colas.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Neste proxecto propónse o método proposto por James M. Douglas representado na ecuación II.66 (4).

$$H_v = 2,3N_{reais} \quad (II.66)$$

Onde,  $H_v$ : altura da columna (ft)

$N_{reais}$ : número de pratos reais

Táboa II.32. Altura da torre T-301

Parámetro	Valor
$N_{reais}$	30
$H_v$ (ft)	69,0
$H_v$ (mm)	21031,2

#### 6.16. Compoñentes e accesorios da torre T-301

A torre T-301 disporá de entrada de alimentación, saída de produto por cabezas e por colas, contando cos pratos necesarios para lograr a separación.

En adición a isto, disporanse de bocas de home para realizar labores de mantemento así como a disposición de visores cada dous metros para visualizar o seu interior e detectar calquera anomalía durante a operación.

### 7. DESEÑO MECÁNICO

O deseño mecánico é unha parte esencial para rematar de coñecer as dimensións do equipo a deseñar, neste apartado, a torre T-301. Nel, definiranse as temperaturas e presións de deseño, así como o tipo de material a empregar e o seu espesor necesario para soportar a operación, tanto do corpo da columna de destilación como do tipo de cabezais seleccionado.

Será obxecto deste apartado a selección do tipo de soporte a empregar, así como o espesor que deberá ter.

Por último tamén se definirán os esforzos principais aos que está sometido o equipo, tanto da torre T-301 como do soporte.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O deseño mecánico lévase a cabo coa combinación do código ASME BPV sección VIII div.1 e o código API RP 520. Asimesmo, empregárase a metodoloxía proposta no manual cuxa autoría corresponde a G. Towler e R. Sinnott (1). Asemade, empregárase a metodoloxía proposta por Ashby M.F. para a selección do material do equipo (5).

### 7.1. Temperatura de operación

Segundo o código ASME BPV sección VIII div.1, a temperatura de deseño debe ser superior á de operación para garantir a integridade do equipo aplicando un factor de seguridade. Isto reflíctese na ecuación II.67 (1).

$$T_{deseño} = T_{operación} + 50 \text{ }^{\circ}\text{F} \quad (\text{II.67})$$

A temperatura de operación enténdese como a maior temperatura que se alcanza no equipo, isto é, na zona de colas.

Na Táboa II.33 amósanse os resultados.

Táboa II.33. Temperatura de deseño da T-301

Parámetro	Valor
$T_{operación}$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	120,81
$T_{operación}$ ( $^{\circ}\text{F}$ )	249,46
$T_{deseño}$ ( $^{\circ}\text{F}$ )	299,46
$T_{deseño}$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	148,59

### 7.2. Presión de deseño

O código API RP 520 recomenda que a presión de deseño sexa cando menos un 10% superior á presión de operación (1).

No caso actual, ao ser unha torre de destilación que opera a baleiro, o peor escenario ao que se estaría exposto, é aquel no que a presión sexa a atmosférica, de maneira que se supere a recomendación dun 10% de incremento sobre a presión de operación.

Por esta razón, a presión escollida como presión de deseño será a atmosférica; isto é,  $P_{deseño} = 101,3 \text{ kPa}$ .

### 7.3. Selección do material

No deseño dun equipo sometido a presión, ben sexa presión externa ou interna, a metodoloxía a seguir pode tomar dúas variantes ben diferenciadas. As devanditas variantes poden ser que o material ceda antes da existencia de fractura, ou que verta antes da rotura (5).

No primeiro caso, esta metodoloxía é empregada para recipientes pequenos que están sometidos a algún tipo de presión (interna ou externa), mentres que para recipientes de maior tamaño, como é o caso da torre T-301, emprégase o método da fuga previa á rotura (5).

Na Táboa II.34 comézase coa aplicación do método, definindo a súa función na que se fai constar o obxectivo principal. Asemade, ponse de releve as restricións ás que está sometida a elección, así como as variables que permanecen libres e que determinarán o material a escoller (5).

Táboa II.34 Metodoloxía Ashby de selección de material. Fonte (5).

Función	Conter a presión de xeito seguro
Obxectivo	Garantir a seguridade producindo unha fuga antes da fractura do material
Restricións	O diámetro da columna está prefixado segundo o deseño termodinámico do apartado 6 do presente anexo
Variables libres	O tipo de material a escoller

Na ecuación II.68 móstrase a expresión que debe cumprir a presión para garantir a seguridade do equipo (5). Igualmente, pódese ver na ecuación II.69 o índice de material presente na ecuación II.68 que se debe maximizar, obtendo os materiais que serían susceptibles de ser escollidos segundo a Figura II.22 (5).

$$P \leq \frac{4C^2}{\pi R} \left( \frac{K_{IC}^2}{\sigma_y} \right) \quad (\text{II.68})$$

Onde, P: presión de deseño (Pa)

C: constante próxima á unidade

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

R: radio da columna (m)

$K_{IC}$ : resistencia á rotura ( $\text{Mpa}\cdot\text{m}^{1/2}$ )

$\sigma_y$ : límite de elasticidade (Mpa)

$$M_3 = \left( \frac{K_{IC}^2}{\sigma_y} \right) \quad (\text{II.69})$$

Sendo,  $M_3$ : índice de material a maximizar.

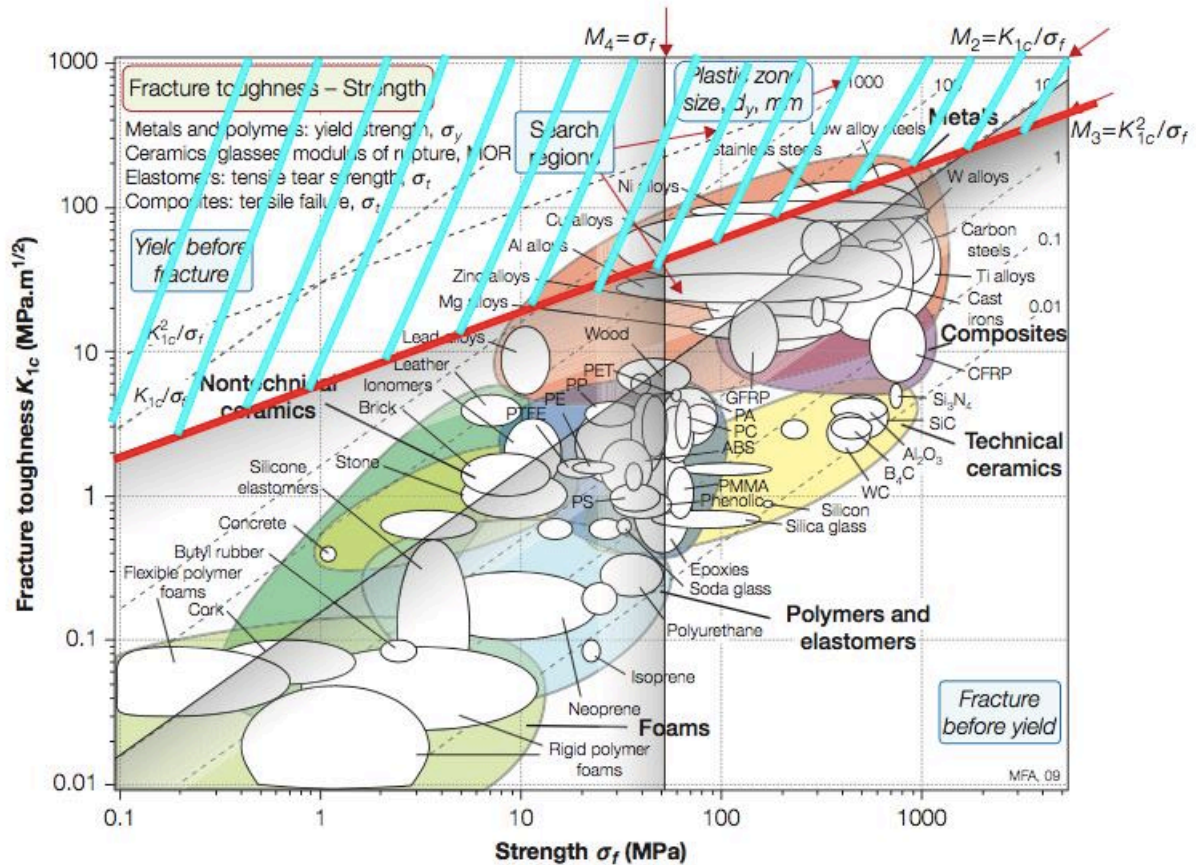


Figura II.22. Gráfica para a selección do material segundo o método Ashby. Fonte: (5)

A Figura II.22 permite maximizar o índice  $M_3$  proposto pola ecuación II.69, de maneira que a zona raiada de cor azul é a que cumpriría as restricións esixidas.

Os materiais que cumpren este tipo de restricións son os metais, dentro dos cales se atopa unha gran variedade de aliaxes, como as de cobre, de aluminio ou de níquel entre outras. O aceiro ao carbono cubre as necesidades impostas, e dado o seu custo inferior, será o material seleccionado.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 7.4. Cálculo do espesor do corpo da columna

Segundo o código ASME BPV Sección VIII div.1, traballar con presións inferiores á atmosférica equipárase a ter presión externa. Por iso o cálculo se realiza segundo os pasos descritos no seu apartado UG.28. Deseño de carcasa e tubos sometidos a presión externa. Para recipientes cilíndricos onde  $D_0/t > 10$ :

Primeiramente débese asumir un espesor  $t$  (mm) e posteriormente obter as dimensións  $D_0/t$  e  $L/D_0$ .

Seguidamente, cos valores de  $D_0/t$  e  $L/D_0$  e empregando a Figura II.23 dispoñible no código ASME BPV Sección II parte D, figura G, obtense o valor do factor A.

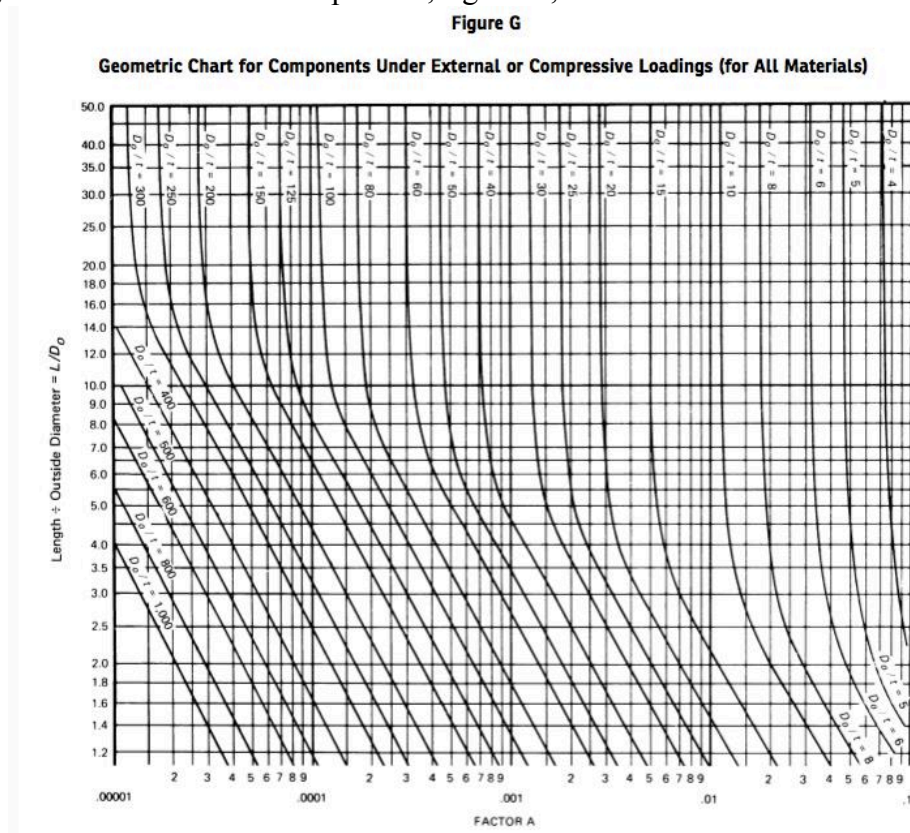


Figura II.23. Gráfica para a obtención do parámetro A. Fonte: código ASME BPV Sección II Parte D Figura G

Unha vez obtido o valor de A mediante a Figura II.23, a través da II.24 obtense o valor do parámetro B. A Figura II.24 obtense do código ASME BPV Sección II Parte D, figura CS-1.

**Figure CS-1**  
**Chart for Determining Shell Thickness of Components Under External Pressure Developed for Carbon or Low Alloy Steels With Specified Minimum Yield Strength Less Than 30,000 psi**

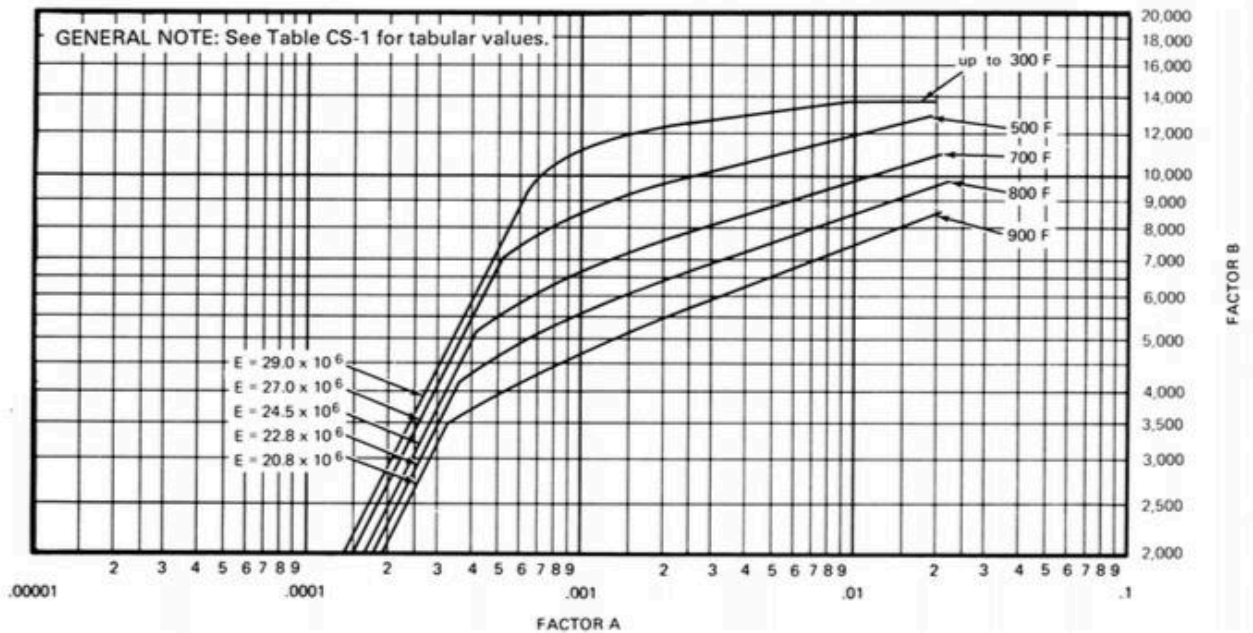


Figura II.24. Gráfica para a obtención do parámetro B. Fonte: código ASME BPV sección II Parte D Figura CS-1

Finalmente, calcúlase a presión máxima admisible,  $P_a$  (kPa), mediante a ecuación II.70, debendo ser maior ou igual á presión de deseño, garantindo que o deseño é seguro. Trátase por tanto dun proceso iterativo ata atopar o espesor que satisfaga todo o descrito. Cabe resaltar que deben concordar as unidades, xa que as gráficas están no sistema imperial, e os resultados desexados son os pertencentes ao S.I. de unidades.

Para valores de A que caen na zona esquerda das liñas de temperatura do material aplicable, empregarase a ecuación II.71

$$P_a = \frac{2AE}{3(D_0/t)} \quad (\text{II.70})$$

Onde,  $P_a$ : presión máxima admisible (N/mm<sup>2</sup>)

E: módulo de elasticidade (N/mm<sup>2</sup>)

$$P_a = \frac{4B}{3(D_0/t)} \quad (\text{II.70})$$

Sendo:  $P_a$ : presión máxima admisible (psi)

5) Iterar ata conseguir  $P_a \geq P_{\text{deseño}}$

Os resultados obtidos preséntanse na Táboa II.35, tendo en conta que o límite de elasticidade do aceiro,  $E$  ( $\text{N}/\text{mm}^2$ ) é de  $E = 195122,84 \text{ N}/\text{mm}^2$  para a temperatura de deseño.

Táboa II.35. Cálculo do espesor do corpo cilíndrico da torre T-301. Fonte: Elaboración propia

t (mm)	$D_0/t$	$L_0/t$	A	B	$P_a$ (Pa)
10	602	3,494	2,00E-05	-	0,00432166
12	502	3,491	3,30E-05	-	0,0085512
15	402	3,488	4,70E-05	-	0,01520858
20	302	3,482	7,00E-05	-	0,03015143
25	242	3,476	1,00E-04	-	0,05375285
30	202	3,470	1,25E-04	-	0,08049622
32	189,50	3,468	1,40E-04	2000	14,0721196
<b>34</b>	<b>178,47</b>	<b>3,466</b>	<b>1,55E-04</b>	<b>2250</b>	<b>16,8094924</b>

O espesor que cumpre os requirimentos é  $t=34$  mm, para o cal se engaden outros catro mm de sobre espesor por mor da corrosión.

$$t_{\text{CARCASA}} = 38 \text{ mm}$$

### 7.5. Cálculo do espesor dos cabezais

Existe diversos tipos de cabezais, en función das características da operación. Os máis comúns son os cabezais toriesféricos, hemisféricos e elipsoidais (1).

A utilización de uns ou outros varía segundo a presión á que están sometidos. Así, para presións inferiores aos 15 bar, os toriesféricos son os máis empregados. Os hemisféricos soportarían ata o dobre de presión que os anteriores, sendo os elipsoidais os empregados para presións superiores (1).

Como é de supoñer, o custo aumenta, sendo os toriesféricos os que menor custo presentan, e ao tratarse dun deseño no cal a presión de deseño é a atmosférica, este tipo de cabezais cumpre perfectamente o cometido para o cal foron deseñados.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O procedemento de cálculo realízase segundo o código ASME BPV Sección VIII Div.1 UG-33, nos que os cabezais están expostos a presión na zona convexa.

O deseño de cabezais toriesféricos baixo estas condicións, tal e como denota o citado código, é equiparable aos cabezais elipsoidais, cuxa ecuación II.71 será de aplicación.

$$A = \frac{0,125}{R_0/t} \quad (\text{II.71})$$

Onde, A: factor necesario para o cálculo do espesor

R<sub>0</sub>: radio externo tendo en conta o espesor (mm)

O procedemento volve ser iterativo, pero neste caso, o parámetro A calcularíase seguindo a ecuación II.71.

O resto dos pasos son similares aos do apartado 7.4 do presente anexo II Parte II; mostrándose os resultados na Táboa II.36

Táboa II.36. Cálculo o espesor dos cabezais toriesféricos da torre T-301

t (mm)	R <sub>0</sub> /t	D <sub>0</sub> /t	A	B	Pa (Pa)
5	601	1202	2,08E-04	2800	3,11
10	301	602	4,15E-04	5700	12,62
<b>12</b>	<b>251</b>	<b>502</b>	<b>4,98E-04</b>	<b>7200</b>	<b>19,12</b>
15	201	402	6,22E-04	9000	29,85

O espesor que satisfai os requirimentos é de 12 mm, de maneira que tendo en conta o espesor a maiores por mor da corrosión, o espesor final quedaría:

$$t_{\text{CABEZAIS}} = 16 \text{ mm}$$

Tanto o espesor dos cabezais como do corpo cilíndrico da torre T-301 satisfán os valores de espesor mínimo necesario en función do diámetro, fixado en bibliografía de 12 mm para recipientes sometidos a presión cuns diámetros comprendidos no rango 3,0-3,5 m (1).

As dimensións proporcionadas polo fabricante serán empregadas na realización dos planos (6). Na Figura II.25 poden visualizarse as súas dimensións características.

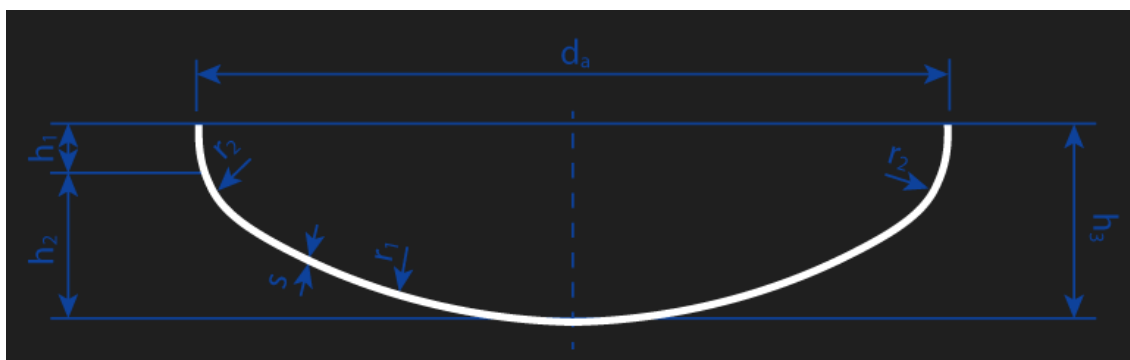


Figura II.25. Dimensións do cabezal toriesférico. Fonte: (6)

Na Táboa II.37 móstranse as correspondencias das dimensións e os seus valores.

Táboa II.37. Dimensións do cabezal toriesférico. Fonte: (6)

Dimensión	Ecuación	Valor
$d_a$ (m)	$d_a = D_i + 2t_{cabezal}$	6,032
$s$ (m)	-	0,016
$r_1$ (m)	$r_1 = d_a$	6,032
$r_2$ (m)	$r_2 = 0,1d_a$	0,603
$h_1$ (m)	$h_1 = 3,5s$	0,056
$h_2$ (m)	$h_2 = 0,1935d_a - 0,455s$	1,160
$h_3$ (m)	$h_3 = h_1 + h_2$	1,216

### 7.6. Cálculo do espesor de illante

Usualmente na industria, as superficies quentes non superan os 50°C por razóns de seguridade. Esta temperatura é suficiente para evitar unha queimadura a un operario que leve luvas de protección.

Como base de cálculo tense a temperatura de deseño da columna, que é a maior temperatura que se alcanza na torre T-301 corrixida co factor de seguridade de +50°F.

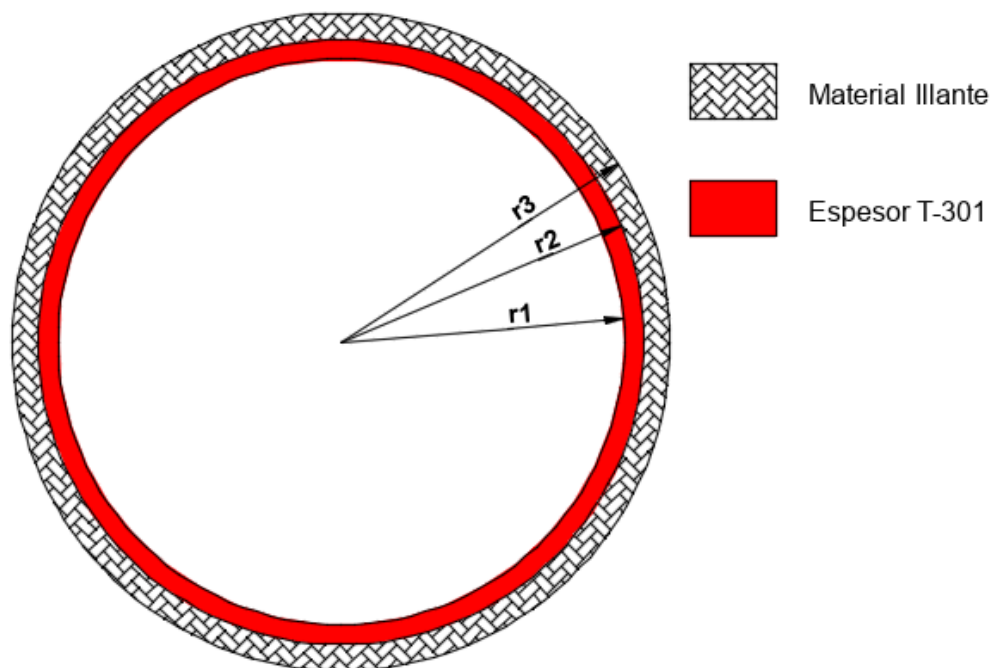


Figura II.26. Esquema do material illante na torre T-301. Fonte: Elaboración propia en Autodesk AutoCAD®

Na Figura II.26 represéntase un esquema do illante ao redor da columna de destilación T-301. Acto seguido, para calcular o espesor do mesmo, represéntase na Figura II.27 o esquema de resistencias en serie para plasmar o fluxo de calor que pasa por cada unha delas, permanecendo este constante.

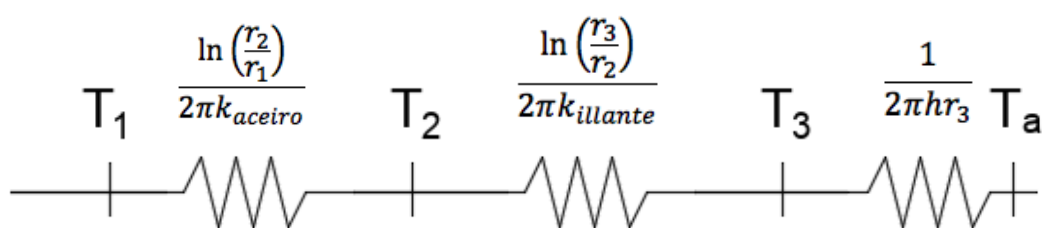


Figura II.27. Resistencias en serie polas que pasa o fluxo de calor  $q''$  ( $W/m^2$ ). Fonte: Elaboración propia en AutoCAD®

O cálculo do coeficiente de convección natural do aire,  $h$  ( $W/m^2K$ ) calcúlase mediante a ecuación de Churchill e Benstein expresado na ecuación II.72 (7). Asemade, faise uso da ecuación II.73 para obter o coeficiente desexado.

Na Táboa II.38 móstranse os datos termofísicos relativos ao aire a 300K (7).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.38. Datos do aire a 300K. Fonte: (7)

Parámetro	Valor
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1,1614
$C_p$ (kJ/kgK)	1,007
$\mu$ (Ns/m <sup>2</sup> )	184,6*10 <sup>-7</sup>
$D$ (m <sup>2</sup> /s)	15,89*10 <sup>-6</sup>
$K$ (W/mK)	26,3*10 <sup>-3</sup>
$\alpha$ (m <sup>2</sup> /s)	22,5*10 <sup>-6</sup>
Pr	0,707

$$Nu_D = 0,3 + \frac{0,62Re_D^{1/2} Pr^{1/3}}{[1 + (0,4/Pr)^{2/3}]^{1/4}} \left[ 1 + \left( \frac{Re_D}{282000} \right)^{5/8} \right]^{4/5} \quad (\text{II.71})$$

Onde,  $Nu_D$ : Nusselt

$Re_D$ : Reynolds (Ver ecuación II.73)

Pr: Prandtl (tabulado na bibliografía proposta por F. Incropera (7))

$$Nu_D = \frac{hD}{k} \quad (\text{II.72})$$

Onde,  $h$ : coeficiente de convección (W/m<sup>2</sup>K)

$D$ : diámetro da columna (m)

$k$ : coeficiente de conducción (W/mK)

$$Re_D = \frac{\rho v D}{\mu} \quad (\text{II.73})$$

Sendo,  $\rho$ : densidade do aire (kg/m<sup>3</sup>)

$v$ : velocidade do aire (m/s)

$\mu$ : viscosidade (kg/ms)

Cunha estimación da velocidade do vento de 6 m/s e empregando as ecuacións II.71, II.72 e II.73 (7), os datos obtidos preséntanse na Táboa II.39

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.39. Resultado do cálculo do coeficiente de convección. . Fonte: Elaboración propia e (7)

Parámetro	Valor
$Re_D$	$2,26 \cdot 10^6$
$Pr$	0,707
$Nu_D$	2502,207
$h$ (W/m <sup>2</sup> K)	10,97

O resultado é acorde ao esperado, ao tratarse de convección natural (7). O valor está dentro do rango de valores máis comúns para aire con convección natural.

Para calcular o espesor de illante, emprégase a ecuación II.74 e II.75 (7), onde a única incógnita é o espesor de material illante. Isto lógrase ao saber que o fluxo de calor que pasa por cada unha das resistencias mostradas na Figura II.26 é constante.

Os datos necesarios obtéñense de bibliografía e preséntanse na Táboa II.40.

Táboa II.40. Propiedades termofísicas do aceiro e do illante. Fonte: (7)

Parámetro	Valor
$\rho_{\text{aceiro}}$ (kg/m <sup>3</sup> )	7854
$k_{\text{aceiro}}$ (W/mK)	60,5
$\rho_{\text{illante}}$ (kg/m <sup>3</sup> )	100
$k_{\text{illante}}$ (W/mK)	0,076

Como illante emprégase lá de fibra mineral, escollida de entre os materiais illantes dispoñibles na Táboa A.3 da bibliografía cuxa autoría corresponde a Frank P. Incropera (7).

$$\frac{q}{L} = \frac{T_1 - T_3}{\frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{2\pi k_{\text{aceiro}}} + \frac{\ln\left(\frac{r_3}{r_2}\right)}{2\pi k_{\text{illante}}}} \quad (\text{II.74})$$

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

$$\frac{q}{L} = \frac{T_1 - T_2}{\frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{2\pi k_{aceiro}}} \quad (\text{II.75})$$

O procedemento sería obter o fluxo de calor coa ecuación II.75 e posteriormente, substituír o seu valor na ecuación II.74, cuxa única incógnita sería  $r_3$ , o radio buscado. Por último, a diferenza entre os radios  $r_3$  e  $r_2$  darán lugar ao espesor de material illante.

Táboa II.41 Cálculo do espesor de lá de fibra mineral. Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$q/L$ (W/m)	543,39
$T_2$ (K)	393,79
$r_3$ (m)	3152,0
$t_{\text{illante}}$ (mm)	133,0

### 7.7. Cálculo das cargas debidas ao peso

Neste apartado desenrolaranse os cálculos relativos aos diferentes pesos aos que está sometida a torre T-301. Estas cargas serán, a carga por peso libre do recipiente baleiro, o peso do illante, do líquido, dos pratos e as cargas por vento.

Seguidamente estudaránse os esforzos principais aos que está sometido o recipiente obxecto de deseño.

Os resultados presentaranse en conxunto no apartado 7.7.6. do presente anexo II.

#### 7.7.1. Cálculo da carga debida ao peso do recipiente baleiro

A ecuación II.76 mostra os parámetros necesarios para a súa obtención (1).

$$W_v = C_w \pi \rho_m D_m g (H_v + 0,8 D_m) t \quad (\text{II.76})$$

Onde,  $W_v$ : peso baleiro (N)

$\rho_m$ : densidade do aceiro ( $\text{kg/m}^3$ )

$D_m$ : diámetro medio (m) calculado como  $D_m = D_i + t$

$C_w$ : coeficiente dependente da forma (valor de 1,15 para columnas de destilación)

$H_v$ : altura da columna de destilación (m)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

t: espesor da columna de destilación (m)

### 7.7.2. Cálculo da carga debida ao peso do illante

O procedemento será obter o volume mediante a ecuación II.77 e posteriormente o peso do illante calcularíase empregando a ecuación II.78.

$$V_{illante} = \frac{\pi}{4} H_v (D_0^2 - D_i^2) \quad (II.77)$$

Sendo,  $V_{illante}$ : volumen do material illante ( $m^3$ )

$$W_{illante} = V_{illante} * \rho_{illante} * g \quad (II.78)$$

Onde,  $W_{illante}$ : peso do illante (N)

$\rho_{illante}$ : densidade da lá de fibra mineral ( $kg/m^3$ )

O valor resultante duplícase para considerar os accesorios internos (1)

### 7.7.3. Cálculo da carga debida ao peso do líquido no interior da T-301

Empregaríase a ecuación II.79, resultante da II.78 pero aplicada ao líquido e referenciada acorde ao diámetro interno da torre T-301. Para este cálculo, non se consideran os pratos e estímase que toda a columna de destilación está chea de líquido.

$$W_l = V_l * \rho_l * g = g \frac{\pi}{4} H_v D_i^2 \rho_l \quad (II.79)$$

Sendo,  $W_l$ : peso do líquido (N)

$V_l$ : volume de líquido ( $m^3$ )

$\rho_l$ : densidade do líquido ( $kg/m^3$ )

### 7.7.4. Cálculo da carga debida ao peso dos pratos que compoñen a torre T-301

Segundo G. Towler e R. Sinnott, o peso dos pratos para aceiro ao carbono pódese estimar mediante a ecuación II.80

$$W_p = 1,2\pi \frac{D_i^2}{4} \quad (II.80)$$

Onde,  $W_p$ : peso dos pratos (kN)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 7.7.5. Cargas debidas á acción do vento

Tense en conta unha velocidade do vento de 160 km/h para cubrir rachas ocasionais que poidan poñer en perigo a integridade da estrutura. Este valor enténdese suficiente dada a situación da planta, na provincia de Huelva.

A través da ecuación II.81, calcularíase a presión dinámica do vento, para posteriormente facer uso da ecuación II.82 e obter a carga do mesmo por unidade lineal.

Coa ecuación II.83 obtense o momento flector da columna (1).

$$P_w = 0,05u_w^2 \quad (\text{II.81})$$

Sendo,  $P_w$ : presión dinámica do vento ( $\text{N/m}^2$ )

$u_w$ : velocidade do vento (km/h)

$$W = P_w D_{eff} \quad (\text{II.82})$$

Onde,  $W$ : carga do vento ( $\text{N/m}$ )

$D_{eff}$ : diámetro efectivo (m) calculado como  $D_{eff} = D_i + 2t$

$$M_x = \frac{WH_v^2}{2} \quad (\text{II.83})$$

Sendo,  $M_x$ : momento flector ( $\text{N}\cdot\text{m}$ )

### 7.7.6. Resultados dos cálculos de pesos e cargas por vento

Na Táboa II.42 móstranse os resultados correspondentes dos apartados 7.7.1. a 7.7.5. incluídos do presente anexo II.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.42 Resultados dos apartados 7.7.1 a 7.7.5. Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$D_m$ (m)	6,038
$W_v$ (kN)	1651,73
$V_{illante}$ (m <sup>3</sup> )	7,85
$W_{illante}$ (kN)	15,41
$W_l$ (kN)	4995,18
$W_p$ (kN)	1017,88
$W_{total}$ (kN)	7680,20
$u_w$ (km/h)	160
$P_w$ (N/m)	1280
$D_{eff}$ (m)	6,115
$W$ (N/m)	7827,2
$M_x$ (kN*m)	1731,03

### 7.8. Análise de esforzos. Esforzos primarios e principais

Seguindo o código ASME BPV Sección VIII div.1 e a metodoloxía proposta por G. Towler e R. Sinnott, nas ecuacións II.84, II.85, II.86, II.87, II.88, II.89 e II.90 (1), expóñense os esforzos primarios e principais aos que está sometida a torre T-301.

$$\sigma_h = \frac{PD_i}{2t} \quad (\text{II.84})$$

Sendo,  $\sigma_h$ : tensión lonxitudinal (N/mm<sup>2</sup>)

$$\sigma_L = \frac{PD_i}{4t} \quad (\text{II.85})$$

Onde,  $\sigma_L$ : tensión circunferencial (N/mm<sup>2</sup>)

$$\sigma_w = \frac{W_v}{\pi(D_i + t)t} \quad (\text{II.86})$$

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Sendo,  $\sigma_w$ : tensión debida ao peso morto ( $\text{N/mm}^2$ ). Positivo/Negativo en función de se é tracción/compresión.

$W_v$ : peso total do recipiente, co líquido, pratos e illante (N)

$$\sigma_b = \pm \frac{M}{I_v} \left( \frac{D_i}{2} + t \right) \quad (\text{II.87})$$

Onde,  $\sigma_b$ : tensión por flexión ( $\text{N/mm}^2$ )

$I_v$ : momento de inercia ( $\text{mm}^4$ ). Ver ecuación II.88

$$I_v = \frac{\pi}{64} (D_o^4 - D_i^4) \quad (\text{II.88})$$

Sendo,  $I_v$ : momento de inercia ( $\text{mm}^4$ )

$$\sigma_z = \sigma_L + \sigma_w \pm \sigma_b \quad (\text{II.89})$$

Onde,  $\sigma_z$ : tensión lonxitudinal resultante ( $\text{N/mm}^2$ )

Por último debe comprobarse que se cómpra a inecuación II.90, para garantir que non se supera a tensión crítica de pandeo (parte dereita da inecuación).

$$\sigma_w + \sigma_b \leq \sigma_c = 2 * 10^4 \left( \frac{t}{D_o} \right) \quad (\text{II.90})$$

Sendo,  $\sigma_c$ : tensión crítica de pandeo ( $\text{N/mm}^2$ )

Na Táboa II.43 móstranse os resultados obtidos para o cálculo de esforzos da T-301

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.43 Resultado do cálculo de esforzos da T-301. Fonte: Elaboración propia e (7)

Parámetro	Valor
$\sigma_h$ (N/mm <sup>2</sup> )	7,997
$\sigma_L$ (N/mm <sup>2</sup> )	3,999
$\sigma_w$ (N/mm <sup>2</sup> )	10,65
$I_v$ (mm <sup>4</sup> )	3,285*10 <sup>12</sup>
$\sigma_b$ (N/mm <sup>2</sup> )	1,601
$\sigma_1$ (N/mm <sup>2</sup> )	7,997
$\sigma_{z,contravento}$ (N/mm <sup>2</sup> )	5,060
$\sigma_{z,favorvento}$ (N/mm <sup>2</sup> )	-8,260
$\sigma_w + \sigma_b$ (N/mm <sup>2</sup> )	12,26
$\sigma_c$ (N/mm <sup>2</sup> )	125,08

O deseño adáptase ao que require a metodoloxía proposta pola bibliografía, ao terse cumprido a inecuación II.90 (1).

### 7.9. Deseño do soporte tipo saia

Os soportes dispoñíbeis poden ser tipo cadeira ou saia. O primeiro deles emprégase para recipientes horizontais, mentres que o último emprégase para recipientes altos e dispostos de xeito vertical, como é o caso da torre T-301 (1).

Na Figura II.28 móstranse as tres configuracións de unión soldada máis comúns para os soportes tipo saia.

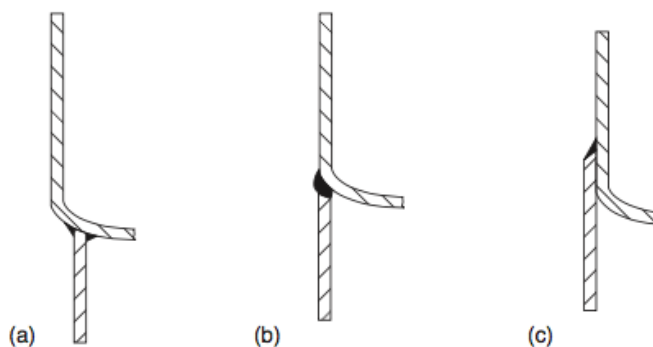


Figura II.28. Tipos de soldadura nos soportes tipo saia. Fonte: (1)

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Trátase dun procedemento iterativo, no que se require supoñer o espesor do soporte,  $t_{sk}$ . Nas ecuacións II.91 e II.92, móstranse os procedementos para calcular as tensións por pandeo e por peso morto, respectivamente.

$$\sigma_{bs} = \frac{4M_x}{\pi(D_i + t_{sk})t_{sk}D_i} \quad (\text{II.91})$$

Sendo,  $\sigma_{bs}$ : tensión debida á flexión (N/mm<sup>2</sup>)

$t_{sk}$ : espesor do soporte (mm)

$$\sigma_{ws} = \frac{W_v}{\pi(D_i + t_{sk})t_{sk}} \quad (\text{II.92})$$

Defínense tamén os esforzos de tensión e compresión nas ecuacións II.93 e II.94 (1).

$$\sigma_s(\text{tracción}) = \sigma_{bs} - \sigma_{ws} \quad (\text{II.93})$$

Onde,  $\sigma_s(\text{tracción})$ : esforzo debido á tracción (N/mm<sup>2</sup>)

$$\sigma_s(\text{compresión}) = \sigma_{bs} + \sigma_{ws} \quad (\text{II.94})$$

Estes esforzos deben superar o test de deseño proposto na bibliografía de G. Towler e R. Sinnott e representado nas inecuacións II.95 e II.96 (1).

$$\sigma_s(\text{tracción}) \leq S_s E \text{sen} \theta_s \quad (\text{II.95})$$

Sendo,  $S_s$ : esforzo máximo admisible do aceiro (N/mm<sup>2</sup>)

E: eficiencia da soldadura

$\theta_s$ : ángulo do soporte da saia, normalmente 80-90°

$$\sigma_s(\text{compresión}) < 0,125 E_y \left( \frac{t_{sk}}{D_i} \right) \text{sen} \theta_s \quad (\text{II.96})$$

Onde,  $E_y$ : módulo de elasticidade do aceiro (N/mm<sup>2</sup>)

O procedemento radica en buscar un espesor de soporte que satisfaga as inecuacións II.95 e II.96. Os resultados obtidos logro do proceso iterativo móstranse na Táboa II. 44

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa II.44 Parámetros de deseño do soporte tipo saia. Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Valor
$E_y$ (N/mm <sup>2</sup> )	195122,84
S (N/mm <sup>2</sup> )	88,94
$\theta_s$ (°)	90
E	1
$M_x$ (N/mm)	1731029791
$t_{sk}$ (mm)	12
$\sigma_{bs}$ (N/mm <sup>2</sup> )	4,97
$\sigma_{ws}$ (N/mm <sup>2</sup> )	33,46
$\sigma_s$ (tracción) (N/mm <sup>2</sup> )	28,50
$\sigma_s$ (compresión) (N/mm <sup>2</sup> )	38,43
<i>test</i> $\sigma_s$ (tracción) (N/mm <sup>2</sup> )	88,94
<i>test</i> $\sigma_s$ (compresión) (N/mm <sup>2</sup> )	48,17

Os datos obtidos posúen coherencia e tanto os esforzos de tracción e compresión obtidos son satisfactorios, ao superaren ambos as esixencias impostas polas inecuacións II.95 e II.96

## 8. BIBLIOGRAFÍA

1. SINNOT R. e G. TOWLER. *Chemical Engineering Design*. Burlington : Elsevier, 2008. ISBN:978-0-7506-8423-1
2. BURGUET, M. et al. Vapor-Liquid Equilibria of Cyclohexanone + Cyclohexanol and Cyclohexanone + 2-Methylcyclohexanona Systems at 4.00 and 26.66 kPa [en liña]. *Journal of Chemical Engineering Data*. 1993, 38, 328-331 [Consultado en Abril 2020].  
Dispoñible en: <https://doi.org/10.1021/jc00010a037>
3. WANKAT, P.C. *Separation Process Engineering*. Massachusetts: Prentice Hall, 2012. ISBN: 978-0-13-138227-5
4. DOUGLAS, J.M. *Conceptual Design of Chemical Processes*. McGraw-Hill, 1988. ISBN: 0-07-017762-7
5. ASHBY, M.F. *Materials Selection in Mechanical Design*. 4ª ed. Oxford: Elsevier, 2011. ISBN: 978-1-85617-663-7
6. JUENGER. *Torispherical heads* [en liña]. [Consultado en Abril 2020]. Dispoñible en: <https://www.juenger.com/en/kloeppeboeden/>
7. INCROPERA, F.P. *Introductio to Heat Transfer*. John Wiley & Sons Inc., 2011. ISBN: 978-0470-50196-2

**PARTE III:**  
**DIMENSIONAMIENTO**  
**BÁSICO DE EQUIPOS**

Índice Anexo II. Cálculos Xustificativos. Parte III

1. Dimensionamento básico.....	3
1.1 Bombas .....	3
1.2 Compresores .....	4
1.3 Intercambiadores de calor.....	5
1.4 Reactor R-301 .....	6
1.5 Recipientes a presión.....	9
1.6 Conducións .....	12
2. Bibliografía.....	17

## 1. Dimensionamento básico

O presente Anexo II. Parte III, ten como finalidade calcular a razón segundo a cal se poden obter os prezos para os equipos na industria, empregando o método factorial como se pode visualizar no Documento V. Orzamento. O custo de cada equipo atópase en función dun parámetro característico que define a súa capacidade. A excepción dos equipos deseñados no Anexo II. Cálculos Xustificativos, realizarase un dimensionamento básico, coa axuda dos resultados presentados no Anexo I. Balances de Materia e Enerxía, dos equipos principais do proceso incluíndo as conducións para obter os parámetros necesarios en cada un deles.

### 1.1 Bombas

No caso das bombas, o parámetro desexado é a potencia requirida que se transmite ó fluído na corrente de saída. O balance de enerxía mecánica para fluídos incompresibles atópase na ecuación III.1 (1).

$$\left( \frac{u_1^2}{2\alpha_1} - \frac{u_2^2}{2\alpha_2} \right) + g \cdot (z_1 - z_2) + \frac{P_1 - P_2}{\rho} + W - \Sigma f = 0 \quad \left[ \frac{kJ}{kg} \right] \quad (III.1)$$

Representando os subíndices ,1 e 2 , as correntes de entrada e saída, respectivamente.

O primeiro termo define a variación da enerxía cinética por medio da velocidade,  $u$  (m/s). O segundo é a variación da enerxía potencial en función da diferenza de alturas entre a entrada e a saída da bomba,  $z$  (m). A diferenza de presións dividida pola densidade do fluído,  $\rho$ , é a enerxía de fluxo da corrente. Por outra banda,  $W$  representa o traballo mecánico (kJ / kg) transmitido pola bomba e o último termo é a suma de todas as perdas de enerxías ó longo da condución debidas á fricción pola mesma.

Ó tratarse de fluídos incompresibles, os termos cinético e potencial pódense desprezar. Por outra banda, as perdas por fricción da condución serán asumidas na eficiencia da bomba. Tal e como se introduciu no Anexo II. Balances de Materia e Enerxía, debido á 2ª Lei da Termodinámica aplícanse as eficacias isentrópicas, por tanto, establécese un valor da mesma para as bombas que engloben as perdas por fricción, ecuación III.4.

Finalmente, a expresión empregada para calcular a potencia específica requirida nas bombas será a ecuación III.2 (2).

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

$$\frac{P_1 - P_2}{\rho} = W_s \left[ \frac{kJ}{kg} \right] \quad (III.2)$$

Sendo a densidade do fluído constante se é unha corrente líquida.

Para obter a enerxía en kW , emprégase a ecuación III.3.

$$W \cdot \dot{m} = \dot{W} \left[ \frac{kJ}{s} \right] \quad (III.3)$$

$$\eta_b = \frac{W_s}{W_a} = \frac{\text{traballo isentrópico}}{\text{traballo real}} \quad (III.4)$$

Táboa III.1. Cálculo da potencia das bombas. Fonte: Elaboración propia

	<b>P-101</b>	<b>P-302</b>	<b>P-303</b>	<b>P-304</b>
<b>P<sub>1</sub> (kPa)</b>	100,00	26,66	70,00	50,66
<b>P<sub>2</sub> (kPa)</b>	300,00	70,00	101,32	202,6
<b>ρ (kg /m<sup>3</sup>)</b>	1078	856,3	856,3	851,35
<b>W<sub>a</sub> (kJ /kg)</b>	0,26	0,07	0,05	0,18
<b>W<sub>s</sub> (kJ /kg)</b>	0,18	0,05	0,04	0,25
<b>η (%)</b>	70	70	70	70
<b>ṁ ( kg/ s)</b>	5,07	5,28	5,28	0,33
<b>Ẇ<sub>a</sub> (kW)</b>	1,34	0,38	0,28	0,08

## 1.2 Compresores

Para obter o traballo reversible entregado por un compresor á unha corrente gasosa emprégase a ecuación III.5 (2).

$$W_s = \frac{k R (T_2 - T_1)}{k - 1} = \frac{k R T_1}{k - 1} \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1 \right] \left[ \frac{kJ}{kg} \right] \quad (III.5)$$

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Onde ,

$$R = 8,314 \text{ kJ / kmol K}$$

$k = C_p/C_v$ , obtido como valor medio das correntes de entrada e saída en Hysys.

De novo calcúlase o traballo real en función da eficacia , mediante a ecuación III.6.

$$\eta_c = \frac{W_s}{W_a} = \frac{\text{traballo isentrópico}}{\text{traballo real}} \quad (\text{III.6})$$

E finalmente, coa ecuación 3 obtense a enerxía en kW .

Táboa III.2. Cálculo da potencia dos compresores. Fonte: Elaboración propia

	<b>K-201</b>	<b>K-301</b>
<b>P<sub>1</sub> (kPa)</b>	229	180
<b>P<sub>2</sub>(kPa)</b>	300	300
<b>k</b>	1,4045	1,4035
<b>T<sub>1</sub> (K)</b>	451,65	450,15
<b>T<sub>2</sub> (K)</b>	510,55	545,95
<b>W<sub>a</sub> (kJ /kg)</b>	1279,43	2941,85
<b>W<sub>s</sub> (kJ /kg)</b>	895,60	2059,30
<b>η (%)</b>	70	70
<b><math>\dot{m}</math> ( kg/ s)</b>	0,11	0,05
<b><math>\dot{W}_a</math> (kW)</b>	145	141,39

### 1.3 Intercambiadores de calor

Para os intercambiadores, o parámetro que define o custo é a área de intercambio de calor que intervén na ecuación III.7.

$$\dot{Q}_{intercambiado} = U A \Delta T_m \quad (\text{III.7})$$

Onde o fluxo de calor intercambiado en cada equipo está recollido no Anexo II. Balances de Materia e Enerxía no apartado 1.2.5 Intercambiadores de calor. O coeficiente global de transmisión de calor, U, atópanse tabuladas para distintos tipos de fluídos quentes e fríos e tómanse valores medios arbitrarios dentro do rango (3).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

A diferenza de temperaturas media  $\Delta T_m$  obtense na ecuación III.8 :

$$\Delta T_m = Ft \Delta T_{ml} \quad (III.8)$$

Onde Ft é o factor de corrección <0,75, tómase un valor de 0,8 arbitrario para efectos de cálculo do dimensionamento básico. A diferenza de temperaturas media logarítmica,  $\Delta T_{ml}$ , á súa vez calcúlase na ecuación III.9.

$$\Delta T_{tm} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \frac{(T_1 - t_2)}{(T_2 - t_1)}} \quad (III.9)$$

Onde ,

$T_1$  é a temperatura de entrada do fluído quente (°C);

$T_2$  é a temperatura de saída do fluído quente (°C);

$t_1$  é a temperatura de entrada do fluído frío (°C);

$t_2$  é a temperatura de saída do fluído frío (°C);

Estas temperaturas atópanse nos respectivos balances de enerxía a cada intercambiador no Anexo II. Balances de Materia e Enerxía no apartado 1.2.5 Intercambiadores de calor.

Táboa III.3. Cálculo da área nos intercambiadores de calor. Fonte: Elaboración propia

	E-201	E-202	E-301	E-302	E-303	E-304	E-305
$\dot{Q}_{intercambiado}(\text{kW})$	5111,11	2141,67	5411,51	2535,97	31111,11	30833,33	879,93
$U (\text{W/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C})$	750	600	750	600	600	750	300
$A (\text{m}^2)$	93,4	28,1	95,8	19,0	664,76	287,14	48,0

### 1.4 Reactor R-301

Seguindo o procedemento para o deseño do reactor R-201 no Anexo II. Cálculos Xustificativos, obtense os parámetros necesarios para determinar o prezo do reactor. Neste caso, é necesario obter o volume de cada tubo, a masa de catalizador empregada e as dimensións do recipiente.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

A diferenza co deseño do reactor R-201, non se dispón de información cinética como por exemplo a lei de velocidade que rexe a reacción. Nesta ocasión, o dato de partido será o tempo de residencia  $\tau = 7\text{s}$  (4).

A definición do tempo de residencia amósase na ecuación III.10:

$$\tau = \frac{V_{reactor}}{v} \quad (III.10)$$

Onde se coñece o fluxo volumétrico ,  $v$  ( $\text{m}^3/\text{h}$ ), e por tanto se obtén o volume de reactor necesario para que suceda a reacción na Táboa III.4.

Táboa III.4. Cálculo volume de reactor. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\tau$ (s)	7
$v$ ( $\text{m}^3/\text{h}$ )	4131
$V_{reactor}$ ( $\text{m}^3$ )	8

A continuación, establécense as dimensións dos tubos para así coñecer o volume interior en cada tubo e posteriormente obter o número de tubos necesarios. O diámetro interior e exterior dos tubos son 46,4 e 50,8 mm respectivamente. A altura fíxase en 4,88 m.

$$N_{tubos} = \frac{V_{reactor}}{V_{interior\ tubos}} \quad (III.11)$$

Así obtense un volume no interior de cada tubo de  $8,23\text{E}-03\ \text{m}^3$  e un total de 962 tubos. Para o cálculo do diámetro de carcasa procédese de xeito idéntico ó deseño do reactor R-201, obtendo os seguintes resultados.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa III.5. Diámetro de carcasa. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor	Magnitude	Valor
$p_t=1,25 d_o$ (m)	0,065	$N_{\text{tubos}}$	962
$k_1$	0,215	$D_b$ (m)	2,29
$n_1$	2,207		

O diámetro é estandarizado pola normativa TEMA a 2,54 m e coa axuda da Figura III.1, o espesor mínimo será 10 mm (3).

Vessel diameter (m)	Minimum thickness (mm)
1	5
1 to 2	7
2 to 2.5	9
2.5 to 3.0	10
3.0 to 3.5	12

Figura III.1.Espesores mínimos. Fonte: (3)

Por outra parte, elixense cabezais toriesféricos cunha relación diámetro do recipiente: altura do cabezal de 1:3. Así, a altura total do recipiente determínase multiplicando por dous a altura de cada cabezal, obtendo un valor de 6,57 m.

En canto ó catalizador, emprégase un catalizador tipo ZnO cas seguintes da Táboa III.6. A densidade do leito e finalmente a masa de catalizador necesaria obtense como no reactor R-201.

Táboa III.6. Datos Catalizador. Fonte: (4)

Magnitude	Valor
E	0,4
$\rho_c$ (kg/m <sup>3</sup> )	5646
$\rho_b$ (kg/m <sup>3</sup> )	3924,2
<b>W cat (kg)</b>	<b>3,14E+04</b>

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Finalmente, a Táboa III.7 resume os aspectos máis importante no reactor R-301.

Táboa III.7. Resumo reactor R-301. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$N_{\text{tubos}}$	962
altura, h (m)	6,57
diámetro, d (m)	2,54
espesor (mm)	10
$V_{\text{tubos}}$ (m <sup>3</sup> )	6,83E-05
W cat (kg)	3,14E+04

### 1.5 Recipientes a presión

No presente proxecto hai tres recipientes de proceso sometidos a presión, TK-101, TK-102 e V-301. Este apartado pretende estimar o espesor e a masa de cada un deles, para obter a base sobre a que se sustentará o cálculo económico básico dos mesmos.

O cálculo fundamentarase no código de deseño ASME BPV Sección VIII Div.1. En canto á presión do tanque de almacenamento TK-101, a súa presión atópase dentro do límite superior da devandita Div.1, polo cal se conclúe válida para o deseño.

#### - Tanque TK-101

A xeometría deste tanque de almacenamento será esférica.

Tense en conta un tempo de residencia de cinco días para obter o volume interior necesario no tanque. Deste xeito, pódese obter o diámetro coa ecuación III.12 e posteriormente o espesor do recipiente coa ecuación III.13 (5).

$$V = \frac{\pi D^3}{6} \quad \text{(III.12)}$$

Onde, V: volume interior do tanque (m<sup>3</sup>)

D: diámetro interior do tanque (m)

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

$$t = \frac{PD}{4fj} + C \quad (III.13)$$

Onde, t: espesor do tanque

P: presión interna do tanque (N/m<sup>2</sup>)

D: diámetro interno do tanque (m)

f: tensión admisible do material (N/m<sup>2</sup>)

j: eficiencia da soldadura

C: sobreespesor por corrosión (m)

En realidade o cálculo da ecuación III.13, o espesor do tanque non sería estritamente necesario, en tanto en canto o factor necesario para calcular o custo do equipo será o volume, ao tratarse dun recipiente de grandes dimensións.

Os datos obtidos preséntanse na Táboa III.8

Táboa III.8. Deseño do tanque de almacenamento TK-101. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	14,41
$P_{\text{deseño}}$ (N/m <sup>2</sup> )	$2,2 \cdot 10^7$
f (N/m <sup>2</sup> )	$88,94 \cdot 10^6$
j	1
C (m)	0,004
$t_r$ (días)	5
$V_i$ (m <sup>3</sup> )	6486
$D_i$ (m)	23,14
t (m)	1,3

### - Tanque TK-102

Tanque de almacenamento de fenol. A súa xeometría é cilíndrica e as súas dimensións estarán baseadas na normativa API 650 para deseño de tanques de proceso (6).

O tempo de residencia para este fluído, ao tratarse dun compoñente máis pesado que o hidróxeno contido no TK-101, será de dúas semanas.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Para o cálculo dos espesores da carcasa e dos cabezais teranse en conta as ecuacións I.48 e I.49, así como a das ecuacións I.52 do anexo II. Parte II da presente memoria.

Ao tratarse dun tanque de almacenamento, a base para o cálculo do seu custo será o volume interior, sen prexuízo do resto de parámetros calculados (7).

Os resultados obtidos preséntanse na Táboa III.9

Táboa III.9. Deseño do tanque de almacenamento de fenol TK-102. Fonte: Elaboración propia e (6)

Magnitude	Valor
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1078
$P_{\text{deseño}}$ (N/m <sup>2</sup> )	111457,50
$S$ (N/m <sup>2</sup> )	88,94*10 <sup>6</sup>
$E$	1
Espesor corrosión (m)	0,004
$t_r$ (semanas)	2
$V_i$ (m <sup>3</sup> )	5691,00
$D_i$ (m)	24,38
$h$ (m)	12,19
$t$ (mm)	15,28
$D_o$ (m)	24,41
$V_o$ (m <sup>3</sup> )	5704,91
$t_{\text{cabezal}}$ (mm)	15,27

### - Recipiente de proceso V-301

O tanque de refluxo traballa cunha presión a baleiro, polo que se considera como presión de deseño a atmosférica, que sería o caso máis desfavorable.

As ecuacións son as mesmas que as empregadas no deseño do tanque TK-102, cuxos resultados se amosaron na Táboa III.9.

Ao tratarse dun recipiente de proceso, estímase como adecuado un tempo de residencia de 3h, asegurando a correcta operación da torre T-301 durante ese período no caso de que existise calquera anomalía.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

O custo deste equipo basearase no peso do mesmo, polo que se enfocará o deseño cara á consecución dos valores necesarios para poder determinar o seu valor monetario, como se mostra no Documento V: Presuposto.

Os resultados do deseño do recipiente de proceso, tanque de refluxo V-301, móstranse na Táboa III.10.

Táboa III.10. Deseño do tanque de refluxo V-301. Fonte: Elaboración propia

Magnitude	Valor
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	856,3
$P_{\text{deseño}}$ (N/m <sup>2</sup> )	101325,00
$S$ (N/m <sup>2</sup> )	88,94*10 <sup>6</sup>
$E$	1
Espesor corrosión (m)	0,004
$t_r$ (h)	3
$V_i$ (m <sup>3</sup> )	1196,87
$D_i$ (m)	11,18
$h$ (m)	12,19
$t$ (mm)	10
$D_o$ (m)	11,2
$V_o$ (m <sup>3</sup> )	1201,16
Masa equipo (kg)	40250,60

### 1.6 Conduci3ns

Neste subapartado preténdese ofrecer as dimensións características de t3dalas conduci3ns involucradas no proceso.

O deseño das conduci3ns responden ao m3todo proposto polo c3digo ASME 31.3, relativo a tuberías de proceso.

Este c3digo emprégase para obter o espesor m3nimo requirido en cada unha das conduci3ns, coa simultaneidade de normalizar os diámetros, proposto pola monografía de Robert L. Mott (1), e que permaneza a velocidade dentro dun determinado rango de valores, así como a caída de presi3n.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Para ter un diámetro de referencia, emprégase a expresión exposta na ecuación III.14 (7).

$$d_{i,\acute{o}ptimo} = \left(\frac{G}{\rho}\right)^{0,5} \quad \text{(III.14)}$$

Onde,  $d_{i,\acute{o}ptimo}$ : diámetro óptimo (m)

G: fluxo máxico (kg/s)

$\rho$ : densidade (kg/m<sup>3</sup>)

O resultado arrochado pola ecuación III.14 é un resultado aproximado do diámetro óptimo que proporcionaría o menor custo posible. Intentarase manter o diámetro estandarizado máis próximo posible a este valor, mantendo os valores mostrados na Figura III.3 entre límites aceptables.

A continuación, na ecuación III.15, obtense empregando o código ASME B31.3 o espesor que deberá ter a conducción como mínimo. Os valores de  $\gamma$  obtéñense do devandito código mencionado, e ilústranse na Figura III.2 (7).

$$t = \frac{Pd}{2(SE + P\gamma)} + C \quad \text{(III.15)}$$

Sendo, P: presión de deseño (N/mm<sup>2</sup>)

d: diámetro interior (mm)

S: esforzo admisible do material (N/mm<sup>2</sup>).  $S_{aceiro}$ : 88,94 N/mm<sup>2</sup> (7)

$\gamma$ : coeficiente de temperatura

C: espesor por corrosión (mm)

Materiales	Temperatura, °C (°F)					
	≤ 482 (900 y menores)	510 (950)	538 (1.000)	566 (1.050)	593 (1.100)	≤ 621 (1.150 y mayores)
Aceros Ferríticos	0,4	0,5	0,7	0,7	0,7	0,7
Aceros Austeníticos	0,4	0,4	0,4	0,4	0,5	0,7
Otros metales ductiles	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
Hierro Fundido	0,0	...	...	...	...	...

Figura III.2. Valores de  $\gamma$  para o cálculo do espesor mínimo requirido. Fonte: (8)

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Ao tratarse no proceso temperaturas inferiores a 482 °C, o valor de  $\gamma$  será o correspondente ao da primeira columna da Figura III.2

O descrito ata o momento permite obter un diámetro óptimo e un espesor mínimo requirido (terase en conta que o valor do espesor a maiores debido á corrosión será asumido de 2 mm). Con estes datos, e seguindo a bibliografía de Mecánica de fluídos proposta por Robert Mott, estandarízanse os diámetros (1).

Debe comprobarse a caída de presión, exposta pola ecuación III.16 (7), empregando a correlación de Swamee e Jain para obter o factor de fricción (ecuación III.17) (1).

$$\frac{\Delta P}{L} = 8f \frac{\rho u^2}{2D} \quad (\text{III.16})$$

Sendo,  $\frac{\Delta P}{L}$ : caída de presión por ud. de lonxitude (Pa/m)

f: factor de fricción obtido mediante a ecuación III.17

$\rho$ : densidade (kg/m<sup>3</sup>)

u: velocidade do fluído (m/s)

D: diámetro interno da conducción (m)

$$f = \frac{0,25}{\left( \log \left( \frac{1}{\frac{3,7D}{\varepsilon}} + \frac{5,74}{Re^{0,9}} \right) \right)^2} \quad (\text{III.17})$$

Onde, f: factor de fricción

D: diámetro interno da conducción (m)

$\varepsilon$ : rugosidade absoluta (m). Rugosidade absoluta aceiro comercial:  $4,6 \cdot 10^{-5}$  m (7).

Re: Reynolds

Nas Figura III.3 móstranse os valores máis habituais nos que soe encontrarse a velocidade para un fluído que circula nunha conducción e tamén o valor que adoita ter a caída de presión a través da mesma, en función do tipo de fluído que se trate (7).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

	Velocity m/s	$\Delta P$ kPa/m
Liquids, pumped (not viscous)	1–3	0.5
Liquids, gravity flow	—	0.05
Gases and vapors	15–30	0.02% of line pressure
High-pressure steam, >8 bar	30–60	—

Figura III.3. Valores de velocidade e caída de presión en función do fluído pola conducción. Fonte: (7)

O procedemento descrito neste subapartado proporciona os resultados ilustrados na Táboa III.11.

A conclusión principal que se desprende dos datos da Táboa III.11, é que a selección do diámetro non é unha cuestión que deba pasar por desapercibida, posto que se atopan moitas dificultades para cumprir co rango de valores aportados pola Figura III.3.

Así, cando se decide diminuír o valor do diámetro interno para aumentar a velocidade e que teña un valor acorde ao tipo de fluído que circula pola conducción, a caída de presión aumenta co cadrado da velocidade, mentres que diminuiría sensiblemente co diámetro, posto que é inversamente proporcional ao mesmo. A efectos prácticos, se aumenta o diámetro, diminúe a caída de presión, pero tamén a velocidade e viceversa, polo que atopar un equilibrio entre ambos non sempre é sinxelo.

Os valores presentados na Táboa III.11 teñen coherencia dende ámbolos dous puntos de vista, aínda que algúns valores difiren moi lixeiramente dos habituais, tanto de velocidade como de caída de presión.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa III.11. Dimensión das conducións. Fonte: Elaboración propia e (1) (7) (8)

Corrente	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	$P_{des}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$D_o$ (mm)	$D_i$ (mm)	$t$ (mm)	SCH	$u$ (m/s)	$\Delta P/L$ (Pa/m)
1	14,41	22,00	-	-	-	-	-	-
2	0,24	0,33	273,10	254,50	9,30	40	17,96	20,6
3	0,18	0,33	406,40	381,00	12,70	40	18,17	11,0
4	1078,00	0,11	88,9	77,90	5,50	40	0,99	412,6
5	1078,00	0,33	73	62,70	5,15	40	1,52	380,7
6	3,11	0,33	508,00	477,90	15,05	40	9,76	56,5
7	1,80	0,33	508,00	477,90	15,05	40	16,86	51,7
8	3,26	0,27	452,70	428,70	12,00	40	11,57	47,5
9	782,10	0,25	114,30	102,30	6,00	40	1,06	513,0
10	0,12	0,25	273,10	254,50	9,30	40	18,13	13,4
11	0,14	0,33	273,10	254,50	9,30	40	15,64	11,7
12	790,70	0,20	101,60	90,10	5,75	40	0,82	373,3
13	4,35	0,22	219,10	202,70	8,20	40	23,69	50,8
14	2,22	0,20	355,60	333,40	11,10	40	17,21	97,9
15	782,50	0,20	73,00	62,70	5,15	40	1,36	137,4
16	0,1	0,20	219,10	202,70	8,20	40	15,34	11,0
17	0,13	0,33	219,10	202,70	8,20	40	11,18	8,3
18	0,14	0,33	273,10	254,50	9,30	40	22,74	22,6
19	782,30	0,20	114,30	102,30	6,00	40	1,23	337,2
20	855,70	0,03	114,30	102,30	6,00	40	1,23	337,2
21	856,30	0,03	88,90	77,90	5,50	40	1,30	447,6
22	856,30	0,08	88,90	77,90	5,50	40	1,30	447,6
23	856,30	0,11	88,90	77,90	5,50	40	1,30	447,6
24	941,2	0,11	88,90	77,90	5,50	40	1,18	423,2
25	851,30	0,06	73,00	62,70	5,15	40	1,27	480,5
26	851,30	0,22	73,00	62,70	5,15	40	1,27	480,5

## 2. BIBLIOGRAFÍA

1. MOTT, R.L. *Mecánica de Fluidos*. 6ªed. México: Pearson Educación, 2006. ISBN: 970-26-0805-8
2. ÇENGEL, Y.A. e M. BOLES. *Thermodynamics: an engineering approach*. 7ªed. Estados Unidos: McGraw-Hill,2011. ISBN: 978-0-07-352932-5.
3. SINNOTT, R. K. *Coulson & Richardson's: Chemical Engineering Design*. 4ª ed. Vol.6. Oxford: Elsevier, 2005. ISBN: 0-7506-6538-6
4. DIMIA, A.C. e C.S. BILDEA. *Chemical Process Design: Computer-Aided Case Studies*. Alemaña: Wiley-VCH, 2008. ISBN: 978-3-527-31403-4
5. CHEMICAL ENGINEERING WORLD. *Spherical Storage Tank Design* [en liña]. [Consultado Maio 2020]. Disponible en: <https://chemicalengineeringworld.com/spherical-storage-tank-design/>
- 6.ITSTANK. *Typical API 650 Tank Sizes* [en liña]. [Consultado Maio 2020]. Disponible en: <https://www.itstank.com/tank-specs/typical-api-650-tank-sizes/>
7. SINNOTT, R. e G. TOWLER. *Chemical Engineerign Design*. Burlington: Elsevier, 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1
8. THE AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS. *Tuberías de proceso*. ASME B31.3. New York: ASME, 2011.

ANEXO III:  
CÓDIGOS DE  
MATLAB  
PARA O  
Reactor R-201

## 1 Función

A continuación preséntase o código da función no programa co que se forma o sistema de ecuacións diferenciais que rexe un reactor isotermo. Defínense os datos cinéticos e termodinámicos que se empregan no cálculo das mesmas. As condicións iniciais son os caudais molares que compoñen a corrente de reacción.

```
% F(1)=Ffenol ; F(2)=FH2; F(3)=Fona; F(4)=Fol;
% xdot(1)=d(Ffenol)/dW, xdot(2)=d(FH2)/dW , xdot(3)=d(Fona)/dW;
% xdot(4)=d(Fol)/dW
function xdot=isotermo(W,F)
%Cálculo constantes cinéticas reacción de%
%hidroxenación de fenol para ciclohexanona%
K1=0.877; %kmol/ (kg cat h)%
kA1=9.3; %(atm)^-1%
kB1=1.1; %(atm)^-1%
kC1=19; %(atm)^-1%
kD1=8; %(atm)^-1%
%Sendo A=fenol, B=hidróxeno, C=ciclohexanona, D=ciclohexanol%

%Cálculo constantes cinéticas reacción de%
%hidroxenación de ciclohexanona para ciclohexanol%
K2=0.0287; %kmol/ (kg cat h)%
kA2=15; %(atm)^-1%
kB2=0.91; %(atm)^-1%
kC2=7.7; %(atm)^-1%
kD2=2.6; %(atm)^-1%
%Sendo A=fenol, B=hidróxeno, C=ciclohexanona, D=ciclohexanol%

%Cálculo presións parciais%
P=3*0.986923; %Presión de operación en atm%
FA0=194.003; %Fluxo inicial de fenol%
y1=1-(F(1)/FA0); %Conversión do 100% %
y2=F(4)/FA0; % Conversión para ciclohexanol%
G= 3.5; %Relación molar H2:composto orgánico%

%Cálculo das presións parciais%
PA=(1-y1)/(1+G-2*y1-y2)*P;
PB=(G-2*y1-y2)/(1+G-2*y1-y2)*P;
PC=(y1-y2)/(1+G-2*y1-y2)*P;
PD=y2/(1+G-2*y1-y2)*P;
%Expresións cinéticas para o sistema de reacción%
r1=-
K1*((kA1*PA*(kB1*PB)^2)/(1+kA1*PA+kB1*PB+kC1*PC+kD1*PD)^3);%hidroxenac
ión de fenol%
r2=-
K2*((kC2*PC*(kB2*PB))/(1+kA2*PA+kB2*PB+kC2*PC+kD2*PD)^2);%hidroxenació
n de ciclohexanona%
%Sendo A=fenol, B=hidróxeno, C=ciclohexanona, D=ciclohexanol%

%Evolución dos fluxos molares en función da masa de catalizador (W)%
%Sistemas de ecuacións diferenciais a resolver%
xdot(1,:)=r1;
xdot(2,:)=2*r1+r2;
xdot(3,:)= -r1+r2;
xdot(4,:)= -r2;
end
```

## 2 Programa

O seguinte código que implementado en MatLab resolve o sistema diferencial presentado na función anterior. Co mesmo código, represéntase graficamente a evolución dos caudais molares durante o transcurso da reacción en función da masa de catalizador, que é o obxectivo a determinar. Finalmente, os datos numéricos son exportados a un ficheiro Excel para máis facilidade á hora de tratar os resultados.

```
%Elimínanse todos os comandos e resultados empregados anteriormente na
%mesma sesión%
clear
clc
%Créase o vector de condicións iniciais%
%que son os caudais molares iniciais%
ic=[194.003;673.0742574;0;0]; Wspan=[0 250000];
%Función propia de MatLab que resolve sistemas de%
%ecuacións diferenciais polo método de Runge-Kutta5
[W,F]=ode15s('isotermo',Wspan,ic);
w=[W,F];
Fol=F(:, 4); Fona=F(:, 3); FH2=F(:, 2); Ffenol=F(:, 1);
%O comando hold on emprégase para representar as 4 funcións%
%que forman o sistema á mesma vez na mesma figura gráfica%
hold on
plot(W,Ffenol,'g');
plot(W,FH2,'b');
plot(W,Fona,'r');
plot(W,Fol,'c');
%Insértanse títulos no gráfico, ambos eixos quedan definidos nun
intervalo e
%engádese unha lenda%
title('Concentracións R-301');xlabel('Masa cat en kg'); ylabel('Fluxo
molar en kmol/h'); axis([0 75000 0 160]);
legend('Fenol','H2','ciclohexanona','ciclohexanol');hold off;
w=[W,F];
%Expórtanse os datos a un ficheiro Excel%
filename = 'isotermoB.xlsx';
xlswrite(filename,w,'resultados','a');
```

**ANEXO V:  
ESTUDO DE  
VIABILIDADE  
ECONÓMICA**

## ÍNDICE

1. OBXECTIVO E PROCEDEMENTO .....	3
2. VAN, TIR E PAYBACK .....	3
3. FINANCIACIÓN .....	5
3.1. DEVOLUCIÓN DO PRÉSTAMO .....	5
4. CÁLCULO DAS PARTIDAS .....	7
4.1. Custo das materias primas .....	7
4.2. Ingresos pola venda de produtos .....	7
4.3. Custo dos catalizadores .....	7
4.4. Custo das utilidades .....	8
4.5. Custo de man de obra directa .....	8
4.6. Custos de explotación e xestión restantes .....	9
5. CUSTOS DE OPERACIÓN TOTAIS .....	10
6. AMORTIZACIÓN DOS EQUIPOS .....	11
7. CÁLCULO DO FLUXO DE CAIXA .....	12
8. RESULTADOS DO VAN, TIR E PAYBACK .....	14
8.1. Análise de sensibilidade dos indicadores económicos .....	15
9. CONCLUSIÓNS .....	16
10. BIBLIOGRAFÍA .....	17

## 1. OBXECTIVO E PROCEDEMENTO

A finalidade do presente estudo de viabilidade económica é determinar a rendibilidade do proxecto desenvolto ao longo do deseño básico da planta de produción de ciclohexanona a partir de fenol. Isto é, ver se existe xustificación económica para a súa implementación ou se por contra a súa construción non estaría xustificada.

Para determinalo con éxito, partírase do Documento V. Presuposto, cuxa cantidade final será a que determine o capital inmovilizado.

Terase en conta unha partida de costes fixos nos que se incorre con carácter previo ao inicio da operación da planta, como poden ser gastos de organización, permisos varios e diversas probas de posta en marcha, como o comisionado da planta.

De igual maneira obtéñense os custos de explotación e xestión, en partidas ben diferenciadas, onde entrarán conceptos como as materias primas, catalizador, utilidades, mantemento, man de obra directa e indirecta, etc.

Procederáse á estimación do préstamo solicitado e as características inherentes á súa devolución. Pese a existencia de dous modelos predominantes en Europa, o francés e o alemán, en España a mentalidade é globalmente francesa neste aspecto, caracterizado este método por ser unha anualidade constante, pero destinando unha porcentaxe elevada ao pago de intereses, mentres que a amortización da débeda quedaría relegada a uns montantes moito menores ao inicio da devolución.

Finalmente, obteranse os fluxos de caixa para concretar sen lugar a dúbidas o beneficio neto obtido pola dirección, procedendo en última instancia a obter parámetros económicos cos que avaliar o proxecto, isto é, o Valor Actual Neto (VAN), Taxa de Interese de Retorno (TIR) e prazo de devolución ou *Payback*.

## 2. VAN, TIR E PAYBACK

O Valor Actual Neto (VAN) é o sumatorio dos fluxos de caixa futuros (corrixidos pola inflación), tendo en conta un interese (1).

Na ecuación 1 móstrase o cálculo deste parámetro.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

$$VAN = -I + \sum_{n=1}^n \frac{FC_n}{(1+i)^n} \quad (1)$$

Sendo, I: inversión inicial

n: anos de vida do proxecto considerado (20 anos no actual proxecto)

i: taxa de desconto (9 % no presente TFG)

FC<sub>n</sub>: fluxo de caixa no ano n.

Un VAN>0 indicará que o proxecto é rendíbel.

A Taxa de Interese de Retorno (TIR) é outro parámetro de avaliación de proxectos. Está vinculado ao VAN, posto que arroxa o valor da taxa de desconto ou tipo de interese que se obtería igualando o VAN a cero (VAN=0).

Representa ata que interese podería aceptar unha empresa nunha determinada inversión sen incorrer en perdas (2).

A expresión que se emprega é similar a aquela presentada na ecuación 1, coa particularidade que na ecuación 2, o VAN é nulo, obtendo a taxa descrita.

$$0 = -I + \sum_{n=1}^n \frac{F_n}{(1+i)^n} \quad (2)$$

Onde, i: taxa de desconto que fai que o VAN sexa cero.

Outro dos parámetros que se analizan á hora de avaliar unha inversión nun proxecto é o *payback*, isto é, o período de devolución da débeda contraída.

A devolución da inversión lévase a cabo cando os fluxos de caixa a través dos diversos anos (fluxos de caixa acumulados) igualan á inversión inicial. Isto exprésase mediante a ecuación 3 (3).

$$I_0 = \sum_{t=1}^n FC_t \quad (3)$$

Sendo, I<sub>0</sub>: inversión inicial

FC<sub>t</sub>: fluxo de caixa no ano t

### 3. FINANCIACIÓN

Para determinar a cantidade a financiar, debe coñecerse de antemán a cantidade sobre a que se aplicará.

No Documento V. Presuposto, constan dúas partidas ben diferenciadas. Estas son: o inmovilizado e o capital circulante, debendo engadir a partida correspondente aos custos nos que se incorren previos á posta en marcha (3).

Estes custos estímense segundo a Táboa 1, tendo como base de cálculo o inmovilizado presentes no Documento V. Orzamento.

O préstamo solicítase cun 5% de interese, a vinte anos, cunha representación do 65% do capital necesario (4), entendéndose o restante 35% satisfeito por capital privado.

Táboa 1. Obtención da cantidade a solicitar en préstamo. Fonte: Elaboración propia

Concepto				Importe (€)
A. Inmovilizado				17.039.821,84
B. Custos previos				1.363.185,75
	B1. Organización, xestión e dirección do proxecto	2,5%	Inmovilizado	425.995,55
	B2. Licenzas e permisos	4,0%	Inmovilizado	681.592,87
	B3. Probas previas	1,5%	Inmovilizado	255.597,33
C. Capital circulante				1.978.821,52
Total Inversión				20.126.231,78 €
PRÉSTAMO	65%		Inversión	<b>13.082.050,66 €</b>

#### 3.1. DEVOLUCIÓN DO PRÉSTAMO

Como se comentou no apartado 1 do presente Anexo V. Estudo de viabilidade económica, o modelo a empregar para a súa devolución baséase no método francés, representado pola ecuación 4 (5).

$$C = V * \frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1} \quad (4)$$

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Sendo, C: cota anual a satisfacer

V: cantidade de préstamo concedida

i: interese a pagar (5%)

n: número de anos de pago (20 anos no presente proxecto)

Así, obtense unha cantidade anual correspondente a 1.049.737,59 €.

Na Táboa 2 desmémbranse os conceptos dende o ano 0 ata o ano 20 correspondentes ao pago da débeda (amortización) e aos intereses.

Táboa 2. Amortización do préstamo solicitado. Fonte: Elaboración propia

ANO	AMORTIZ	INTERESES	CUOTA ANUAL	CTDE. RESTANTE
0				13.082.050,66
1	395.635,06	654.102,53	1.049.737,59	12.686.415,60
2	415.416,81	634.320,78	1.049.737,59	12.270.998,79
3	436.187,65	613.549,94	1.049.737,59	11.834.811,14
4	457.997,03	591.740,56	1.049.737,59	11.376.814,11
5	480.896,88	568.840,71	1.049.737,59	10.895.917,23
6	504.941,73	544.795,86	1.049.737,59	10.390.975,50
7	530.188,82	519.548,77	1.049.737,59	9.860.786,68
8	556.698,26	493.039,33	1.049.737,59	9.304.088,43
9	584.533,17	465.204,42	1.049.737,59	8.719.555,26
10	613.759,83	435.977,76	1.049.737,59	8.105.795,43
11	644.447,82	405.289,77	1.049.737,59	7.461.347,61
12	676.670,21	373.067,38	1.049.737,59	6.784.677,40
13	710.503,72	339.233,87	1.049.737,59	6.074.173,68
14	746.028,91	303.708,68	1.049.737,59	5.328.144,78
15	783.330,35	266.407,24	1.049.737,59	4.544.814,42
16	822.496,87	227.240,72	1.049.737,59	3.722.317,56
17	863.621,71	186.115,88	1.049.737,59	2.858.695,84
18	906.802,80	142.934,79	1.049.737,59	1.951.893,05
19	952.142,94	97.594,65	1.049.737,59	999.750,11
20	999.750,08	49.987,51	1.049.737,59	0,00

Como se pode extraer da táboa 2, queda patente o modelo de funcionamento do modelo francés, onde ao inicio a cantidade de interesas a pagar é moi elevada, mentres que a medida que transcorre o tempo, esta vai baixando, aumentando a amortización en si.

#### 4. CÁLCULO DAS PARTIDAS

Para a obtención dos custos de explotación e xestión empréganse os rangos propostos pola bibliografía para obter os valores numéricos de determinadas partidas, como se mostra na Táboa 8 (3).

##### 4.1. Custo das materias primas

Na Táboa 3 amósanse os prezos correspondentes á adquisición de materia primas, tendo en conta un tempo de operación de 330 días ao ano.

Táboa 3. Custo materia prima anual (€/t). Fontes: (6) (7)

Materia prima	Prezo compra (€/t)	Custo anual (€/ano)
Hidróxeno	444,00	2.730.600,00
Fenol	492,00	71.143.200,00
<b>Total</b>		<b>73.873.800,00 €</b>

Nota: Os prezos de compra teñen incluído un desconto por pedidos en grande cantidade.

##### 4.2. Ingresos pola venda de produtos

Na Táboa 4 amósanse os prezos obtidos mediante a venda de produtos. Esta cantidade serán os ingresos que terá a planta, sobre a cal haberá que deducir todos os gastos imputables.

Táboa 4. Ingresos por venda de ciclohexanona. Fonte: (8)

Produto	Prezo venda (€/t)	Ingreso anual (€/ano)
Ciclohexanona	665,00	99.750.000,00
<b>Total</b>		<b>99.750.000,00 €</b>

Nota: os prezos de ciclohexanona axústanse para obter competitividade no mercado global.

##### 4.3. Custo dos catalizadores

Na Táboa 5 atópanse os gastos nos que se incorren debidos á adquisición de catalizadores para levar a cabo as reaccións do R-201 e R-301.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 5. Gastos imputables á adquisición dos catalizadores. Fontes: (9) (10)

Catalizador	Cantidade (t)	Custo (€/t)	Custo anual (€/ano)
Pt (R-201)	0,500	1.170.000,00	585.000.,00
ZnO (R-301)	0,314	2714,00	852,19
Soportes cataliz.	-	50% prezo cataliz.	292.926,10
Rexeneración	-	20% prezo cataliz. + soportes	175.555,66
<b>Total</b>			<b>1.054.533,95 €</b>

Nota: a rexeneración do catalizador está estimada de xeito anual ao longo da vida da planta, cunha porcentaxe do 20% sobre o total da suma dos catalizadores e dos soportes.

### 4.4. Custo das utilidades

Na Táboa 6 desagreganse as partidas correspondentes ás utilidades empregadas no proceso, tendo en conta o prezo marcado pola bibliografía para cada unha delas (3).

Táboa 6. Custo asociado ás utilidades empregadas no proceso. Fonte: Elaboración propia e (3)

Utilidade	Cantidade (t/a)	Custo (€/t)	Custo anual (€/ano)
Consumo eléctrico (kWh)	2.280.960,00	0,11 (€/kWh)	250.905,60
Auga refrixeración	4.602.312,00	0,60	2.761.387,2
Auga arrefriamento	966.240,00	0,04	38.649,6
Vapor media presión	503.712,00	7,50	3.777.840,00
Vapor alta presión	681.120,00	12,00	8.173.440,00
<b>Total</b>			<b>15.002.222,40 €</b>

### 4.5. Custo de man de obra directa

En canto á partida destinada á man de obra dos operarios, tense en consideración para este análise de viabilidade económica un total de seis operarios por posto, cunha necesidade de tres postos por quenda de traballo e un número de catro quendas para poder traballar tódolos días da semana respectando os descansos establecidos polo convenio que regula a actividade. O salario medio estímase como 30.000,00€ brutos/ano, que engloba aos grupos profesionais que perciban un salario maior, compensándose con aqueles grupos cuxa formación non sexa tan esixente, que percibirán unha cantidade

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

inferior, tal e como se regula dentro do convenio para a Industria Química, segmentada en grupos profesionais, do 0 ao 8.

Tense en conta +30% en concepto do custo relativo á seguridade social asociado que corre a costa do empresario.

Táboa 7. Custos imputábeis á man de obra directa. Fonte: (3)

Concepto	Cantidade (persoas)	Custo (€/operario)	Custo anual (€/ano)
Operarios/posto	6	-	-
Postos/quenda	3	-	-
Quendas	4	-	-
Operarios totais	72	30.000,00	2.160.000,00
% Seg. Social	+30%	9.000,00	648.000,00
<b>Total</b>			<b>2.808.000,00 €</b>

#### 4.6. Custos de explotación e xestión restantes

A continuación, na Táboa 8, preséntanse os custos para o resto de partidas non consideradas ata o momento, que dependerán de partidas xa calculadas, como o inmovilizado ou a man de obra directa. Os valores escolleitos están dentro dos rangos marcados pola bibliografía (3).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 8. Custos explotación e xestión. Fonte:Elaboración propia e (3)

Custos explotación	Base	Inf. (%)	Sup. (%)	Seleccionado (%)	Importe (€)
A. Man obra indirecta	Man obra directa	15	30	20	561.600,00
B. Mantemento	Inmobilizado	8	8	8	1.363.185,75
C. Seguros e publicidade	Inmobilizado	1	1	1	170.398,22
<b>Total explotación</b>					<b>2.095.183,97 €</b>
Custos Xestión					
D. Gastos administrativos	Custo explotación	3	3	3	62.855,52
E. Gastos comerciais	Custo explotación	10	10	10	209.518,40 €
F. Investigación	Custo explotación	1	1	1	20.951,84 €
<b>Total xestión</b>					<b>293.325,76 €</b>

### 5. CUSTOS DE OPERACIÓN TOTAIS

Neste apartado obtense o valor correspondente a todos os custos de operación da planta.

Teranse en conta, polo tanto, todas as partidas do apartado 4. Cálculo das partidas.

Exceptuando o punto correspondente aos ingresos por venda de ciclohexanona, as partidas serán gastos, que se deberán restar aos ingresos obtidos, deste xeito e como se detalla no apartado 7. Cálculo de fluxo de caixa, pode obterse o beneficio neto anual.

Os resultados resúmense na Táboa 9

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 9. Custos de Operación. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Importe (€)
Materia prima	73.873.800,00
Catalizadores	1.054.533,95
Utilidades	15.002.222,40
Man de obra directa	2.808.000,00
Man de obra indirecta	561.600,00
Mantemento	1.363.185,75
Seguros e publicidade	170.398,22
Gastos administrativos	62.855,52
Gastos comerciais	209.518,40
Investigación	20.951,84
<b>TOTAL</b>	<b>95.127.066,08 €</b>

## 6. AMORTIZACIÓN DOS EQUIPOS

É ben sabido que os equipos perden valor co paso do tempo. Esta é a razón pola que hai que ter en conta a amortización dos mesmos, necesaria para poder obter o fluxo de caixa. A amortización obtense coa ecuación 5, tendo en conta unha cantidade fixa anual, sen ningún tipo de variación e calculada para os vinte anos de vida que se asume para a planta de produción de ciclohexanona.

$$A = \frac{\text{Inversión}}{n} \quad (5)$$

Onde, A: amortización (€/ano)

n: número de anos de vida da planta (20 anos)

Así, a amortización anual a ter en conta ascende a un valor de 1.006.311,59 € anuais.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

## 7. CÁLCULO DO FLUXO DE CAIXA

Para calcular o fluxo de caixa, ao resultado obtido como beneficio neto, engádeselle a amortización, tal e como se ilustra na ecuación 6.

$$\text{Fluxo de caixa ano } n \text{ (FC)}_n = \text{Benef. neto (BN)}_n + \text{Amort. (A)} \quad (6)$$

Onde, Fluxo caixa (FC)<sub>n</sub>: fluxo de caixa no ano n (€)

Actualizarase de igual modo o valor dos ingresos e os gastos a medida que pasan os anos de vida da planta, tomando como referencia un valor de 1,5% de incremento do valor, tendo en conta a inflación derivada do IPC dun ano para outro. O valor é totalmente estimado e non ten ningún tipo de vinculación legal, posto que é un indicador moi volúbel.

Con todo, obtéñense os datos para cada dos anos desagregados na Táboa 10.

O algoritmo de cálculo empregado foi o que se menciona:

- 1) Ingresos – gastos – pago intereses préstamo – Amortización = Beneficio antes de impostos (BAI)
- 2) BAI – Impostos (30%) = Beneficio neto (BN)
- 3) BN + Amortización = Fluxo de caixa (FC) [Ecuación 6]
- 4) Fluxo caixa acumulado no ano n (FCA<sub>n</sub>) = -Inversión (I) +  $\Sigma$  Fluxo de caixa ata o ano n (FC<sub>n</sub>)

Táboa 10. Obtención dos fluxos de caixa. Elaboración propia

Ano	Ingresos (€)	Gastos operación (€)	Intereses préstamo (€)	Amortización (€)	BAI (€)	Impostos (€)	BN (€)	FC (€)	FCA (€)
0									-20.126.231,78
1	99.750.000,00	95.127.066,08	654.102,53	1.006.311,59	2.962.519,80	888.755,94	2.073.763,86	3.080.075,45	-17.046.156,33
2	101.745.000,00	97.029.607,40	634.320,78	1.006.311,59	3.074.760,23	922.428,07	2.152.332,16	3.158.643,75	-13.887.512,58
3	103.779.900,00	98.970.199,55	613.549,94	1.006.311,59	3.189.838,92	956.951,68	2.232.887,24	3.239.198,83	-10.648.313,75
4	105.855.498,00	100.949.603,54	591.740,56	1.006.311,59	3.307.842,31	992.352,69	2.315.489,62	3.321.801,21	-7.326.512,54
5	107.972.607,96	102.968.595,61	568.840,71	1.006.311,59	3.428.860,05	1.028.658,01	2.400.202,03	3.406.513,62	-3.919.998,92
6	110.132.060,12	105.027.967,52	544.795,86	1.006.311,59	3.552.985,15	1.065.895,54	2.487.089,60	3.493.401,19	-426.597,72
7	112.334.701,32	107.128.526,87	519.548,77	1.006.311,59	3.680.314,09	1.104.094,23	2.576.219,86	3.582.531,45	3.155.933,73
8	114.581.395,35	109.271.097,41	493.039,33	1.006.311,59	3.810.947,02	1.143.284,10	2.667.662,91	3.673.974,50	6.829.908,23
9	116.873.023,25	111.456.519,36	465.204,42	1.006.311,59	3.944.987,89	1.183.496,37	2.761.491,52	3.767.803,11	10.597.711,34
10	119.210.483,72	113.685.649,75	435.977,76	1.006.311,59	4.082.544,62	1.224.763,39	2.857.781,24	3.864.092,83	14.461.804,16
11	121.594.693,39	115.959.362,74	405.289,77	1.006.311,59	4.223.729,29	1.267.118,79	2.956.610,50	3.962.922,09	18.424.726,26
12	124.026.587,26	118.278.550,00	373.067,38	1.006.311,59	4.368.658,30	1.310.597,49	3.058.060,81	4.064.372,40	22.489.098,66
13	126.507.119,01	120.644.121,00	339.233,87	1.006.311,59	4.517.452,55	1.355.235,77	3.162.216,79	4.168.528,38	26.657.627,03
14	129.037.261,39	123.057.003,42	303.708,68	1.006.311,59	4.670.237,70	1.401.071,31	3.269.166,39	4.275.477,98	30.933.105,01
15	131.618.006,62	125.518.143,49	266.407,24	1.006.311,59	4.827.144,30	1.448.143,29	3.379.001,01	4.385.312,60	35.318.417,61
16	134.250.366,75	128.028.506,35	227.240,72	1.006.311,59	4.988.308,08	1.496.492,42	3.491.815,66	4.498.127,25	39.816.544,86
17	136.935.374,08	130.589.076,48	186.115,88	1.006.311,59	5.153.870,13	1.546.161,04	3.607.709,09	4.614.020,68	44.430.565,54
18	139.674.081,56	133.200.858,01	142.934,79	1.006.311,59	5.323.977,17	1.597.193,15	3.726.784,02	4.733.095,61	49.163.661,15
19	142.467.563,20	135.864.875,17	97.594,65	1.006.311,59	5.498.781,78	1.649.634,54	3.849.147,25	4.855.458,84	54.019.119,99
20	145.316.914,46	138.582.172,68	49.987,51	1.006.311,59	5.678.442,68	1.703.532,81	3.974.909,88	4.981.221,47	59.000.341,46

## 8. RESULTADOS DO VAN, TIR E PAYBACK

Neste apartado preséntanse os indicadores económicos do proxecto presentado, para avaliar a súa rendibilidade.

O VAN obtense empregando a ecuación 1, o TIR coa ecuación 2 e o Payback coa ecuación 3, todos eles empregando os datos representados na Táboa 10 do presente anexo V. Estudo de viabilidade económica. Representáanse na Táboa 11.

Pode atoparse a representación do *payback* gráfica na Figura 1.

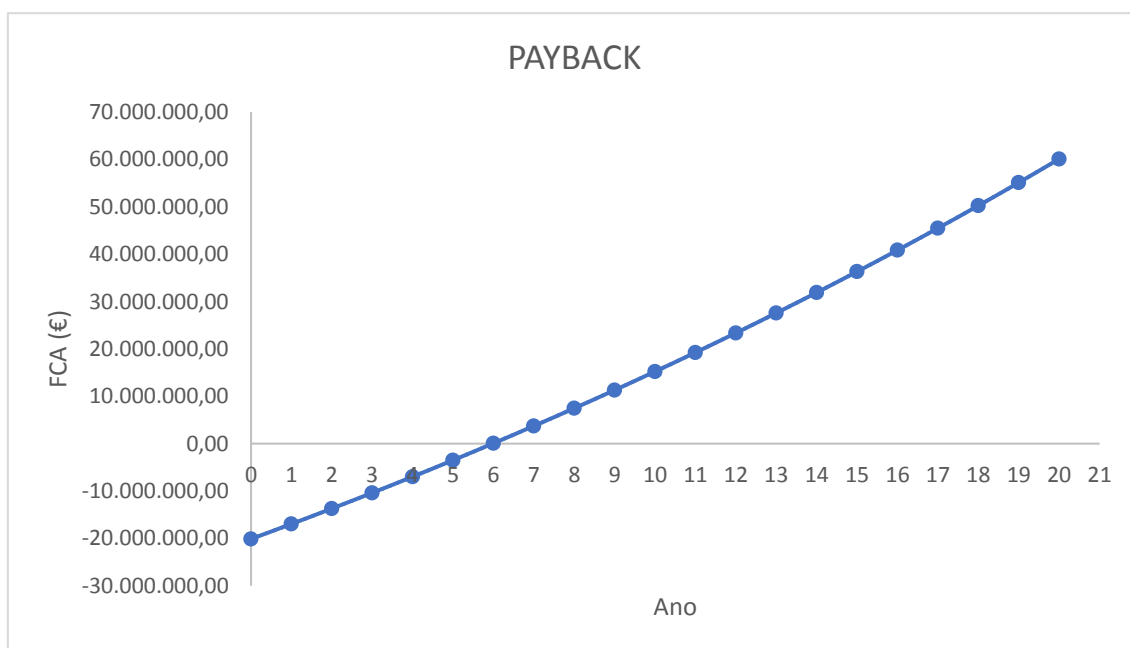


Figura 1. Gráfica do payback. Fonte: Elaboración propia en Microsoft Excel

Táboa 11. Análise dos indicadores económicos do proxecto. Fonte: Elaboración propia

Indicador	Valor
VAN	13.539.719,95 €
TIR	16,70 %
<i>Payback</i>	6 anos 1 mes

Conclúese por tanto que o proxecto é rendible de acordo cos datos representados na Táboa 11.

O VAN posúe un valor maior que cero ( $VAN > 0$ ), sendo o TIR de 16,70%, moi superior ao 9% considerado para realizar os cálculos.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Todos estes datos levan a obter unha devolución íntegra da inversión necesario de seis anos e un mes.

### 8.1. Análise de sensibilidade dos indicadores económicos

Este apartado pretende ilustrar a variación dos parámetros económicos analizados, isto é, VAN, TIR e *Payback*, ante a volatilidade dos prezos de compra de materias primas e venda de produtos. Así, analizarase unha desviación de  $\pm 3\%$  e  $\pm 5\%$  para a adquisición dos reactivos así como da comercialización da ciclohexanona. Asemade, tamén se realiza un análise do impacto da variación na cantidade de inversión no proxecto.

Posteriormente analizarase como afectarían estas variacións na rendibilidade do proxecto. Na Táboa 12 móstranse os resultados obtidos introducindo as desviacións citadas no anterior parágrafo para a venda de ciclohexanona.

Táboa 12. Variación no prezo de venda do produto. Fonte: Elaboración propia

Indicador	+3%	+5%	-3%	-5%
VAN	35.530.457,89 €	50.190.916,51 €	-8.450.997,99 €	-23.111.476,61 €
TIR	27,74 %	34,78 %	3,08 %	-
<i>Payback</i>	3 anos 8 meses	3 anos 0 meses	15 anos 6 meses	Non hai

Nos casos nos que o produto baixe o seu prezo de venda, o proxecto non se entende rendíbel posto que o seu VAN < 0. Ao mesmo tempo e como era de agardar, canto maior incremento no prezo de venda do produto, máis rendíbel será o proxecto, loxicamente.

Na Táboa 13, de xeito análogo, analízanse as consecuencias que tería unha variación no prezo de adquisición da materia prima.

Táboa 13. Variación no prezo de compra dos reactivos. Fonte: Elaboración propia

Indicador	+3%	+5%	-3%	-5%
VAN	-2.746.374,28 €	-15.978.284,95 €	29.825.814,17 €	40.683.210,32 €
TIR	7,23 %	34,78 %	24,95 %	30,23
<i>Payback</i>	11 anos 0 meses	Non hai	4 anos 8 meses	3 anos 6 meses

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Ante a subida de materias primas, o proxecto non é rendible, aínda que cabe destacar que no caso dun aumento de +3%, non se atopa moi lonxe da rendibilidade, polo que un incremento sensiblemente menor podería ser aceptábel

Por último analízase a variación da inversión inicial, nos rangos dun  $\pm 20\%$ , sendo non solo afectado o período de recuperación da inversión, senón tamén o VAN e o TIR ao verse modificada a cantidade anual en concepto de pago de intereses da débeda.

Táboa 14. Variación da cantidade inicial a investir. Fonte: Elaboración propia

Indicador	+20%	-20%
VAN	13.539.719,95€	14.452.127,74 €
TIR	13,37 %	21,45 %
<i>Payback</i>	7 anos 6 meses	4 anos 10 meses

Na Táboa 14 demóstrase a solidez do proxecto ante a variación da cantidade inicial a investir, sendo quen de soportar positivamente un incremento de +20%.

## 9. CONCLUSIÓNS

O proxecto denota unha solidez moi consolidada ante as variacións de  $\pm 20\%$  na inversión inicial, sendo os VAN  $> 0$  en ámbolos dous casos; recuperándose a devandita inversión de capital inicial nun período adecuado para tratarse dunha instalación industrial.

Detéctanse conclusións claramente negativas ante a suba no prezo de compra das materias primas, así como na diminución do prezo de venda do produto, a ciclohexanona. Sen embargo, cabe resaltar que o prezo da ciclohexanona é altamente competitivo, polo que pode absorber subas para compensar o hipotético maior custo das materias primas. Isto é, ante a alza do hidróxeno e o fenol, podería subirse o prezo de comercialización da ciclohexanona. Asemade, é certamente improbable que varíe negativamente a cantidade solicitada e suposta para a venda de produto, posto que ao estar tan axustado o prezo, pode encarecerse sen ter apenas repercusións, alo menos de xeito inmediato.

Conclúese por tanto que o proxecto ten unha viabilidade aceptable e que compensa investir na creación da planta de produción deseñada no presente proxecto.

## 10. BIBLIOGRAFÍA

1. SINNOTT, R. e G. TOWLER. *Chemical Engineering Design*. Burlington : Elsevier, 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1
2. GONZÁLEZ, I. *¿Qué es y cómo calcular la TIR (Tasa Interna de Retorno)?* [en liña]. [Consultado Xuño 2020]. Disponible en: <https://www.unir.net/empresa/desarrollo-directivo/estrategia-de-negocio/como-calcular-tir-tasa-interna-retorno/>
3. FREIRE, S. *Proxectos e deseño de instalacións, Tema 3*. Universidade de santiago de compostela, 2020. [Material non publicado]
4. ROMERO, L. *Hipotecas para locales comerciais y naves industriales* [en liña]. [Consultado Xuño 2020]. Disponible en: <https://www.rankia.com/blog/mejores-hipotecas/2186974-hipotecas-para-locales-comerciales-naves-industriales>
5. BLANCO, M. *¿Qué es el sistema de amortización francés?* [en liña]. [Consultado Xuño 2020]. Disponible en: <https://www.rankia.com/blog/mejores-hipotecas/2399623-que-sistema-amortizacion-frances>
6. ECHEMI. *Phenol Price Analysis* [en liña]. [Consultado Xuño 2020]. Disponible en: [https://www.echemi.com/productsInformation/pid\\_Seven3078-phenol.html](https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Seven3078-phenol.html)
7. AMMONIA ENERGY. *The cost of hydrogen: Platts launches Hydrogen Price Assessment* [en liña]. [Consultado Xuño 2020]. Disponible en: <https://www.ammoniaenergy.org/articles/the-cost-of-hydrogen-platts-launches-hydrogen-price-assessment/>
8. INDIAMART. *Cyclohexanone price* [en liña]. [Consultado Xuño 2020]. Disponible en: <https://dir.indiamart.com/impcat/cyclohexanone.html>
9. MADE-IN-CHINA. *ZnO Catalyst Price manufacturers & suppliers* [en liña]. [Consultado Xuño 2020]. Disponible en: [https://www.made-in-china.com/products-search/hot-china-products/Zno\\_Catalyst\\_Price.html](https://www.made-in-china.com/products-search/hot-china-products/Zno_Catalyst_Price.html)

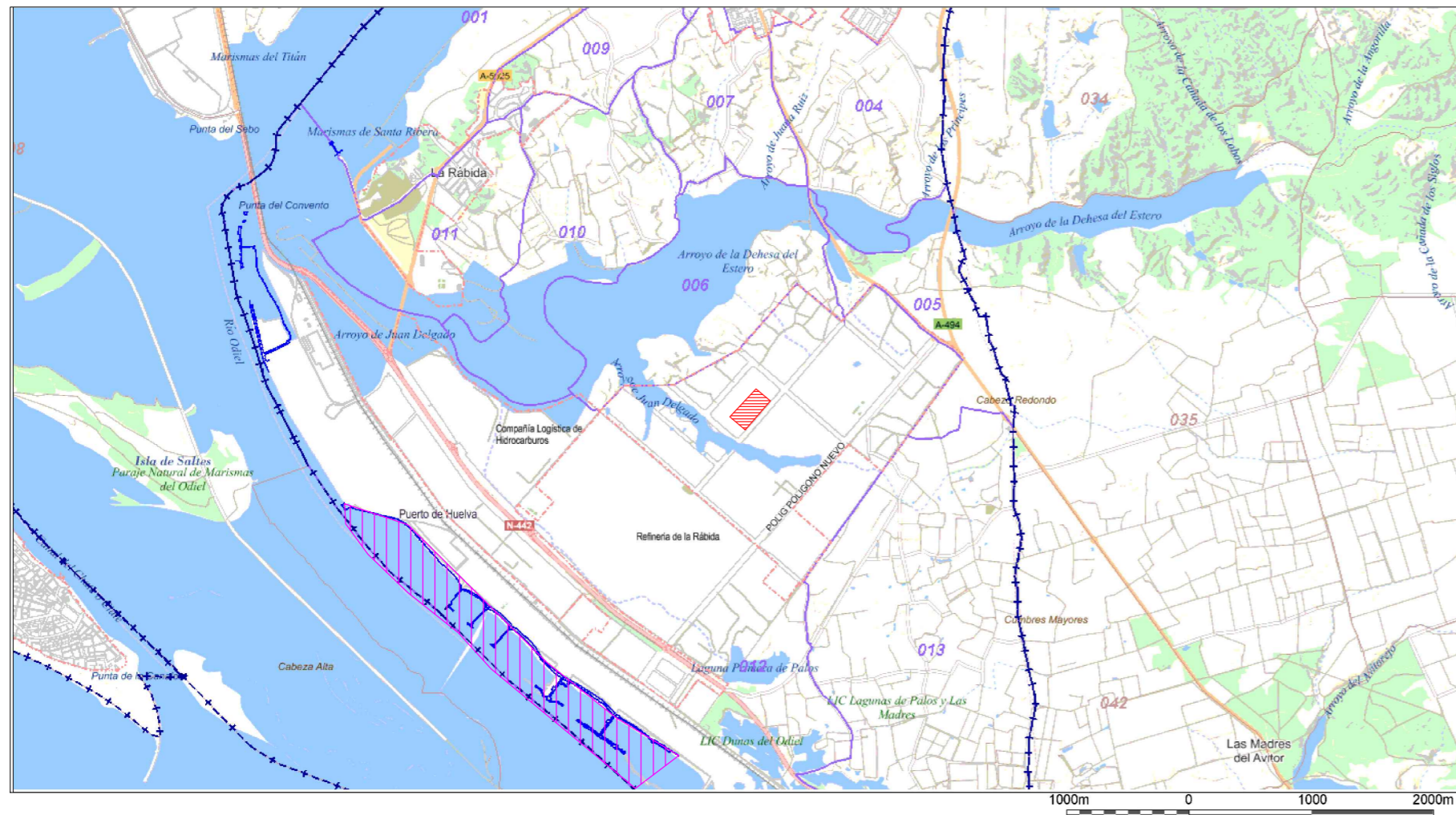
Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

10. INDIAMART. *Platinum Catalysts* [en liña]. [Consultado Xuño 2020]. Dispoñible en:  
[https://www.made-in-china.com/products-search/hot-china-products/Zno\\_Catalyst\\_Price.html](https://www.made-in-china.com/products-search/hot-china-products/Zno_Catalyst_Price.html)

**DOCUMENTO II:**  
**PLANOS**

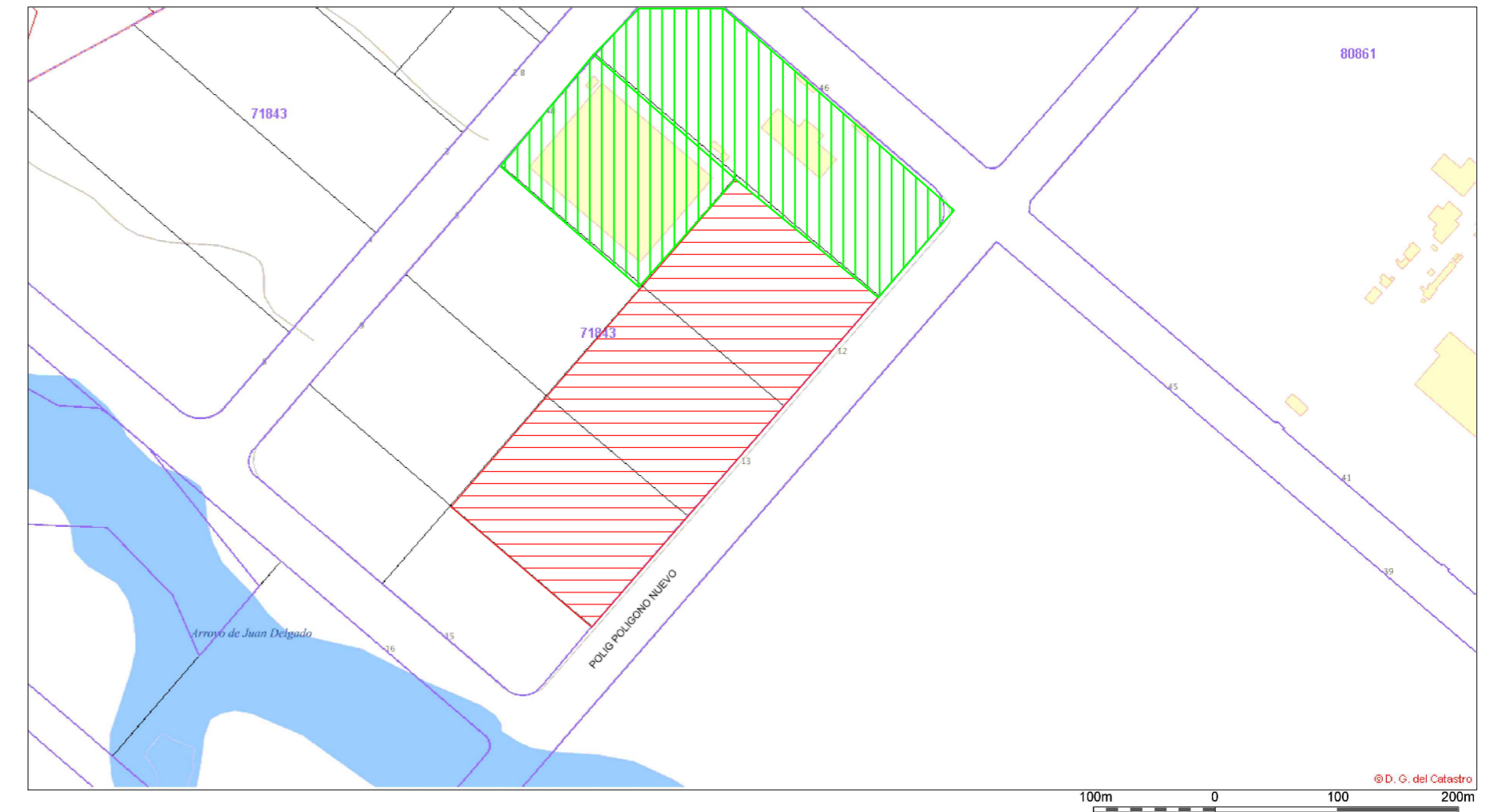
## Índice Documento II. Planos

- Plano #1. Plano de situación e emprazamento
- Plano #2. Plano de implantación
- Plano #3. Diagrama de fluxo de proceso (PFD)
- Plano #4. P&ID #1
- Plano #5. P&ID#2
- Plano #6. Plano deseño mecánico. Deseño reactor R-201
- Plano #7. Deseño mecánico columna T-301



PLANO DE SITUACIÓN

ESCALA: 1 : 50.000



PLANO DE EMPRAZAMENTO

ESCALA 1 : 5.000

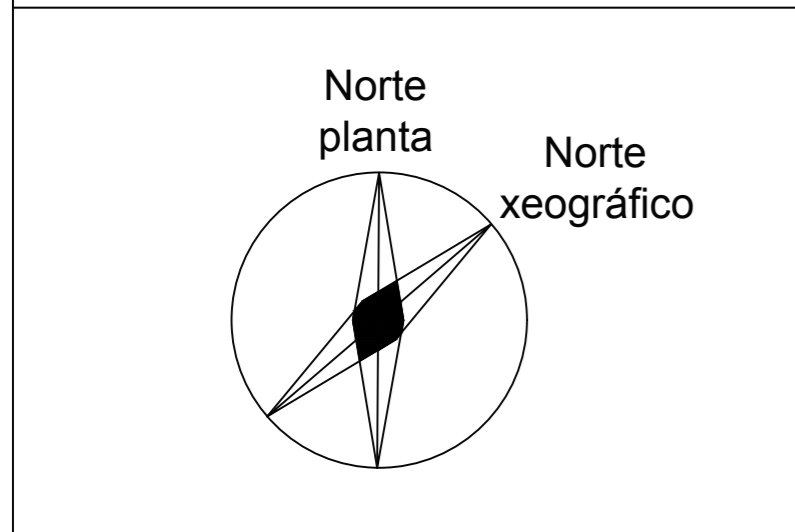
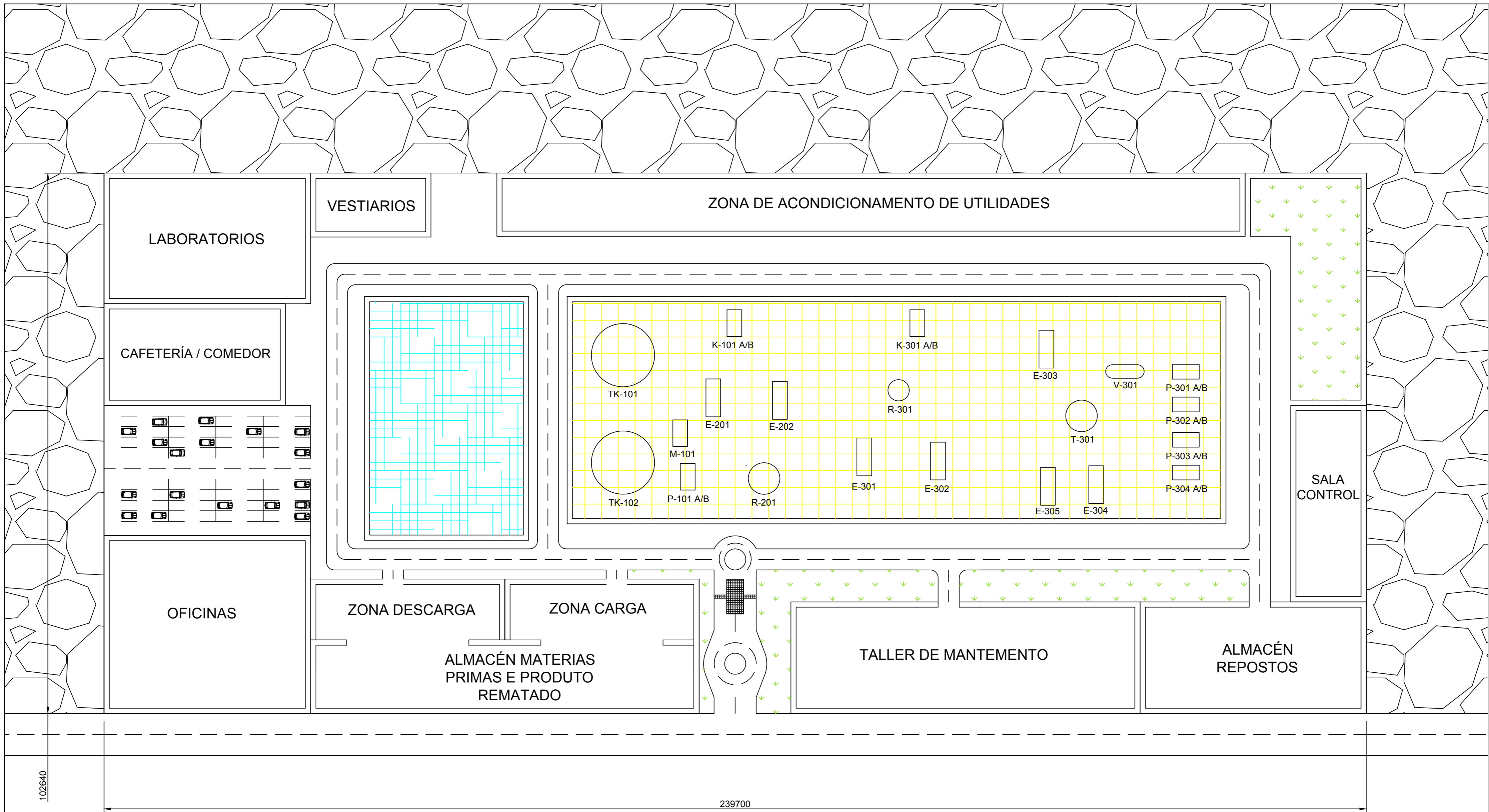
COORDENADAS DOS EXTREMOS

Superior-esquerda	681.033 ; 4.121.480	Superior-dereita	693.033 ; 4.121.480
Inferior-esquerda	681.033 ; 4.114.980	Inferior-dereita	693.033 ; 4.114.980

COORDENADAS DOS EXTREMOS

Superior-esquerda	686.600 ; 4.118.473	Superior-dereita	687.800 ; 4.118.473
Inferior-esquerda	686.600 ; 4.117.823	Inferior-dereita	687.800 ; 4.117.823

	<p><b>LEND A</b></p> <p> Situación da parcela</p> <p> Parcelas doutras empresas</p> <p> Porto de Huelva</p>	<p><b>DATOS DA UBICACIÓN</b></p> <p>MUNICIPIO: Palos de la frontera</p> <p>PROVINCIA: Huelva</p>	<p>Mapas cartográficos obtidos da sede do catastro do Goberno de España. Acceso aberto telemáticamente</p> <p>De conformidade ao Decreto 192/2003, de 1 de Xullo, pola que se regulan as competencias en materia de Ordenación do territorio e urbanismo.</p> <p>Suxeito ao cumprimento das Normas Subsidiarias de planeamento do termo municipal de Palos de la Frontera (Huelva)</p>	<p><b>USC</b> UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA</p> <p>UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA</p> <p>GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO</p>	<p><b>ETSE</b></p>
	<p>DESEÑO BÁSICO DUNHA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CICLOHEXANONA A PARTIR DE FENOL</p>		<p>AUTORES: RAÚL BONENFANT MUÑIZ ISMAEL FERNÁNDEZ PAZÓ</p>	<p>SINATURAS: </p>	<p>ESCALA: VER NO PLANO</p> <p>XULLO 2020</p>

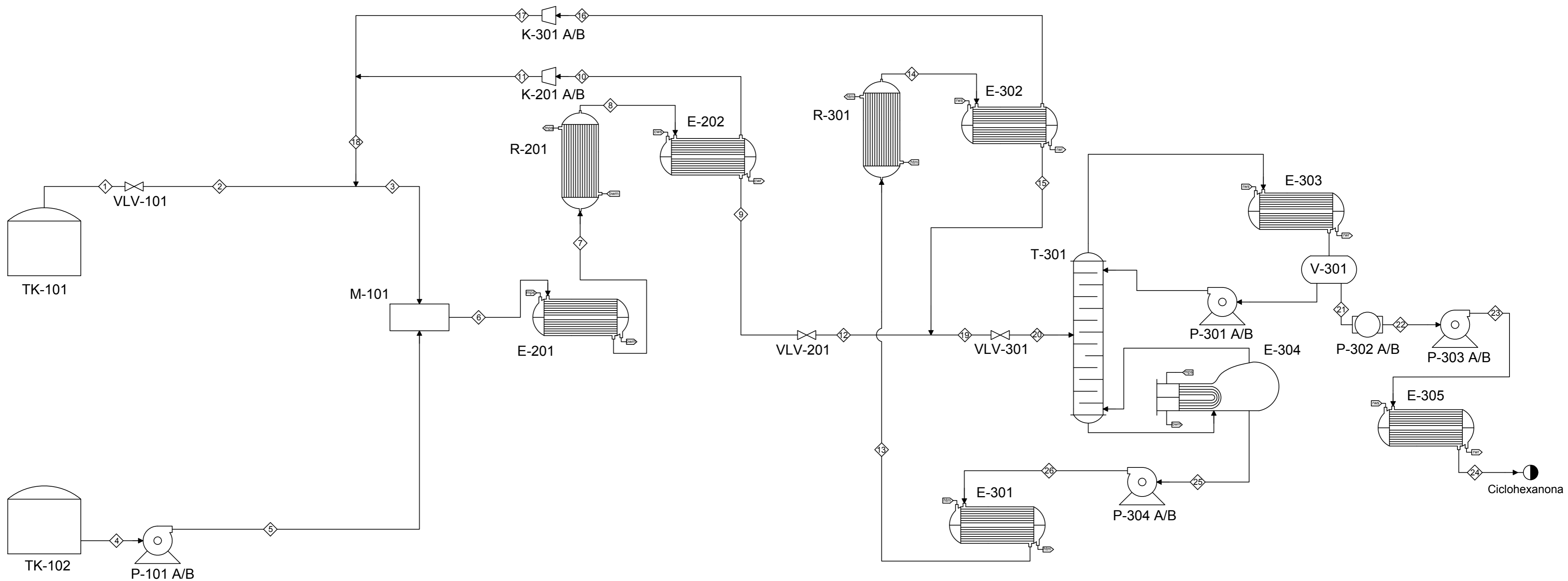


**LEND**

Terreo ocupado por outras parcelas / empresas	Vexetación
Control de seguridade e barreiras de acceso	Batería de proceso
	Área reservada para futuras ampliacións

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO		
<b>DESEÑO BÁSICO DUNHA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CICLOHEXANONA A PARTIR DE FENOL</b>		
AUTORES: RAÚL BONENFANT MUÑOZ ISMAEL FERNÁNDEZ PAZÓ	SINATURAS:	ESCALA: 1 : 500 XULLO 2020
<b>PLANO DE IMPLANTACIÓN</b>		<b># 2</b>

TK-101 TANQUE ALMACENAMIENTO H <sub>2</sub>	VLV-101 VÁLVULA DE EXPANSIÓN	M-101 MEZCLADOR	R-201 REACTOR HIDROX. CATALÍTICA	K-301 A/B COMPRESOR	VLV-201 VÁLVULA DE EXPANSIÓN	E-301 INTERCAMBIADOR DE CALOR	VLV-301 VÁLVULA DE EXPANSIÓN	P-301 A/B BOMBA CENTRÍFUGA	E-303 INTERCAMBIADOR DE CALOR	P-302 A/B BOMBA DE BALEIRO	P-303 A/B BOMBA CENTRÍFUGA
TK-102 TANQUE ALMACENAMIENTO FENOL	P-101 A/B BOMBA CENTRÍFUGA	E-201 INTERCAMBIADOR DE CALOR	K-201 A/B COMPRESOR	E-202 INTERCAMBIADOR DE CALOR	R-301 REACTOR DE DESHIDROXENACIÓN	E-302 INTERCAMBIADOR DE CALOR	T-301 COLUMNA DESTILACIÓN	P-304 A/B BOMBA CENTRÍFUGA	E-304 INTERCAMBIADOR DE CALOR	V-101 TANQUE DE REFLUXO	E-305 INTERCAMBIADOR DE CALOR



LEENDA DE UTILIDADES

htm: fluido térmico calefactor	bwm: auga de caldeiras a media presión
mhs: vapor de media presión	bwh: auga de caldeiras a alta presión
rws: suministro auga refrixeración	rwr: retorno auga refrixeración
cws: suministro auga arrefecemento	cwr: retorno auga arrefecemento

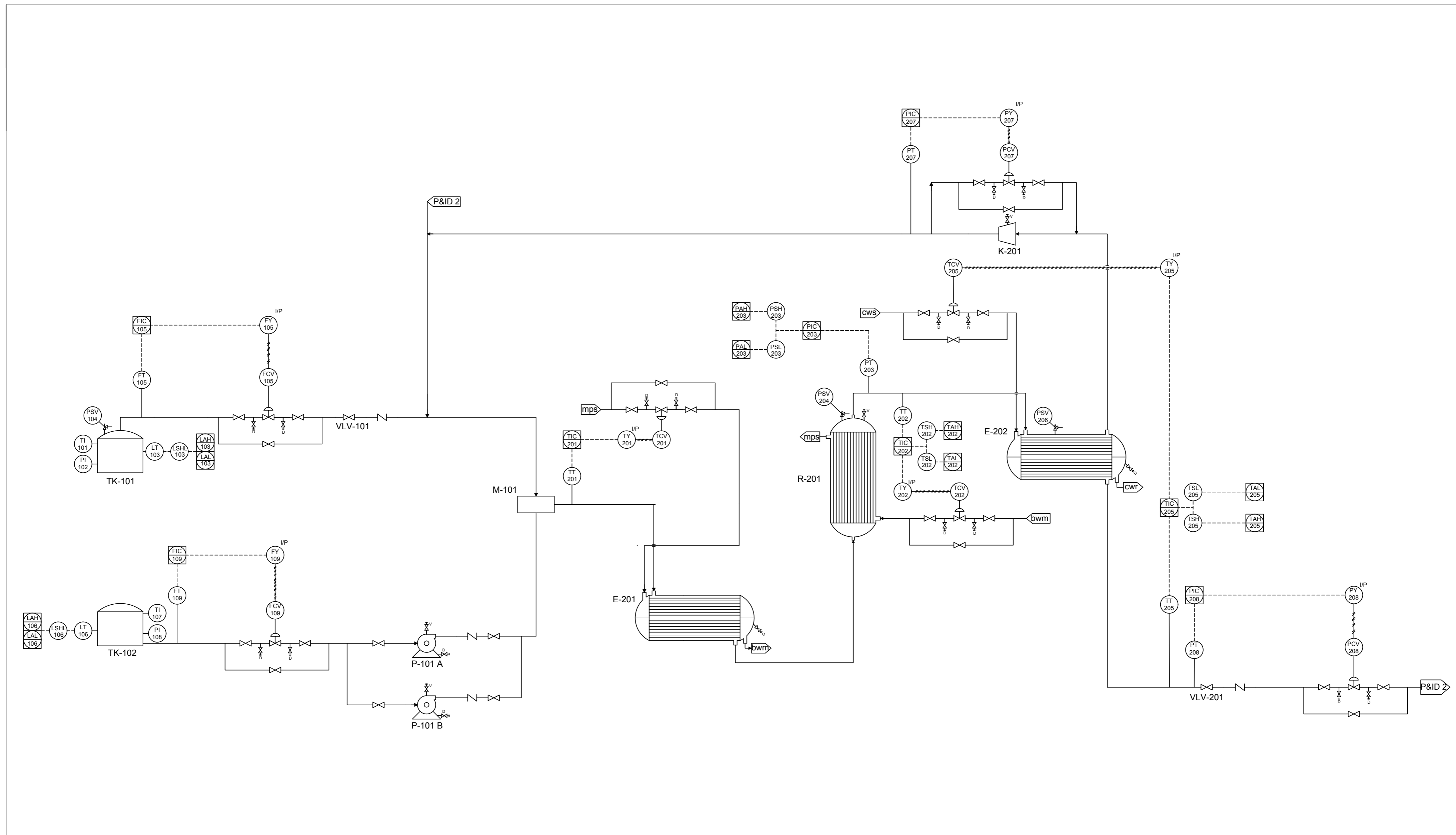
Corrente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
Temperatura (°C)	25,0	33,7	125,2	25,0	25,0	59,7	180,0	180,0	178,5	178,5	237,4	171,3	300,0	300,0	177,0	177,0	272,8	247,9	177,9	112,9	109,9	109,9	25,0	120,8	120,8	
Presión (kPa)	20000,00	300,00	300,00	101,30	300,00	300,00	300,00	244,50	229,00	229,00	300,00	180,00	202,60	180,00	180,00	180,00	300,00	300,00	180,00	26,66	26,66	70,00	101,30	101,30	50,66	202,6
Fración de vapor	1	1	1	0	0	0,78	1	1	0	1	1	0	1	1	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	
Fluxo molar total (kmol/h)	389,43	389,43	679,81	194,23	194,23	874,04	874,04	398,17	194,23	203,94	203,94	194,23	120,05	206,48	120,05	86,43	86,43	290,37	314,28	314,28	194,23	194,23	194,23	194,23	120,05	120,05
Fluxo máscico total (kg/h)	778,86	778,86	1359,61	18257,65	18257,65	19617,26	19617,26	19617,26	19209,37	407,88	407,88	19209,37	11980,50	11980,50	11807,64	172,86	172,86	580,74	31017,01	31017,01	19036,51	19036,51	19036,51	19036,51	11980,50	11980,50
Fluxo máscico comp. (kg/h)																										
Fenol	0,00	0,00	0,00	18257,65	18257,65	18257,65	18257,65	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Hidróxeno	778,86	778,86	1359,61	0,00	0,00	1359,61	1359,61	407,88	0,00	407,88	407,88	0,00	0,00	172,86	0,00	172,86	172,86	580,74	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Ciclohexanona	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	10469,01	10469,01	0,00	0,00	10469,01	1176,44	9646,82	9646,82	0,00	0,00	0,00	20115,84	20115,84	18939,39	18939,39	18939,39	18939,39	1176,44	1176,44
Ciclohexanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	8740,36	8740,36	0,00	0,00	8740,36	10804,06	2160,81	2160,81	0,00	0,00	0,00	10901,17	10901,17	97,12	97,12	97,12	97,12	10804,06	10804,06

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA  
 GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO

DESEÑO BÁSICO DUNHA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CICLOHEXANONA A PARTIR DE FENOL

AUTORES: RAÚL BONENFANT MUÑIZ ISMAEL FERNÁNDEZ PAZÓ	SINATURAS: 	ESCALA: S/E XULLO 2020
---	----------------	---------------------------

DIAGRAMA DE FLUXO DE PROCESO (PFD) # 3



<b>XYX ABB</b>		X:Primeira letra YY:2ª e 3ª letra A:Sección proceso BB:Número de lazo	
<b>1ª LETRA</b>	<b>2ª E 3ª LETRAS</b>		
F Fluxo	A Alarma		
L Nivel	I Indicador		
P Presión	C Controlador		
T Temperatura	S Interruptor		
	L/H Baixo/Alto		
	V Válvula		
	T Transmisor		
	Y Conv. sinal		

SIMBOLOXÍA DE CONTROL E INSTRUMENTACIÓN			
Liñas de conexión	Válvulas	Instrumentos	
————— Conex. proceso	Válvula non especificada	Segundo localización	
----- Sinal eléctrico	Válvula de control	En planta	Inst. discreto
----- Sinal neumático	Válvula antirretorno	Sala de control	Realiza func. control
	DVálvula de drenaxe		
	VVálvula de venteo		
	Válvula de alivio		

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA  
DEPARTAMENTO DE ENXEÑERÍA QUÍMICA

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA  
GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO

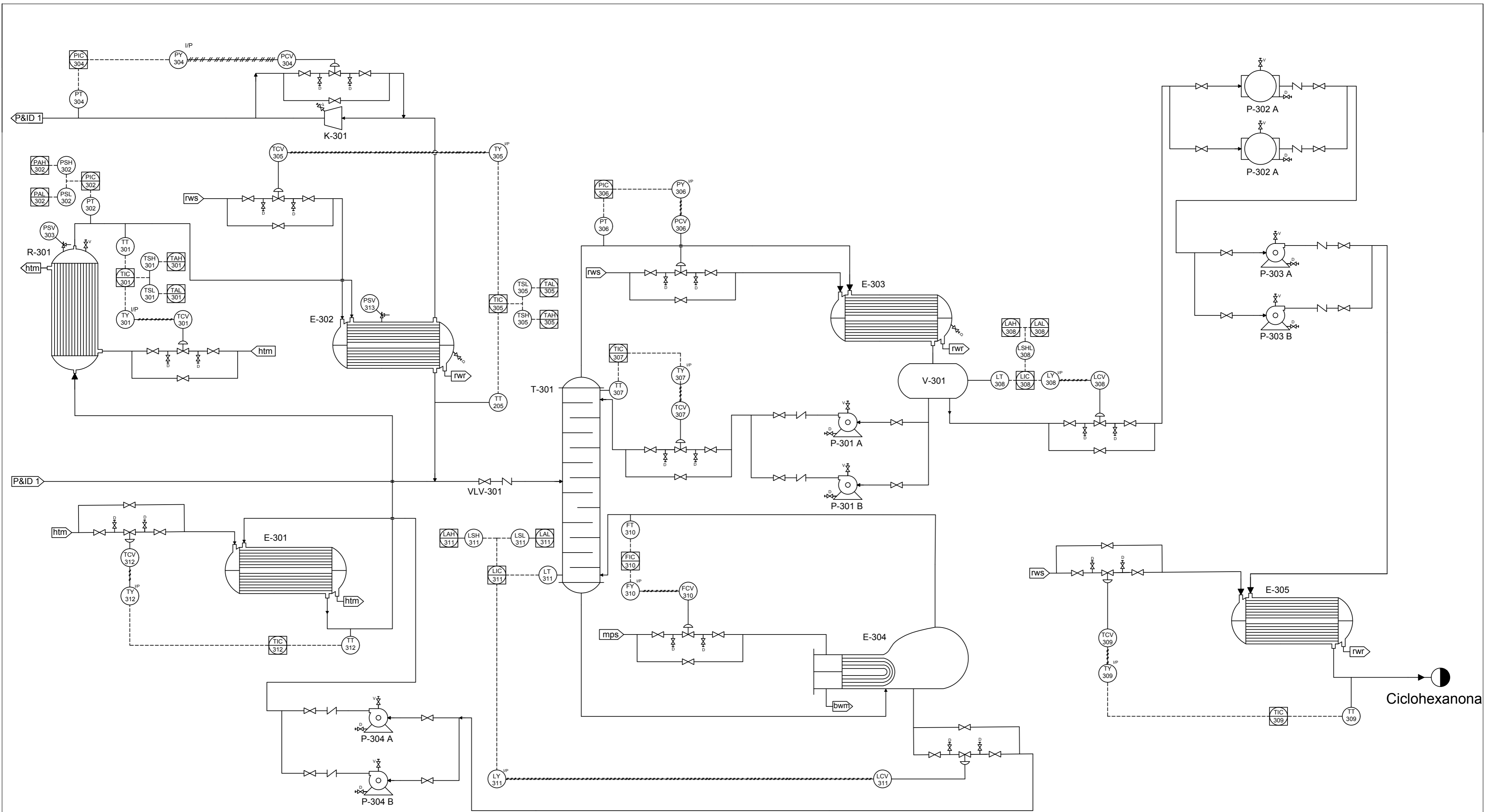
---

**DESEÑO BÁSICO DUNHA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CICLOHEXANONA A PARTIR DE FENOL**

AUTORES: RAÚL BONENFANT MUÑIZ ISMAEL FERNÁNDEZ PAZÓ	SINATURAS: 	ESCALA: S/E  XULLO 2020
---	----------------	-------------------------------

P&ID #1

# 4



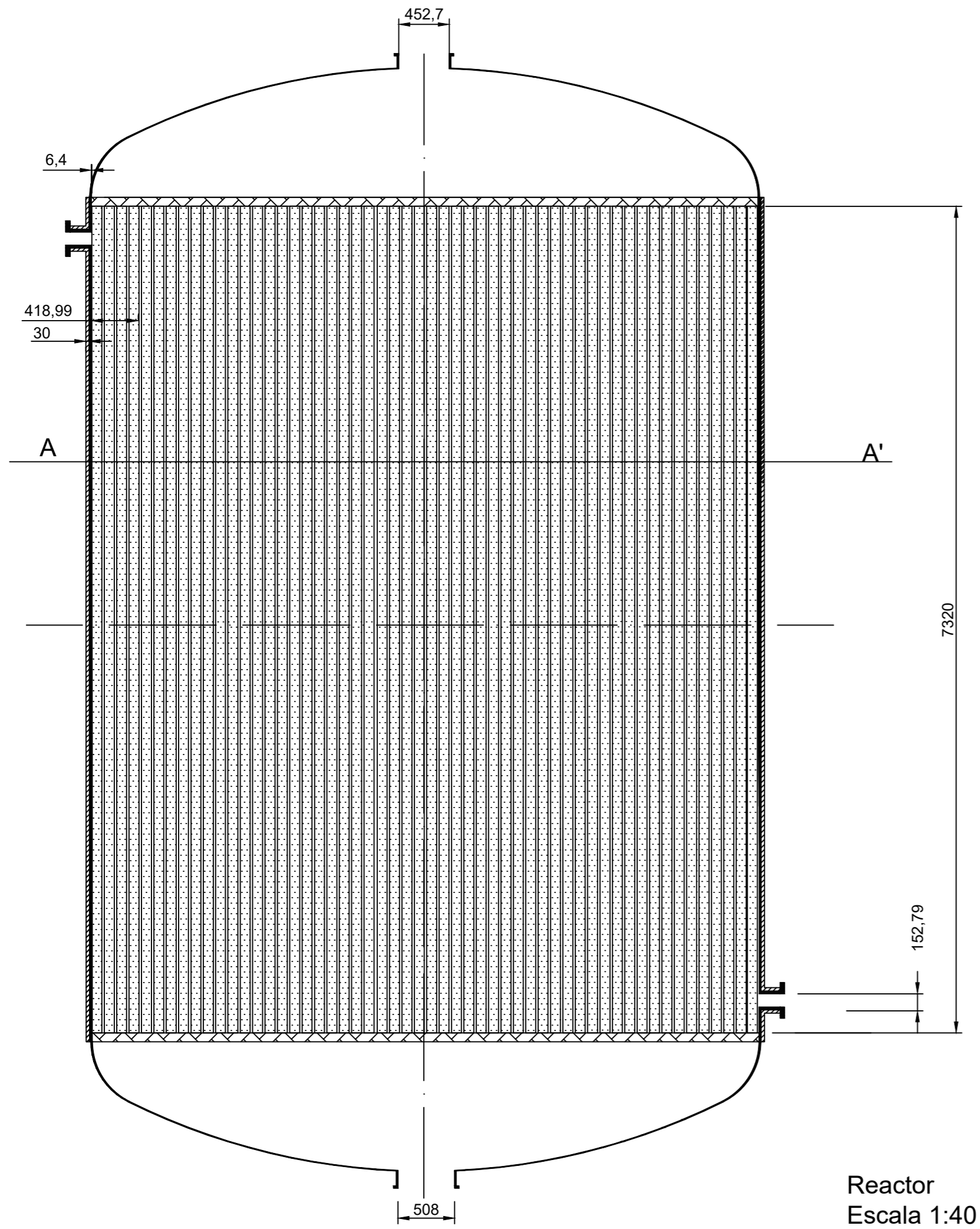
<b>XYA</b> <b>ABB</b>		X:Primeira letra YY:2ª e 3ª letra A:Sección proceso BB:Número de lazo	
<b>1ª LETRA</b>	<b>2ª E 3ª LETRAS</b>		
F	A	Flujo	Alarma
L	I	Nivel	Indicador
P	C	Presión	Controlador
T	S	Temperatura	Interruptor
	L/H		Baixo/Alto
	V		Válvula
	T		Transmisor
	Y		Conv. sinal

SIMBOLOXÍA DE CONTROL E INSTRUMENTACIÓN			
Liñas de conexión	Válvulas	Instrumentos	
—————	Conex. proceso	Segundo localización	
— — — —	Sinal eléctrico		
#####	Sinal neumático		
	Válvula non especificada		
	Válvula de control		
	Válvula antirretorno		
	DVálvula de drenaxe		
	VVálvula de venteo		
	Válvula de alivio		

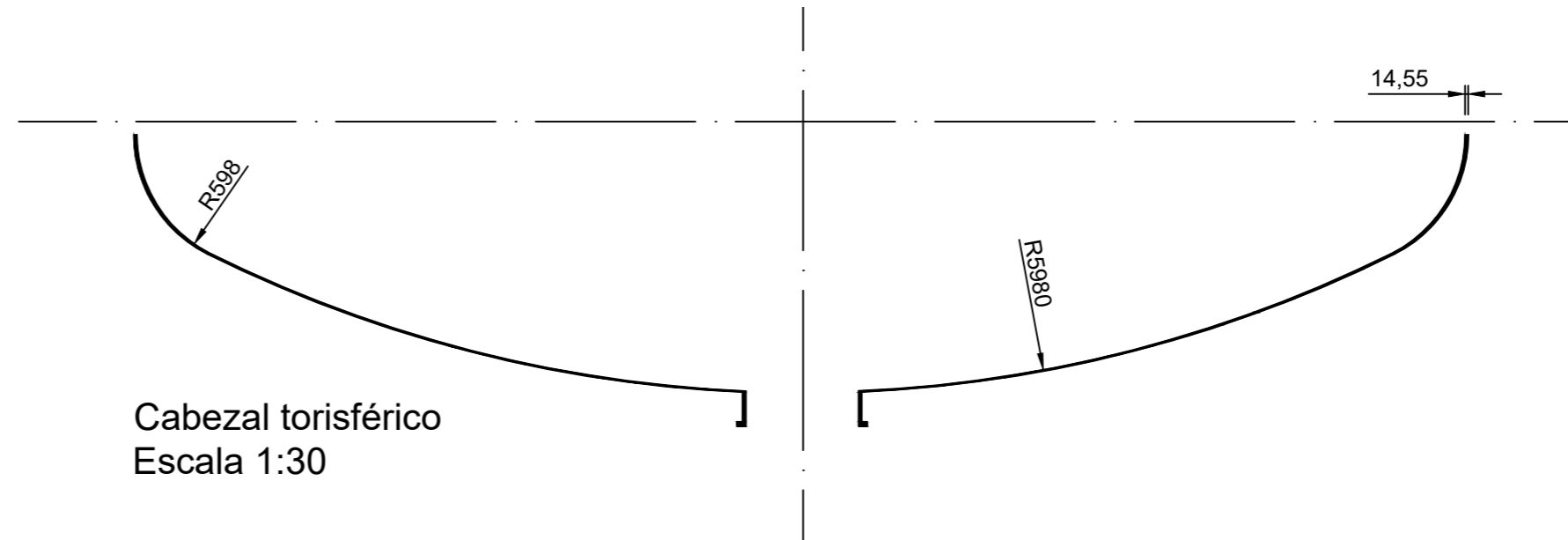
UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO		
<b>DESEÑO BÁSICO DUNHA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CICLOHEXANONA A PARTIR DE FENOL</b>		
AUTORES: RAÚL BONENFANT MUÑIZ ISMAEL FERNÁNDEZ PAZÓ	SINATURAS: 	ESCALA: S/E XULLO 2020
<b>P&amp;ID #2</b>		<b># 5</b>

NOTAS:

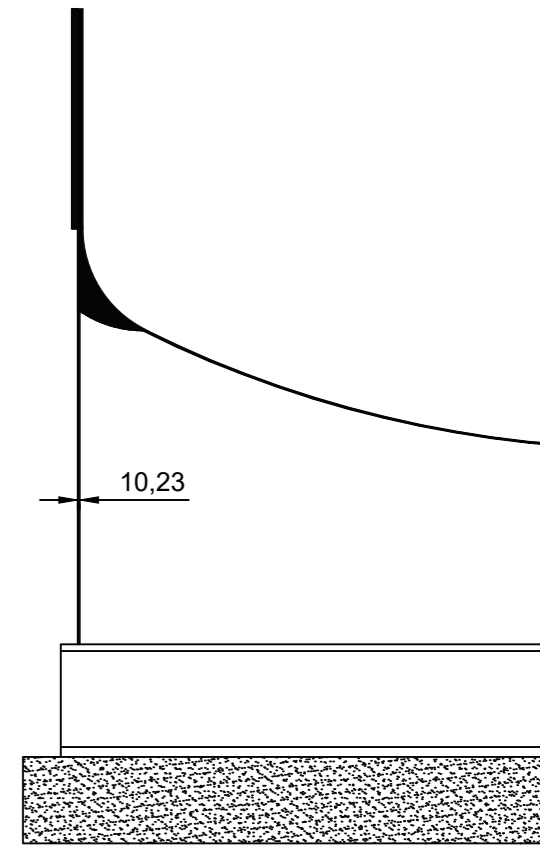
- As unidades das dimensións son mm
- Os materiais de construción están recollidos no Anexo II. Parte I.
- O valor dos espesores son os mínimos obtidos.
- As dimensións do cabezais seguen os valores do fabricante Juenger.



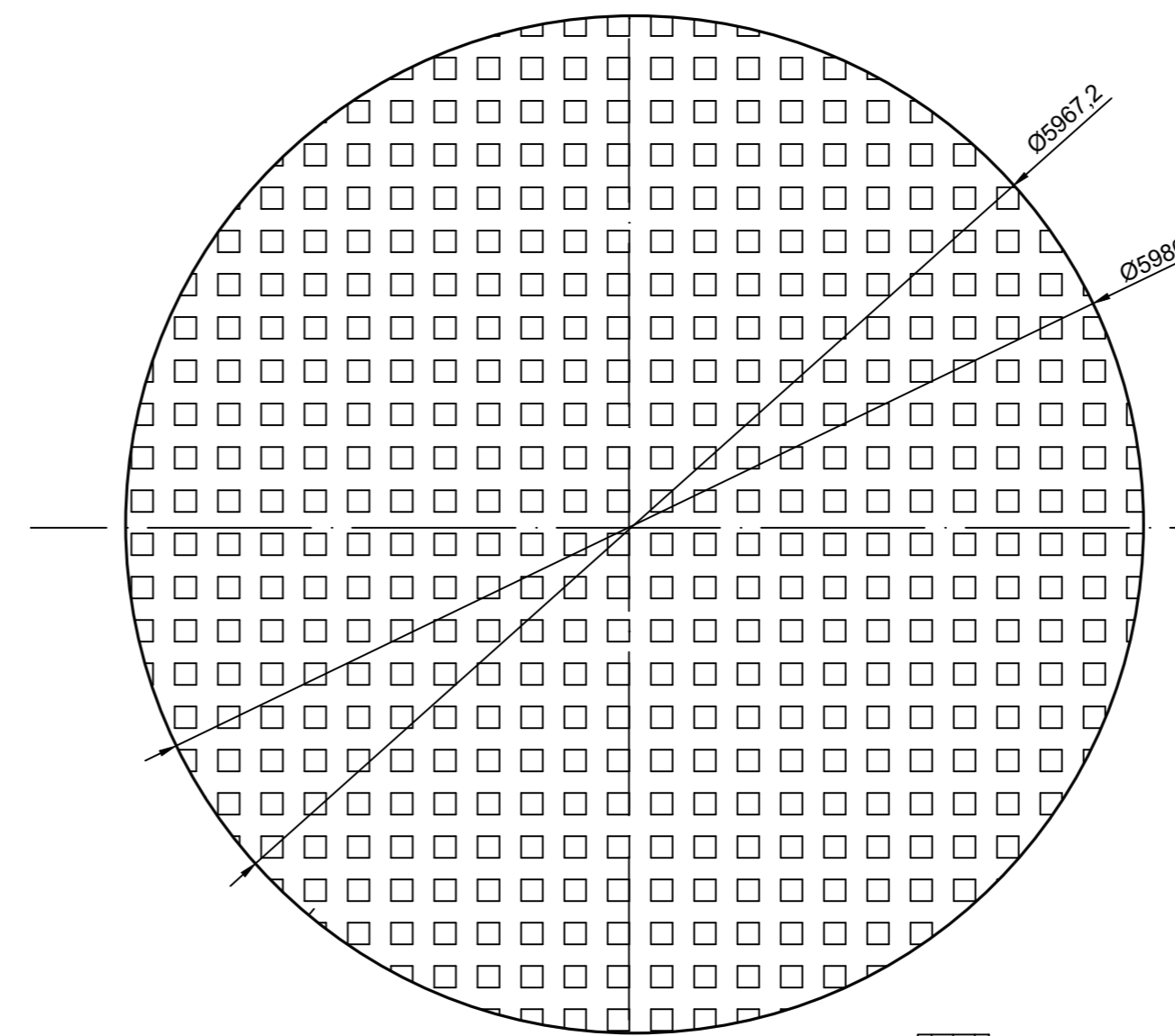
Reactor  
Escala 1:40



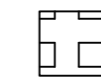
Cabezal torisférico  
Escala 1:30



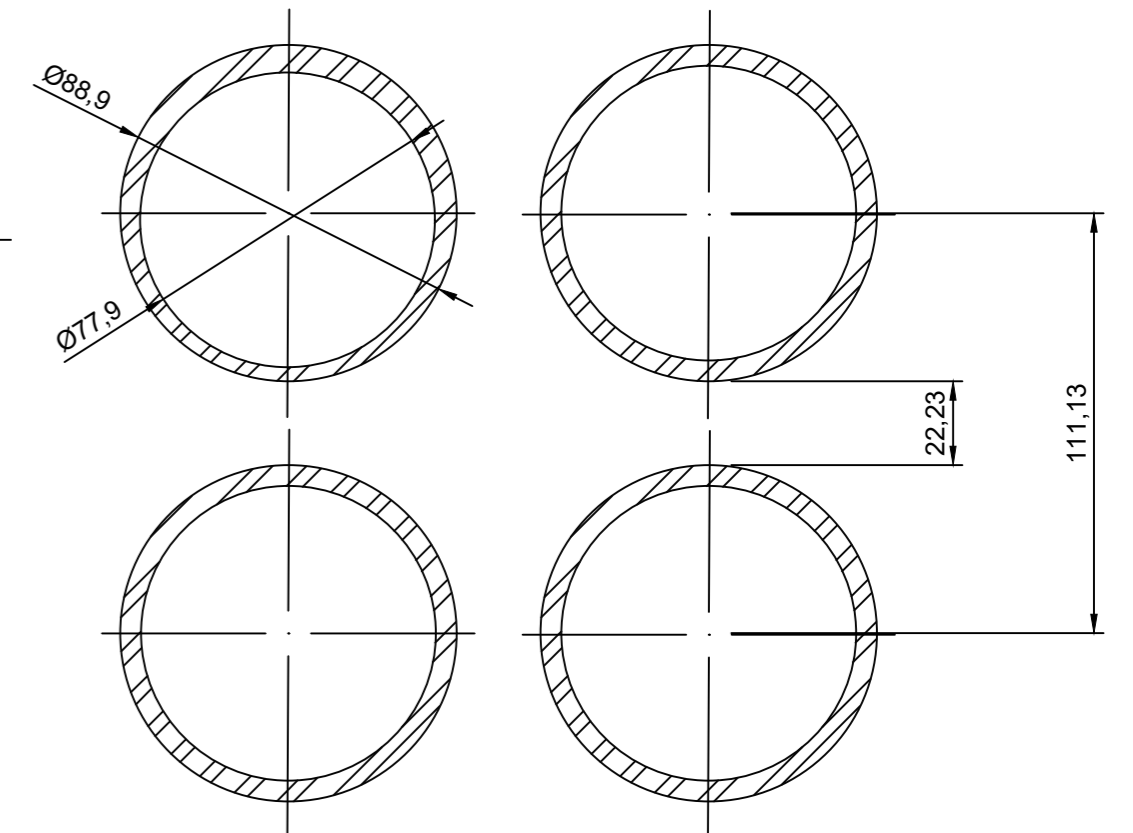
Soporte tipo saia  
Escala 1:40



Corte A-A'  
Escala 1:40

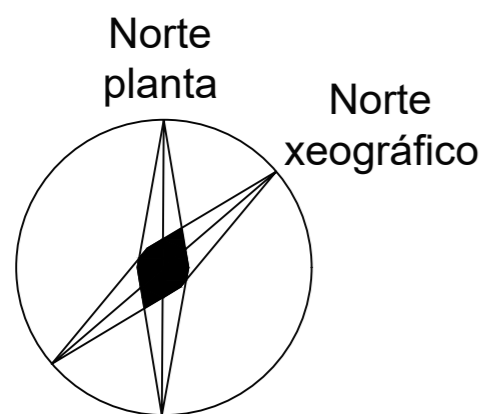


Feixe de tubos



Disposición tubos  
Escala 1:2

LEENDA



- Recheo catalizador
- Espesor parede do reactor

- Espesor tubos
- Espesor illante
- Cimentación soporte tipo saia



UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA  
GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO



DESEÑO BÁSICO DUNHA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CICLOHEXANONA A PARTIR DE FENOL

AUTORES:  
RAÚL BONENFANT MUÑOZ

SINATURAS:

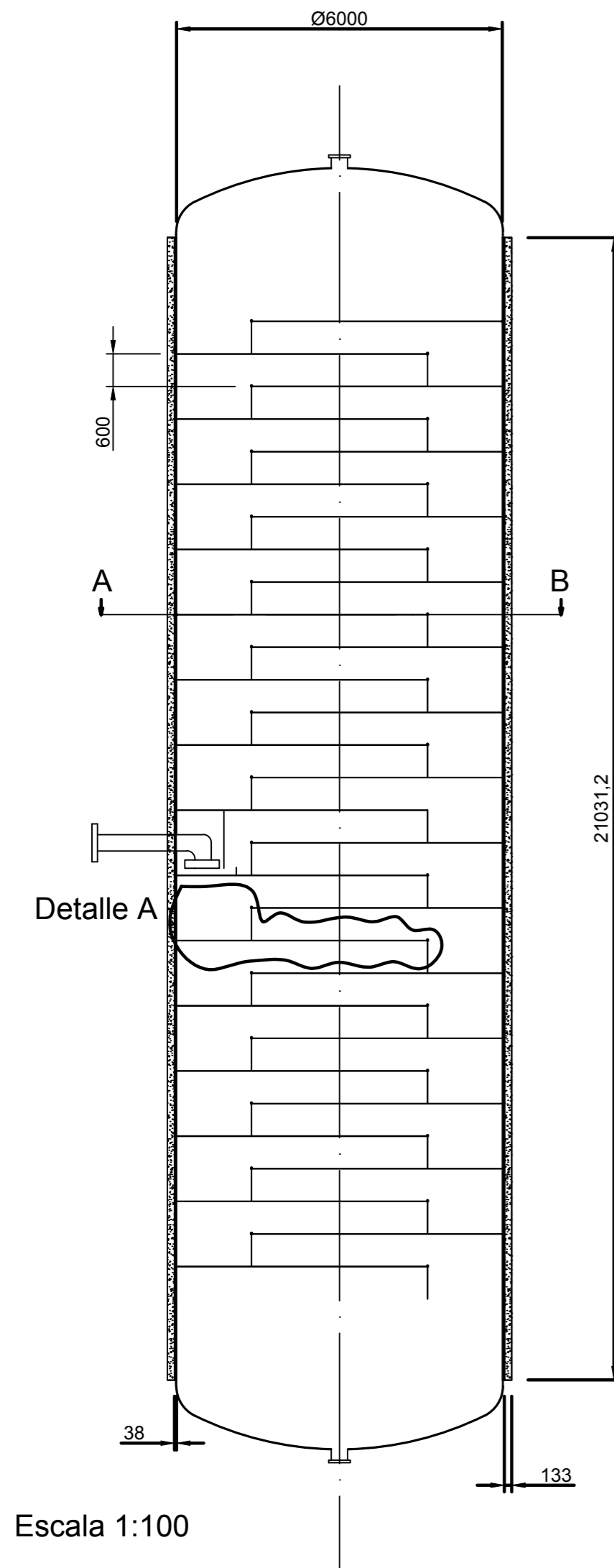


ESCALA: 1 : 500

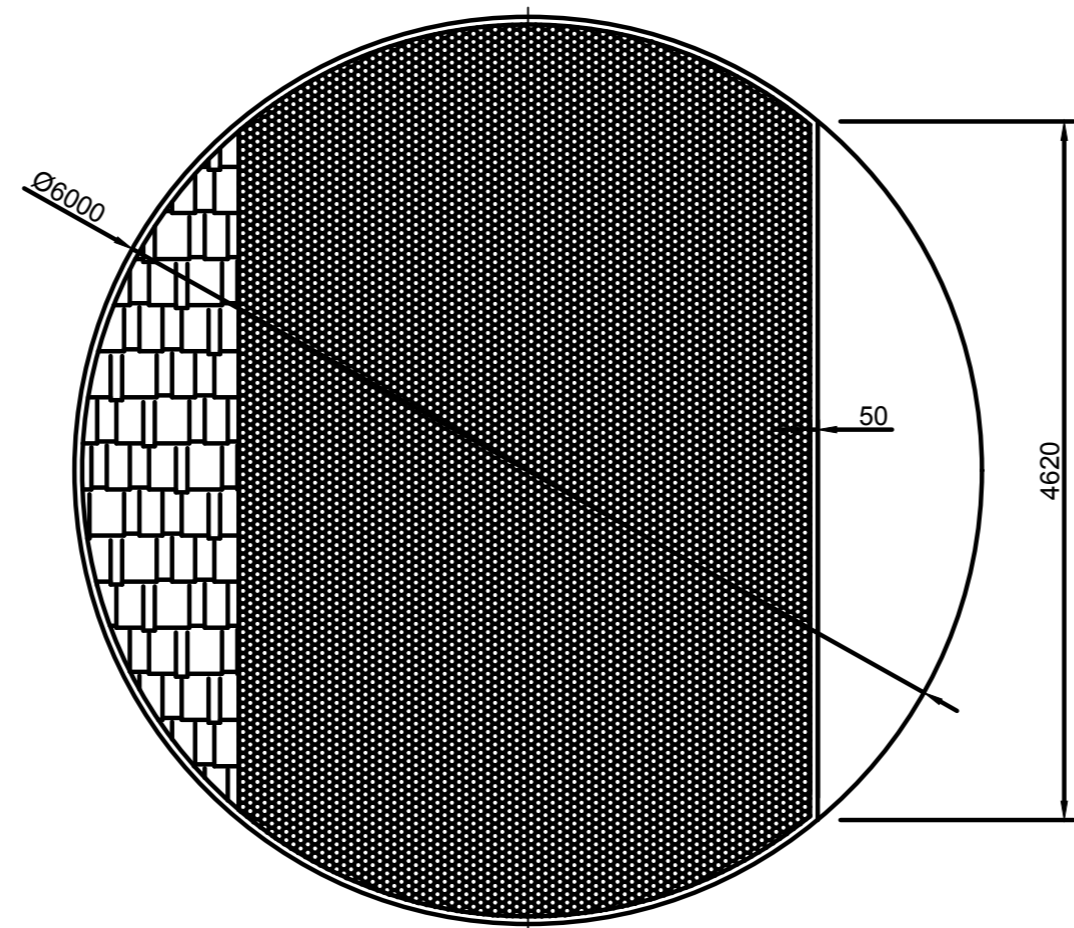
XULLO 2020

PLANO MECÁNICO. DESEÑO REACTOR R-201

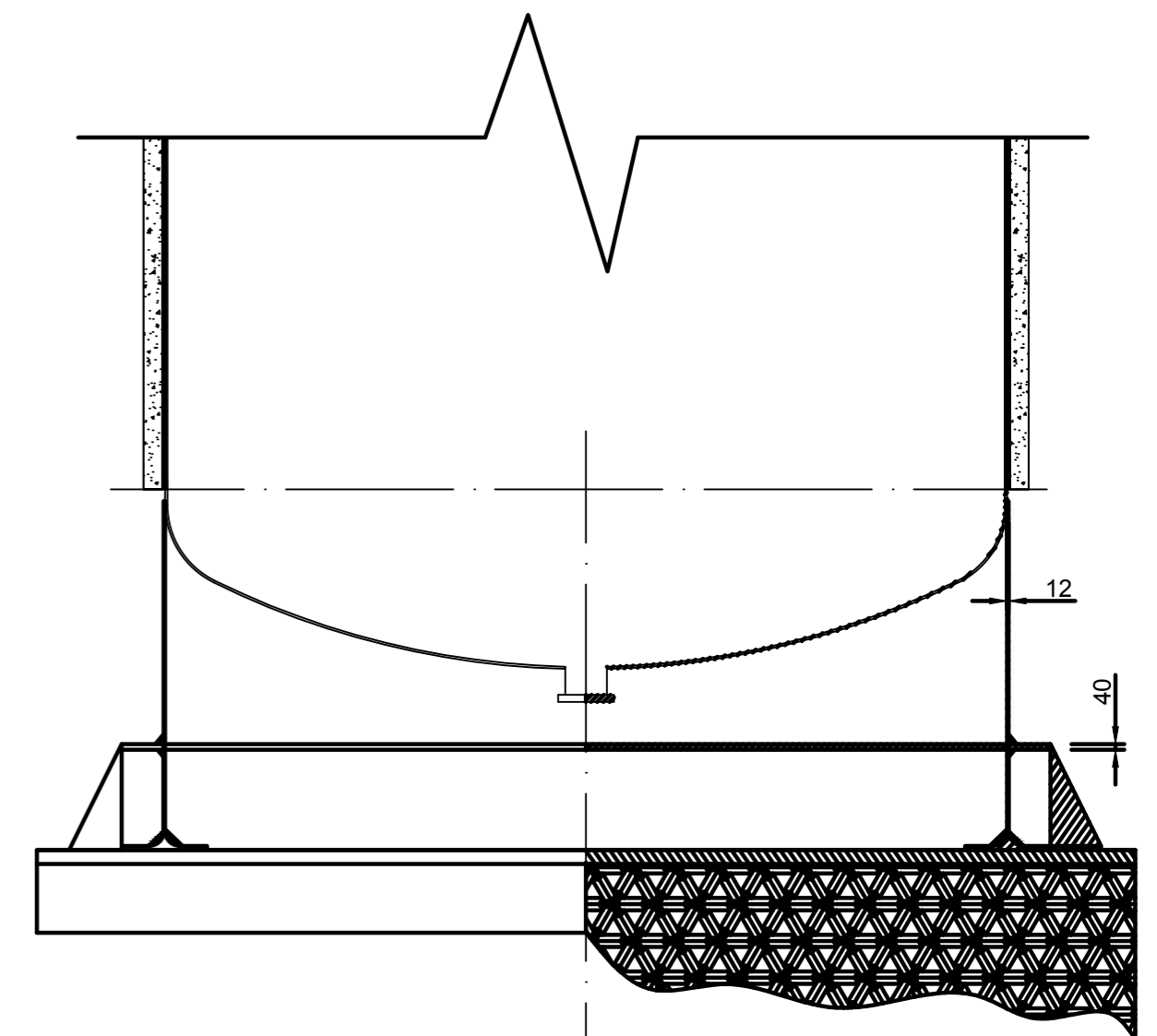
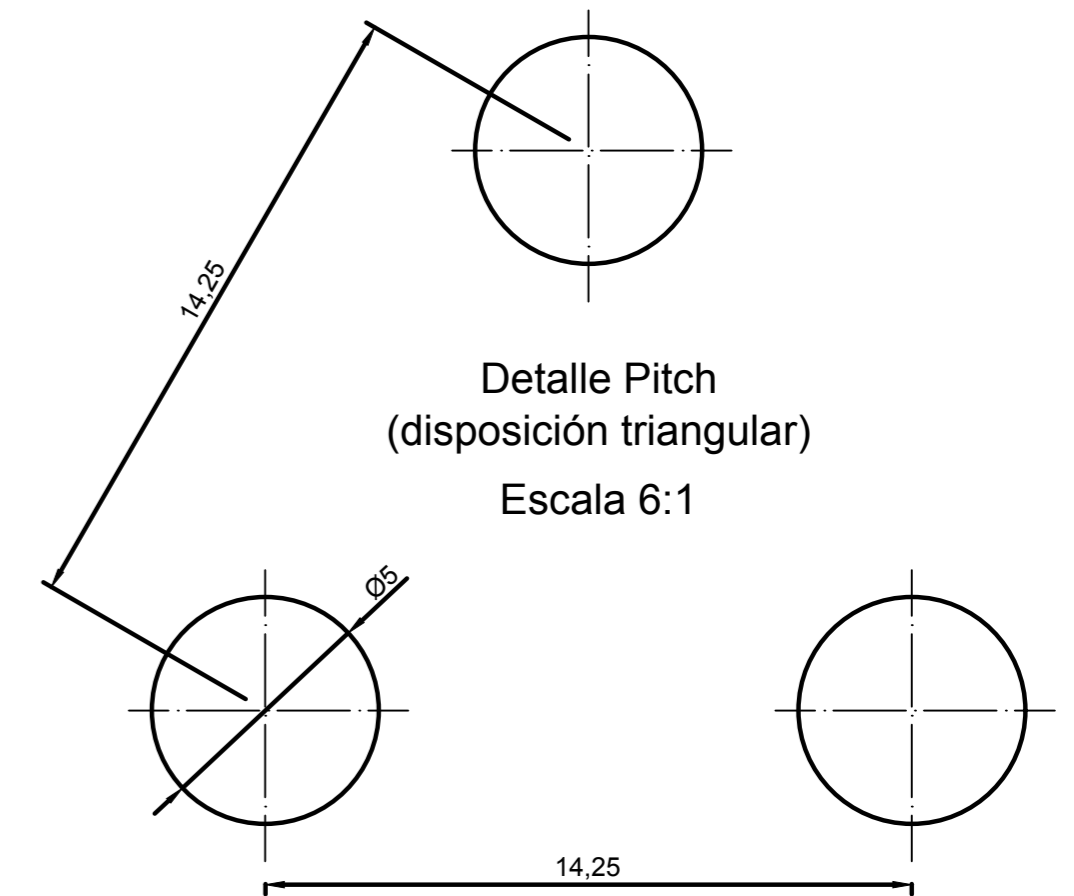
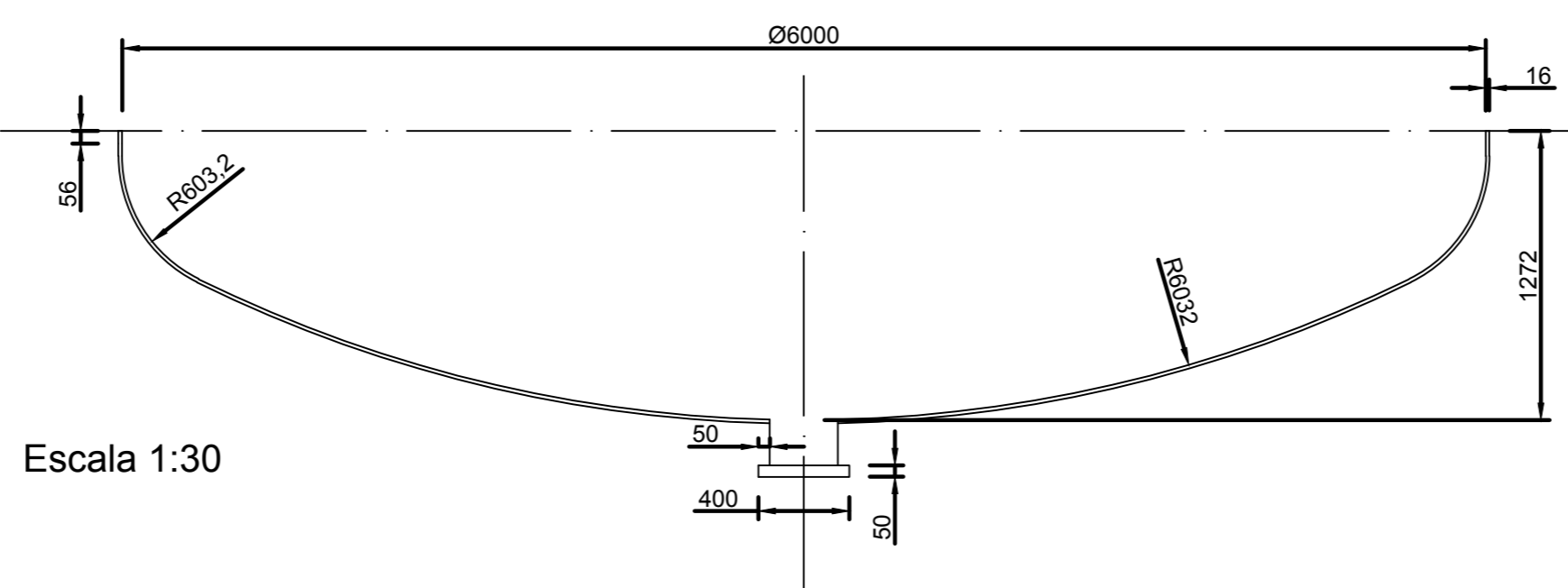
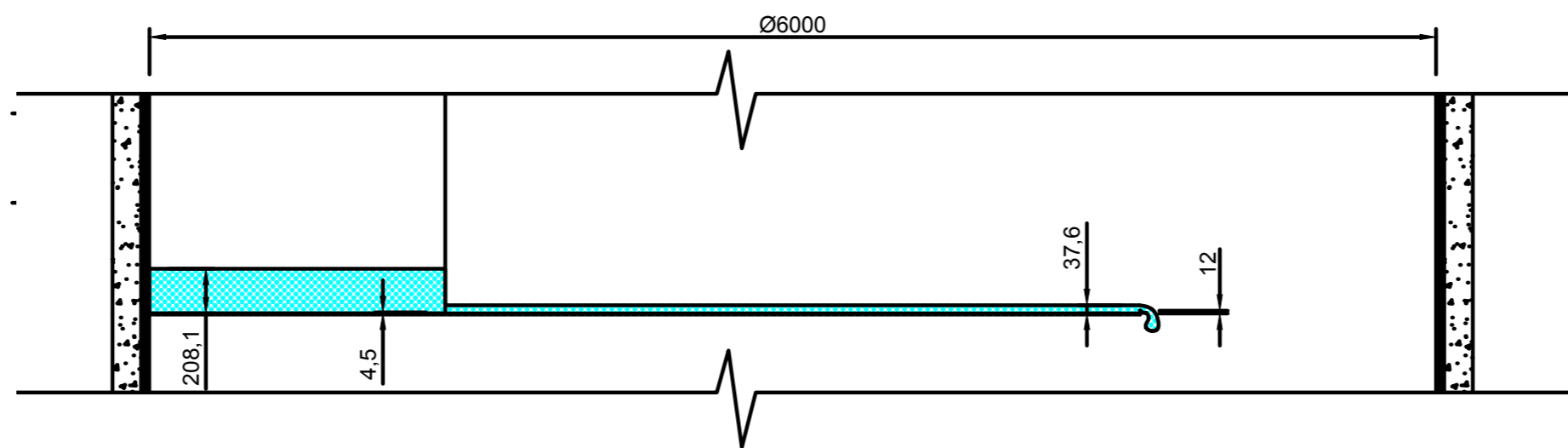
# 6



Corte A-B  
Escala 1:50



Detalle A  
Escala 1:30


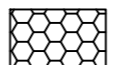









Soporte tipo saia  
Escala 1:50

Notas:

- Todas as dimensións están en milímetros.
- Os espesores indicados no plano son mínimos, o seu valor real nunca poderá ser inferior a este.
- As soldaduras requiren ensaios non destrutivos para garantir a súa calidade.
- Os materiais empregados detállanse no Anexo II do Documento I. Deseño Columna T-301.

LENDA

- |   |                           |   |                           |
|---|---------------------------|---|---------------------------|
|  | Espesor torre. Soldaduras |  | Área perforada prato      |
|  | Zona de calma do prato    |  | Cimentación soporte saia  |
|  | Espesor illante           |  | Nivel de líquido no prato |

 UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO		
DESEÑO BÁSICO DUNHA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CICLOHEXANONA A PARTIR DE FENOL		
AUTOR: ISMAEL FERNÁNDEZ PAZÓ	SINATURA: 	ESCALA: Ver no plano XULLO 2020
DESEÑO MECÁNICO COLUMNA T-301		<b># 7</b>

**DOCUMENTO IV:  
ESTUDOS CON  
ENTIDADE PROPIA**

## Índice Documento IV. Estudos con Entidade Propia

ESTUDO DE IMPACTO AMBIENTAL .....	3
1. DESCRICIÓN DO PROXECTO .....	3
2. EXAME DE ALTERNATIVAS .....	5
2.1. Xustificación da ubicación .....	5
2.2. Xustificación da tecnoloxía .....	6
3. INVENTARIO AMBIENTAL E IDENTIFICACIÓN DE IMPACTOS.....	7
3.1. Aspectos físicos e biolóxicos.....	7
3.2. Ruído .....	9
3.3. Elementos estéticos e culturais .....	10
3.4. Aspectos socio-económicos.....	10
3.5. Matriz de Leopold .....	10
4. MEDIDAS PREVENTIVAS, CORRECTORAS E COMPENSATORIAS.....	12
4.1. Boas prácticas na obra .....	12
4.2. Selección do contratista.....	12
4.3. Medidas para previr emisións á atmosfera e á auga .....	12
4.4. Medidas preventivas para garantir a calidade do aire.....	12
4.5. Medidas para previr os ruídos .....	13
4.6. Medidas para previr accidentes .....	13
4.7. Medidas para previr o impacto paisaxístico .....	13
4.8. Medidas para impulsar o carácter socio-económico.....	13
5. PROGRAMA DE VIXILANCIA AMBIENTAL .....	14
6. CONCLUSIÓNS DO ESTUDO DE IMPACTO AMBIENTAL.....	15
7. BIBLIOGRAFÍA .....	16

## ESTUDO DE IMPACTO AMBIENTAL

### 1. DESCRICIÓN DO PROXECTO

O proxecto presentado no presente Traballo Fin de Grao (TFG) aplícase ao deseño básico dunha planta de produción de ciclohexanona a partir da hidroxenación catalítica do fenol. A capacidade de produción está estimada en 150.000,00 toneladas ao ano, sendo 330 días os que a planta permanecerá operativa. Os restantes días de xornada laboral estarán destinados a etapas de mantemento varias, entre as cales se atopa a rexeneración do catalizador, posto que nun dos reactores emprégase platino (Pt), cuxo custo é moi salientábel.

O documento empregado unicamente como modelo é o proposto no Campus Virtual da Universidade de Santiago de Compostela, no seu curso TFG, do ano 2020 (1).

O proceso para a produción de ciclohexanona a partir de fenol pode acometerse en tres seccións ben diferenciadas, como se reflexa no Documento I. Memoria.

A Sección 100, ou sección de acondicionamento de materias primas, adecúa os reactivos á presión e temperatura que se require na primeira etapa de reacción (Sección 200), para evitar que se formen subprodutos non desexados, garantindo así a conversión íntegra do fenol.

En resumo, o hidróxeno e o fenol, mestúranse a 300 kPa, resultado que se debe quencer ata acadar os 180 °C, temperatura óptima á que ten lugar a reacción.

A Sección 200, ou etapa de hidroxenación catalítica, alberga dúas operacións principais. A primeira delas é a reacción do fenol para dar ciclohexanona e ciclohexanol, sendo a segunda a condensación parcial, para poder separar a totalidade de hidróxeno non convertido; posto que o ratio de alimentación H<sub>2</sub>/fenol é de 3,5.

A Sección 300, ou etapa de deshidroxenación catalítica e separación, podería considerarse a máis completa de todas, non soamente polo número de equipos involucrados nela, senón tamén pola complexidade e o interese que suscita a configuración adoitada.

O ciclohexanol producido no reactor R-201, sito na Sección 200, non é un bo aliado para o proceso, posto que o produto que interesa comercializar é a ciclohexanona. Así, o ciclohexanol introducirase nun segundo reactor, R-301, para obter máis ciclohexanona, mediante unha deshidroxenación catalítica, por medio dun catalizador de ZnO, xerando

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

hidróxeno, que unha vez separado, recíclase cara a alimentación fresca, como o fai de xeito similar o condensador parcial descrito na Sección 200 no parágrafo anterior.

A versatilidade deste proceso é o que se pon de manifesto neste proxecto, podendo así optimizar a cantidade de ciclohexanona producida, diminuindo o contido en ciclohexanol presente no proceso. Deste xeito, todo o produto que sae por colas da columna de destilación a baleiro, T-301, introdúcese no devandito reactor de deshidroxenación. O produto obtido por cabezas, é o produto final, que será adecuado a presión atmosférica e temperatura ambiente, previo ao seu almacenamento.

Para a consecución dos obxectivos plantexados no presente proxecto, debe dispoñerse dunha serie de recursos materiais, como por exemplo os reactantes, indispensábeis para a obtención do produto desexado.

Asemade, tal e como reflicte o Documento II. Planos, será preciso contar con subministro de auga de arrefriamento, dispoñible a 30°C, auga de refrixeración, a 5°C, aceite térmico Dowtherm<sup>®</sup>, así como vapor de auga a baixa, media e alta presión.

Sumado ás utilidades descritas, é necesaria a disposición de fonte de enerxía eléctrica para garantir o funcionamento de bombas, compresores e demais elementos de propulsión de fluídos.

As utilidades en forma de vapor deben obterse en caldeiras de vapor, onde se produzan os mesmos, producindo primordialmente o de alta presión, para logo, mediante turbinas, xerar os dous restantes, obtendo así unha cantidade de enerxía que poderá suscitar e animar á integración enerxética na planta, propiciando así a menor utilización de recursos.

Os impactos ambientais que poden salientar na planta descrita poden resumirse nos seguintes:

- Emisións gasosas: as únicas emisións detectadas son as que derivan das caldeiras de vapor para obter utilidades a baixa, media e alta presión. Para iso, debe producirse unha combustión, emitindo gases de efecto invernadoiro como dióxido de carbono. Se a combustión é deficiente, con pouco contido en osíxeno, o produto emitido á atmosfera sería monóxido de carbono, así como reactivos non reaccionados na combustión, poñendo como exemplo o metano, co fin de nomear algún.
- Ruídos: sen dúbida unha planta química industrial, non concibe a súa existencia sen a existencia de ruídos. Afortunadamente, ao estar situada nun polígono

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

industrial, onde existen multitude de factorías químicas, Cepsa como exemplo relevante, garante que nas inmediacións non existen vivendas para uso particular, polo cal a poboación allea a esta actividade non percibirá tal impacto.

Dentro da planta, este factor contaminante dáse con frecuencia en bombas, compresores e equipos que requiran unha fonte de enerxía externa para o seu funcionamento, debido ao movemento das súas partes móbiles internas. Dentro do posible tentarase emprazar estes equipos en salas habilitadas para a súa mitigación, e cando non sexa posible, atenuación.

- Residuos: tal e como está confeccionado o proceso, non existen correntes de residuos no deseño, no que se refire á produción de ciclohexanona. Non obstante, existe un residuo perigoso que se debe tratar unha vez finalice a súa vida útil. Este residuo nomeado anteriormente é o catalizador cando se atope desactivado, ou aquel porcentaxe do mesmo que non poida ser reactivado e por tanto, recuperado.
- Augas residuais: afortunadamente, non existe no proceso unha corrente de auga residual, polo que este factor non afectaría ao presente proxecto.

## 2. EXAME DE ALTERNATIVAS

### 2.1. Xustificación da ubicación

Facendo referencia ao Documento I. Memoria, onde se xustifica a elección da ubicación de maneira pormenorizada, a parcela industrial destinada á erección da planta é Palos de la Frontera, na provincia andaluza de Huelva.

A decisión que se adoptou tivo como elemento determinante a dispoñibilidade de materia prima nas inmediacións, posto que a factoría de Cepsa no mesmo polígono industrial, enténdese como moi positiva para o subministro de materia prima, o fenol.

Aludindo á situación, atópase nun entorno privilexiado, posto que ao contar con porto, ofrece unha atractiva proposta de cara á internacionalización e comercialización global, concepto que non pode obviarse na economía actual.

Conta con autoestradas e vía férrea para transportar o produto a nivel nacional se existise algunha compañía que produza nylon, posto que actualmente só se conta cunha planta na comunidade valenciana, UBE (2).

A xustificación do emprazamento, baséase en gran medida, na dispoñibilidade de materia prima, referíndose sempre ao fenol, optimizando así os gastos correspondentes ao seu transporte.

## 2.2. Xustificación da tecnoloxía

De igual maneira ao apartado 2.1. do presente Documento IV. Estudo de Impacto Ambiental, no Documento I. Memoria tamén se fai referencia á tecnoloxía empregada.

A esencia do proceso é a hidroxenación catalítica do fenol e posteriormente a separación do ciclohexanol e ciclohexanona, xerando maior cantidade da derradeira mediante deshidroxenación catalítica do ciclohexanol.

Esta tecnoloxía permite dotar á planta dunha gran versatilidade, de acordo á demanda do mercado, podendo adaptarse a unha hipotética venda de ciclohexanol no caso de que as condicións comerciais o fixeran viable.

Para atender á tecnoloxía empregada nun estudo de impacto ambiental como o presente, debe falarse sempre das Melloras Técnicas Disponibles (MTD), posto que as devanditas técnicas definen os valores límite de emisións (VLE), tal e como o pon de manifesto o artigo 3, subapartados 5 e 10 da Directiva 2010/75/UE de 24 de novembro sobre emisións industriais (3) e a súa transposición en España baixo a lei 5/2013 de 11 de xuño pola que se modifica a lei 15/2002 de 1 de xullo e a lei 22/2011 de 28 xullo (4).

As Melloras Técnicas Disponibles (en diante, MTD) forman un compendio de información tecnolóxica dispoñible para a súa utilización, sendo estas as que máis respectuosas son no ámbito das emisións industriais, e polo tanto, co medio ambiente.

Tal e como se describiu no parágrafo anterior, as MTDs son as que definen os límites de emisión, entendendo que a non utilización das mesmas, traduciríase nunhas emisións superiores aos valores límite, posto que estas son as que menos emisións producen, entendéndolas como indispensables, por tanto, para o correcto e óptimo desenrolo industrial da planta deseñada.

As devanditas MTDs recóllense nuns documentos chamados BREFs, que as engloban. Estes documentos son emitidos polo organismo IPPC Bureau, sito en Sevilla (España) a raíz da Directiva Europea sobre emisións industriais (5).

Dentro da tipoloxía dos BREF, poden atoparse multitude de extensos documentos, de xeito que existe neste caso un documento central, o BREF relativo á produción cuantiosa de produtos químicos orgánicos (LVOC, nas súas siglas anglosaxoas).

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Asemade, existen BREFs que se poderían chamar complementarios ou transversais ao anterior, no que se englobarían por exemplo, outras tipoloxías como poderían ser o BREF de eficiencia enerxética, de almacenamento ou de xestión de residuos.

O que se pon de manifesto é que non afecta un único documento na súa totalidade, senón que existen outros BREF que constitúen un complemento indispensable. Deben empregarse todos eles dun xeito coordinado para a consecución dos obxectivos medioambientais desexados, reducindo así as emisións, non superando nunca os seus valores límite establecidos.

Ao abeiro da planta industrial deseñada para o actual TFG, enténdense empregados todos os documentos descritos polas autoridades medioambientais, tanto europeas como nacionais, co fin de xustificar a tecnoloxía seleccionada, non soamente a capacidade técnica de poder levarse a cabo, senón co compromiso medioambiental que cabe esixirille a un proxecto de tal magnitude e singulares características.

### 3. INVENTARIO AMBIENTAL E IDENTIFICACIÓN DE IMPACTOS

Neste apartado pretende ofrecerse información acerca dos escenarios que poden verse afectados pola construción e posterior operación derivados do deseño básico da planta de produción obxecto deste traballo fin de grao.

Existen diversos factores que se porán de manifesto, tales como os aspectos físicos e biolóxicos da zona, o ruído, cuestións de índole estético e por suposto os socio-económicos.

Finalmente, a valoración dos impactos ofrecerase mediante unha Matriz de Leopold, simplificada iso si, para ofrecer a valoración cuantitativa da viabilidade económica do proxecto.

#### 3.1. Aspectos físicos e biolóxicos

##### - Clima

Atendendo ao descrito no apartado 6.2. do Documento I. Memoria, móstrase na Táboa 1 os datos climáticos correspondentes á Táboa 8 do devandito apartado.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 1. Datos climáticos da estación meteorolóxica de Huelva, Ronda Leste. Fonte: (6)

Mes	T	Tmax	Tmin	R	H	DR	DN	DT	DF	DH	DD	I
Xaneiro	11.0	16.2	5.9	71	77	7.1	0.0	0.6	1.4	0.9	-	165
Febreiro	12.4	17.8	7.0	50	74	5.5	0.0	0.5	2.3	0.3	-	171
Marzo	14.7	20.7	8.8	38	68	4.3	0.0	0.7	1.6	0.0	-	229
Abril	16.1	22.0	10.3	48	65	6.0	0.0	1.0	0.5	0.0	-	255
Maio	19.2	25.2	13.2	29	62	3.8	0.0	0.8	0.7	0.0	-	296
Xuño	22.8	29.0	16.6	8	57	1.1	0.0	0.1	0.1	0.0	-	341
Xullo	25.8	32.7	18.9	3	51	0.2	0.0	0.2	0.1	0.0	-	366
Agosto	25.8	32.4	19.1	4	55	0.4	0.0	0.3	0.2	0.0	-	340
Setembro	23.4	29.4	17.3	26	61	2.4	0.0	0.6	1.1	0.0	-	268
Outubro	19.5	24.9	14.1	68	69	6.4	0.0	1.0	1.3	0.0	-	211
Novembro	14.9	20.0	9.8	79	73	6.3	0.0	0.9	0.9	0.0	-	176
Decembro	12.3	16.9	7.6	99	78	7.9	0.0	1.4	1.9	0.5	-	151
<b>Anual</b>	<b>18.2</b>	<b>23.9</b>	<b>12.4</b>	<b>525</b>	<b>66</b>	<b>51.5</b>	<b>0.0</b>	<b>7.8</b>	<b>12.3</b>	<b>1.8</b>	<b>-</b>	<b>-</b>

Como se pode extraer destes datos, as temperaturas son suaves durante todo o inverno, chegando a veráns substancialmente cálidos.

### - Calidade do aire

Sempre se debe garantir que a calidade do aire circundante ao polígono, e sobre todo o derivado da construción e operación da planta cumpre coa lexislación vixente.

Neste senso, será de aplicación a Lei 34/2007, de 15 de Novembro, relativa á calidade do aire e protección da atmosfera (7) así como o Real Decreto 102/2011, de 28 de xaneiro, relativo á mellora da calidade do aire (8).

Serán de obrigado cumprimento, polo tanto, os valores que dita Lei e R.D. expoñen, non podendo nunca ser superados estes límites impostos.

### - Flora e fauna

Para atender a este apartado, consúltase a Rede Natura 2000, para determinar se é de aplicación a súa normativa.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

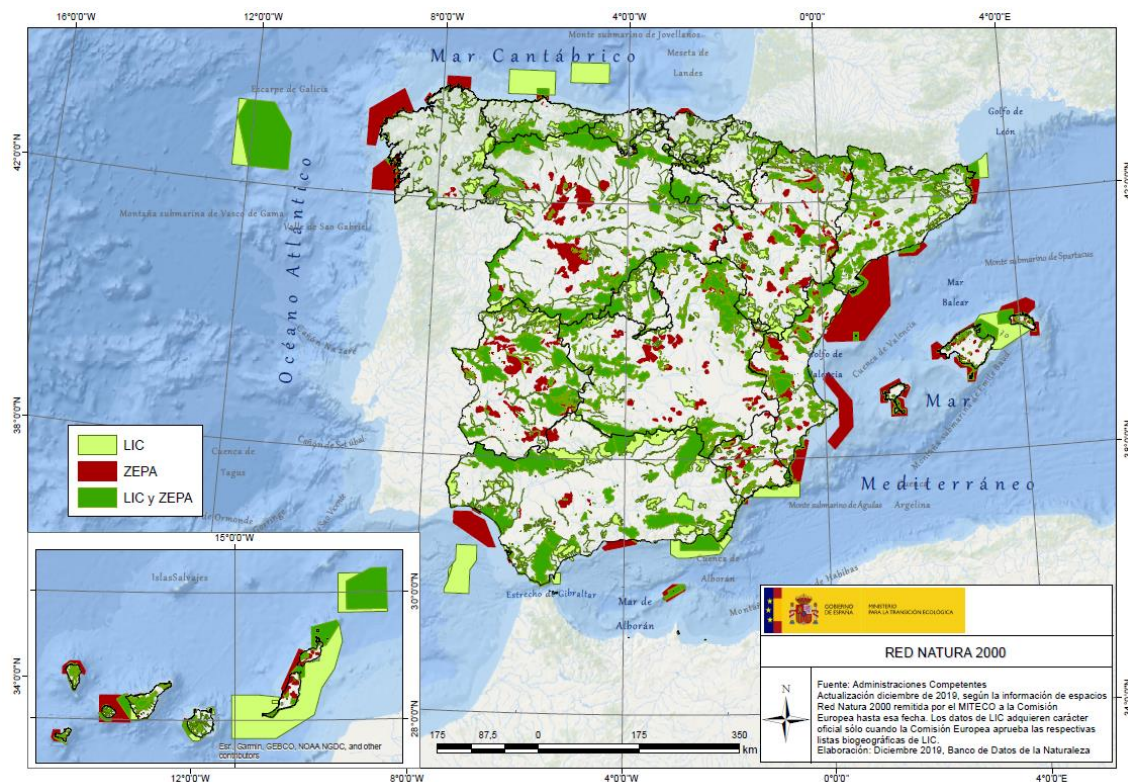


Figura 1. Mapa de Rede Natura 2000. Fonte: MITECO

Na Figura 1 móstrase un mapa correspondente ao programa Rede Natura 2000, polo que se identifica inequivocamente o área de acción da planta industrial de Palos de la Frontera, como zona LIC e ZEPAs, onde as siglas corresponden a Lugar de Importancia Comunitaria e Zona de Especial Protección para as Aves (9).

Isto débese á situación do Parque Nacional de Doñana, situado a escasos quilómetros do Polígono Industrial escolleito.

### 3.2. Ruído

Existe lexislación ao respecto. A Lei 27/2003, de 17 de novembro, relativa ao ruído, define e desenvolve as medidas que se tomarán para previr ou mitigar o impacto deste factor (10).

Tal e como se comentou ao inicio do documento, a situación privilexiada da planta, nun polígono industrial onde existen multitude de factorías, moitas delas de índole químico, garante a non existencia de habitantes nos arredores, polo cal o efecto que poida causar este impacto é mínimo, cando non inexistente.

### 3.3. Elementos estéticos e culturais

A colación do exposto no apartado 3.2. Ruído, a situación nun polígono industrial non supón, enténdese, ningún impacto estético e cultural relevante, posto que o polígono xa se atopa funcionando con parcelas libres para seren adquiridas, caso que ocorre no presente proxecto.

Deste xeito, ao tratarse dun polígono industrial, o impacto é mínimo ou inexistente, ao estaren adaptadas as instalacións para tal efecto.

### 3.4. Aspectos socio-económicos

Os datos máis relevantes acerca do núcleo de Palos de la Frontera móstranse na Táboa 2.

Táboa 2. Datos socio-económicos de Palos de la Frontera. Fonte: (11)

Parámetro	Valor
Habitantes	11.289
Paro rexistrado (%)	13,76
Nº contratos indefinidos	358
Nº contratos temporais	31.284
Extensión (km <sup>2</sup> )	49,12
Distancia á capital (km)	12,7

Resulta moi salientable o número de contratos temporais existentes, da orde de cen veces maior con respecto ao de contratos indefinidos.

Neste senso, a construción e operación da planta de produción de ciclohexanona é máis que xustificadamente positivo, posto que na industria química, o número de contratos indefinidos é moi elevado, xustamente para evitar problemas de seguridade intrínsecos á inestabilidade laboral.

### 3.5. Matriz de Leopold

Matriz de impactos tendo en conta a súa magnitude e importancia, mostrada na Figura 2.

Diseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

PROJECT ACTIONS			CONSTRUCTION										OPERATION AND MAINTENANCE										Nº POSITIVE INDICATORS	Nº NEGATIVE INDICATORS	IMPACT BY SUBCOMPONENT	IMPACT BY COMPONENT	TOTAL IMPACT OF THE PROJECT
			Tree felling and clear		Land conditioning		Soundations and structures		Work intallations		Traffic of heavy vehicles		Land occupation		Waste water purification		Emissions to atmosphere		Traffic of vehicles		Maintenance						
ENVIRONMENTAL FACTORS			M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	
Assessment criteria			M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	
PHYSICAL	SOIL	Erosion rate	-1	2	-2	1					-4	2	-1	1											0	4	
		Structures	-2	1	-2	1	-3	1																		0	3
	ATMOSPHERE	Air Quality	-2	2	-1	2					-3	2	-2	1			-3	3	-3	3			-2	1	0	7	
		WATER	Turbidity			-1	1							-1	2											0	2
	Toxicity				-2	1							-2	1			-3	1	-1	2					0	4	
	LANDSCAPING	Quality	-4	1							-1	2	-3	1			-2	1	-2	3					0	5	
BIOLOGICAL	FLORA	Structure and composition	-3	3	-1	2							-1	1											0	3	
		Habitat	-2	1	-1	2							-2	3			-4	1							0	4	
	FAUNA	Habitat	-2	2	-2	1							-1	1			-4	1							0	4	
SOCIO ECONOMICAL	POPULATION	Migration	2	3					4	5									3	1	3	2			4	0	
	TERRITORY	Land usage	1	2					3	3							5	5	2	1					4	0	
	ECONOMY	Employment generation	4	3					4	3							5	4	5	5	5	5			5	0	
	CULTURE	Archaeological site											1	1			-2	1							1	1	
INDICATORS with POSITIVE MAGNITUDE			3	0	0	3	0	1	0	0	2	3	2	14													
INDICATORS with NEGATIVE MAGNITUDE			7	8	1	0	3	8	0	6	3	0	1													37	
PRODUCTS ADDITION (M x I)			-7	-15	-3	41	-16	-17	0	-24	28	30	29													46	

Figura 2. Matriz de Leopold. Matriz de impactos ambientais. Fonte: Elaboración propia

## 4. MEDIDAS PREVENTIVAS, CORRECTORAS E COMPENSATORIAS

### 4.1. Boas prácticas na obra

Deberá esixirse o cumprimento das boas prácticas no lugar da obra, tanto na fase de construción como na de operación e posteriormente desmantelamento da planta.

En concreto, na fase de construción, a meirande parte da contaminación débese ao deficiente mantemento da maquinaria industrial. Esta deficiencia no mantemento implica, entre outras cousas, unha maior emisión de gases contaminantes, maior dano para o subsolo, entre outras.

### 4.2. Selección do contratista

Esixirase a disposición e visto favorable por parte dunha axencia de certificación, de estar en posesión do certificado de calidade ISO 9001:2015, condición sine qua non para poder optar á realización das obras.

Esta decisión adóitase para garantir que se cómpren as mínimas disposicións de seguridade na operación, respectando de xeito inherente as disposicións ambientais vixentes.

### 4.3. Medidas para previr emisións á atmosfera e á auga

No relativo ás medidas para previr emisións tense en conta a MTD dispoñible a tal efecto (12).

No devandito texto, ponse de manifesto na súa MTD no.1 a importancia de dispor dun inventario de emisión de gases á atmosfera. Isto posúe todo o sentido, posto que para previr o que se emiten, primeiro deberá coñecerse a cantidade susceptíbel de emisión.

### 4.4. Medidas preventivas para garantir a calidade do aire

A lexislación aplicábel (7) indica os límites máximos de emisión, polo que todas as medidas preventivas, como filtros e instrumentos que impidan a emisión de límites superiores, deberán cumprir cos valores citados na xa nomeada lei.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

#### 4.5. Medidas para previr os ruídos

Como xa se comentou no apartado 1 do presente Documento IV, non se consideran demostrados os impactos relativos ao ruído ao tratarse dun polígono industrial onde non hai habitantes na área circundante.

Sen embargo, será de aplicación a Lei 37/2003, relativa ao ruído (10).

#### 4.6. Medidas para previr accidentes

Este epígrafe consta dunha amplitude considerable, polo que co obxecto de resumilo e que sexa comprensíbel, afirmouase que será de aplicación toda a lexislación relativa a riscos laborais.

En materia de prevención de riscos laborais, a Lei 31/1995, de 18 de novembro, de prevención de riscos laborais (13) constitúe o marco de referencia, sobre o que suscita cumprimento dunha serie de Leis e Reais Decretos relativos á materia en cuestión. Por exemplo, no ámbito de servizos de prevención, de manexo de substancias químicas perigosas, entre outras.

A factoría contará cun titulado en Prevención en Riscos Laborais, así como a existencia de cada subcontrata que realice as súas labores encomendadas, de dispoñer dun recurso preventivo, que velará polo cumprimento das esixencias en materia laboral en todo momento.

#### 4.7. Medidas para previr o impacto paisaxístico

Xa quedou de manifesto que ao tratarse dun polígono industrial o lugar onde se erixirá a planta de produción de ciclohexanona, o impacto é nulo, posto que é unha zona dedicada única e exclusivamente á actividade industrial.

Sen embargo, no caso de precisárense accións para paliar este tipo de impacto, farase canto sexa necesario para o bo desenvolvemento da actividade industrial.

#### 4.8. Medidas para impulsar o carácter socio-económico

Sen dúbida un dos máis importantes. É ben coñecido a mala reputación e malos ollos cos que se ve á industria química en xeral, aínda que moitas veces por mero descoñecemento. Ao estar clasificada como Seveso, debe existir unha formación en materia de prevención e evacuación á poboación afectada, para saber como actuar no caso de que ocorra (desafortunadamente), algún tipo de accidente que poida afectar ao núcleo urbano.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

A mellor acción preventiva é a información e a formación, para paliar o descoñecemento, posto que canto máis informado se está, menos medo ou refutación se xera.

### 5. PROGRAMA DE VIXILANCIA AMBIENTAL

O Anexo VI da Lei 21/2013, de 9 de decembro, relativa á avaliación ambiental (14) esixe un programa de vixilancia ambiental para garantir o cumprimento das medidas correctoras, indicando a periodicidade e mecanismo polo cal se garantizará o descrito nas liñas predecesoras. Non deixa de ser unha garantía do bo funcionamento das medidas correctoras.

Para levalo a cabo enténdese indispensable a disposición de medios suficientes, tanto humanos como técnicos. É dicir, non tería sentido promover a implantación dun sistema de vixilancia ambiental sen ter profesionais e medios técnicos suficientes.

O programa de vixilancia no presente estudo pretende ser gráfico e visual, para o que se diseña unha táboa, a Táboa 3, para ilustrar os parámetros que se vixiarán durante a vixencia do citado programa, así como a periodicidade coa que se realizarán as pertinentes medicións ou obtención de resultados.

Táboa 3. Resumo da implementación do Programa de Vixilancia Ambiental (PVA). Fonte: Elaboración propia

Parámetro	Control	Periodicidade
Calidade do ar	Analizadores partículas, concentración	Continuamente. Este parámetro goza dunha relevancia moi elevada
Clima	Temperatura, precipitacións	Semanalmente, para garantir que a operación non afecta ao clima
Ruído	Instrumentos para cuantificar os decibelios (dB) emitidos por unha actividade en concreto	Discretamente no momento de realización dunha determinada tarefa que poida ser susceptible de superar o umbral permitido.
Calidade da auga*	Medición de DQO e DBO	Semanalmente

\*O control da calidade da auga realízase tomando mostras nos aledaños para previr calquera tipo de fuga, garantindo así a súa detección, posto que como xa se expuxo, non existen correntes de augas residuais que haxa que tratar

## 6. CONCLUSIÓNS DO ESTUDO DE IMPACTO AMBIENTAL

Ao abeiro da realización do estudo de impacto ambiental exposto no Documento IV. Estudos con entidade propia do presente proxecto cabe destacar o que se detalla a continuación.

A realización dunha obra e posterior operación dunha planta industrial, trae consigo unha gran cantidade de aspectos negativos para a fauna, flora, solo e clima. Sen embargo, os devanditos factores vense compensados pola xeración de emprego e multitude de factores socio-económicos valorados moi positivamente.

O resultado do estudo conclúe, tal e como se expón na Matriz de Leopold, ilustrada na Figura 2. cun coeficiente global positivo, polo que o estudo ambiental íntegro tería un carácter positivo, sen ir en detrimento dos factores negativos que iso supón.

Posteriormente, cabe resaltar que sempre que se cumpra a lexislación na materia sinalada, por exemplo no relativo a ruídos, calidade do aire, riscos laborais, así como as directivas europeas que fan referencia aos BREFs e polo tanto ás MTDs, estaranse cumprindo os valores límite de emisións, polo que se actuaría de acordo co marco lexislativo pertinente e aplicábel.

Con carácter xeral, enténdese que os aspectos negativos que engloban o presente estudo se mitigan, corríxen ou compensan coas medidas preventivas levadas a cabo, garantindo o seu bo funcionamento mediante a disposición do plan de vixilancia medioambiental citado no apartado 5. do Estudo de impacto ambiental comprendido dentro do presente Documento IV. Estudos con entidade propia.

## 7. BIBLIOGRAFÍA

1. OROL, A. et al. *Estudo do Impacto Ambiental na Produción de Ácido Sulfúrico – Porto de Bilbao*. Santiago de Compostela, 2014. [Empregado como modelo de elaboración segundo o recomendado no Campus Virtual da Universidade de Santiago de Compostela]
2. UBE CORPORATION EUROPE. *UBE celebró el 50 aniversario de su planta de caprolactama de Castellón (España)* [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: <https://www.ube.es/ES/noticias/noticia.php?id=42>
3. PARLAMENTO EUROPEO. *Emisións Industriais* [en liña]. 2010. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/ES/TXT/PDF/?uri=CELEX:32010L0075&from=ES>
4. GOBERNO ESPAÑOL. *Lei 5/2013 de 11 de xuño*. [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: <https://www.boe.es/boe/dias/2013/06/12/pdfs/BOE-A-2013-6270.pdf>.
5. MINISTERIO PARA A TRANSICIÓN ECOLÓXICA E O RETO DEMOGRÁFICO (MITECO). *Documentos BREF*. [en liña]. [Consultado Xuño 2020]. Dispoñible en: <https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/medio-ambiente-industrial/prevencion-y-control-integrados-de-la-contaminacion-ippc/mejores-tecnicas-disponibles-mtd/BREF.aspx>.
6. AXENCIA ESTATAL DE METEOROLOXÍA (AEMET). *Valores climatolóxicos normais. Huelva, Ronda Este*. [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: <http://www.aemet.es/es/serviciosclimaticos/datosclimatologicos/valoresclimatologicos/?l=4642E&k=undefined>.
7. GOBERNO DE ESPAÑA. B.O.E. *Ley 34/2007, de 15 de novembro, de calidade do aire e protección da atmosfera*. [En liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: <https://www.boe.es/buscar/pdf/2007/BOE-A-2007-19744-consolidado.pdf>.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

8. —. GOBERNO DE ESPAÑA. B.O.E. *Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire*. [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: <https://www.boe.es/buscar/pdf/2011/BOE-A-2011-1645-consolidado.pdf>.

9. . MINISTERIO PARA A TRANSICIÓN ECOLÓXICA E O RETO DEMOGRÁFICO. *La Red Natura 2000 en España*. [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: [https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000/rn\\_espana.aspx](https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000/rn_espana.aspx).

10. GOBERNO DE ESPAÑA. B.O.E. *Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido*. [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: <https://www.boe.es/buscar/pdf/2003/BOE-A-2003-20976-consolidado.pdf>.

11. JUNTA DE ANDALUCÍA. *Instituto de Estadística y Cartografía*. [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: <http://www.juntadeandalucia.es/institutodeestadisticaycartografia/sima/ficha.htm?mun=21055>.

12. DIARIO OFICIAL DA UNIÓN EUROPEA. *Decisión de Ejecución (UE) 2018/1147 de la Comisión. MTD sobre tratamiento de residuos*. [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en: <http://www.prtr-es.es/Data/images/DECISIONDEEJ>

**DOCUMENTO V:  
ORZAMENTO**

## ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN E OBXECTIVO .....	3
2. ACTUALIZACIÓN DE PREZOS .....	3
3. CÁLCULO DO CUSTO DOS EQUIPOS .....	5
4. CÁLCULO DO ORZAMENTO .....	9
4.1. Partidas descompostas .....	10
5. ORZAMENTO GLOBAL .....	13
6. BIBLIOGRAFÍA .....	14

## 1. INTRODUCCIÓN E OBXECTIVO

O presente Documento V ten como obxectivo proporcionar un valor numérico en relación ao custo do proxecto da planta de produción de ciclohexanona a partir de fenol.

Existen innumerables metodoloxías para a obtención da inversión inicial necesaria para levar a cabo o proxecto, todas elas coas súas particularidades, sendo o método factorial o que se empregará no Documento V: Orzamento.

O método baséase en determinar o custo dos equipos e a través dese valor, obter o resto de partidas das que se compón o orzamento (1).

Dentro do método factorial vense comprendidos a totalidade dos conceptos existentes na implantación e posta en marcha dunha planta industrial. Así, a partir da determinación do custo dos equipos (Apartado 3. CÁLCULO DO CUSTO DOS EQUIPOS) obteranse o resto de conceptos que conformarán a inversión inicial.

Os custos directos que engloba esta metodoloxía son: a instalación do equipo, a rede de tuberías, os equipos de instrumentación e control, a instalación eléctrica, a estimación dos custos de utilidades, *off-sites*, edificios, posta a punto (1).

En canto aos indirectos, quedarían englobados por: deseño e enxeñaría, fondo para continxencias (1).

Por último quedaría o capital circulante, que comprende, por exemplo, o inventario que está en proceso, salarios, etc. Comprende unha cantidade para poder facer fronte a gastos presentes na planta, como poder asumir os pagos a provedores e o equipo humano, entre outros (1).

## 2. ACTUALIZACIÓN DE PREZOS

Os datos dispoñibles na bibliografía proporcionan valores notablemente obsoletos. Para corrixir estas cantidades, debe actualizarse ao prezo actual, dentro do posible, para ter un coñecemento sensiblemente máis realista (1).

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

A actualización lévase a cabo mediante a ecuación 1 (1):

$$\frac{C_1}{C_2} = \frac{\text{Índice}_1}{\text{Índice}_2} \quad (1)$$

Sendo,  $C_1$ : custo do equipo no ano 1 (€)

$C_2$ : custo do equipo no ano 2 (€)

Índice<sub>1</sub>: índice correspondente ao custo no ano 1

Índice<sub>2</sub>: índice correspondente ao custo no ano 2

Os custos proporcionados pola bibliografía proposta por R. Sinnott e G. Towler fan referencia a un Índice<sub>1</sub> (2006): 478,6 (2).

O índice máis actualizado do que se dispón no momento de realización do proxecto é un Índice<sub>2</sub> (Xuño 2019): 609,5 (3).

Empregando a ecuación 1 e substituíndo os datos dos índices 1 e 2, obtense a expresión mostrada na ecuación 2 e que servirá para actualizar o prezo de tódolos equipos no momento de calculalos no apartado 3 do presente documento.

$$C_2 = \frac{609,5 * C_1}{478,6} \quad (2)$$

Onde,  $C_2$ : custo do equipo actualizado (€)

$C_1$ : custo do equipo sen actualizar (€)

En canto á divisa empregada, a bibliografía proporciona os datos en dólares estadounidenses (USD), de xeito que se deben transformar á divisa correspondente á aquela onde está erixida a planta, isto é, euros (EUR).

Para tal cometido, emprégase un conversor de divisas, obtendo que na data de consulta, 1 EUR = 1,12925 USD (4).

### 3. CÁLCULO DO CUSTO DOS EQUIPOS

O método factorial baséase na utilización dun factor S, que é a capacidade que admite o devandito método en diversas unidades. Estes valores deberán estar entre un límite inferior e superior, para o cal lle corresponderán uns expoñentes en función do equipo en cuestión (2).

Na ecuación 3, ilústrase a expresión a empregar (2).

$$C_e = a + bS^n \quad (2)$$

Onde,  $C_e$ : custo do equipo (\$)

a: índice dependente do equipo analizado

b: índice dependente do equipo analizado

S: capacidade dependente do equipo analizado (as unidades varía)

n: índice dependente do equipo analizado

Na Táboa 1, móstrase a relación de índices e valores que toma cada un deles para os equipos involucrados no proceso de produción de ciclohexanona a partir de fenol (2).

Táboa 1. Método factorial para a obtención do custo dos equipos. Fonte: (2)

Equipo	Unidades	S <sub>inferior</sub>	S <sub>superior</sub>	a	b	n
Intercambiadores calor	m <sup>2</sup>	10,0	1000,0	11000	88	1,0
Evaporador tipo <i>kettle</i>	m <sup>2</sup>	10,0	500,0	14000	83	1,0
Bombas	L/s	0,2	500,0	3300	48	1,2
Compresores	kW	132,0	29000,0	8400	3100	0,6
Recipientes presión*	kg	150,0	69200,0	-400	230	0,6
Tanques almacenamento	m <sup>3</sup>	100,0	10000,0	53000	2400	0,6
Pratos perforados **	diám. (m)	0,5	5,0	100	120	2,0

Notas:

\* A torre T-301 supera o umbral superior ao tratarse dun equipo cun diámetro considerable, tomarase o valor superior como estimación inicial e o custo considerárase o dobre do obtido (xa que a masa case dobra o valor indicado).

\*\* O diámetro dos pratos é lixeiramente superior ao indicado como límite superior, o cal se tomará a efectos de realizar un cálculo aproximado inicial.

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Cos datos indicados na Táboa 1, xa se podería proceder ao cálculo de cada un dos equipos. Sen embargo hai que ter en conta uns factores de gran relevancia, a temperatura de operación, a presión e o material de construción.

Así, nas Figuras 1, 2 e 3, pónense de manifesto estes factores, corrixindo e escalando o custo do equipo en función dos devanditos parámetros empregados no proceso (1).

Material	Correction factor $f_M$
Carbon steel	1.0
Stainless steel (low grades)	2.1
Stainless steel (high grades)	3.2
Monel	3.6
Inconel	3.9
Nickel	5.4
Titanium	7.7

Figura 1. Factor de material. Fonte: (1)

Design temperature (°C)	Correction factor $f_T$
0–100	1.0
300	1.6
500	2.1

Figura 2. Factor de temperatura. Fonte: (1)

Design pressure (bar absolute)	Correction factor $f_P$
0.01	2.0
0.1	1.3
0.5 to 7	1.0
50	1.5
100	1.9

Figura 3. Factor de presión. Fonte: (1)

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Coa utilización das Figuras 1, 2 e 3, o custo do equipo corrixido polos factores de material, temperatura e presión, respectivamente, visualízase na ecuación 3.

$$C_{e,actual} = f_M f_T f_P C_{e,base} \quad (3)$$

Sendo,  $f_M$ : factor de material

$f_T$ : factor de temperatura

$f_P$ : factor de presión

Tendo en conta todo o descrito, na Táboa 2 preséntase o custo de cada equipo así como as unidades de cada partida, formando a súa suma o total de custo dos mesmos, a partir do cal se comezará a pormenorizar o custo de cada partida do proxecto no apartado 4. do presente Documento V.

Os prezos que se mostran na Táboa 2 xa se atopan na divisa europea e o custo actualizado mediante a ecuación 2.

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 2. Custo dos equipos. Fonte: Elaboración propia

Equipo	C <sub>e</sub> (€)
K-201 (2 ud.)	157.437,71
K-301 (2 ud.)	155.358,51
P-101 (2 ud.)	8.189,99
P-302 (2 ud.)	8.372,65
P-303 (2 ud.)	8.372,65
P-304 (2 ud.)	8.014,54
E-201	34.678,97
E-202	24.310,21
E-301	35.060,06
E-302	22.865,26
E-303	200.645,16
E-304	88.744,34
E-305	17.168,79
R-201	153.594,18
R-301	121.058,83
T-301	332.031,56
Pratos perforados	172.544,99
TK-101	584.104,85
TK-102	544.540,01
V-301	149.794,64
<b>Suma total equipos</b>	<b>2.826.887,88 €</b>

#### 4. CÁLCULO DO ORZAMENTO

O orzamento divídese en custos directos e indirectos, aos que hai que engadir o custo de adquirir o lugar onde se erixirá a planta, isto é, o terreo. Asemade, hai que prever unha cantidade en concepto de capital circulante, que se entende recuperable cando se desmantele a planta logo da súa vida útil (1).

Na Táboa 3 extraída da bibliografía proposta por R. Smith, ilústranse os factores que se teñen en conta para o cálculo dos custos directos e indirectos, sendo a suma de todas as partidas individuais, o orzamento que constitúe a inversión inicial do presente proxecto.

Táboa 3. Factores para unha planta que trata con fluídos no seu proceso. Fonte: (1)

Concepto	Símbolo	Valor
Instalación	$f_{ER}$	0,4
Conducións	$f_{PIP}$	0,7
Instrumentación e control	$f_{INST}$	0,2
Instalacións eléctricas	$f_{ELECT}$	0,1
Utilidades	$f_{UTIL}$	0,5
<i>Off-sites</i>	$f_{OS}$	0,2
Edificios	$f_{BUILD}$	0,2
Acondicionamento lugar	$f_{SP}$	0,1
Deseño e enxeñaría	$f_{DEC}$	1
Continxencias	$f_{CONT}$	0,4
Capital circulante	$f_{WC}$	0,7

O custo total exprésase mediante a ecuación 4 e non deixa de ser a suma de tódolos conceptos individuais (1).

$$C_F = \sum_i f_i C_{e,i} \quad (4)$$

## Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

### 4.1. Partidas descompostas

Neste apartado descompóñense os conceptos en función dos factores da Táboa 3, de xeito individual, relativos aos custos directos da planta industrial.

Táboa 4. Adquisición dos equipos. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
Adquisición equipos	Entrega dos equipos de proceso	Partida alzada	2.826.887,88

Táboa 5. Instalación dos equipos. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
Instalación equipos	Instalación Illante Estrutura e cimentación Man de obra	Partida alzada	1.130.755,15

Táboa 6. Conducións. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
Conducións	Instalación de toda a rede de tuberías	Partida alzada	1.978.821,52

Táboa 7. Instrumentación e control. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
Instrumentación e control	Instalación e posta en marcha da totalidade do sistema de control	Partida alzada	565.377,58

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 8. Instalación eléctrica. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
	Montaxe e		
Instalación eléctrica	acondicionamento da rede eléctrica	Partida alzada	282.688,79
	Materiais incluídos		

Táboa 9. Utilidades. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
	Auga de		
Utilidades	refrixeración, auga de arrefriamento, xeración de vapor, distribución de utilidades	Partida alzada	1.413.443,94

Táboa 10. *Off-sites*. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
	Estradas		
<i>Off-sites</i>	colindantes, protección contra incendios, edificios auxiliares	Partida alzada	565.377,58

Táboa 11. Edificios. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
Edificios	Levantamento da edificación	Partida alzada	565.377,58

Deseño básico dunha planta de ciclohexanona a partir de fenol

Táboa 12. Acondicionamento. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
Acondicionamento	Escavación e movementos de terra Nivelación do terreo Limpeza	Partida alzada	282.688,79

Táboa 13. Adquisición do terreo. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
Adquisición do terreo	Compra da parcela de terreo no polígono industrial	Estimación prezo chan para uso industrial	3.470.760,00

Táboa 14. Enxeñaría, deseño e construción. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
Enxeñaría, deseño e construción	Enxeñaría e deseño da planta Man de obra do contratista	Partida alzada	2.826.887,88

Táboa 15. Continxencias. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Importe (€)
Continxencias	Fondo para cubrir continxencias	Partida alzada	1.130.755,15

Táboa 16. Capital circulante. Fonte: Elaboración propia

Concepto	Características	Medición	Prezo (€)
Capital circulante	Capital circulante	Partida alzada	1.978.821,52

## 5. ORZAMENTO GLOBAL

Tendo en conta toda a descomposición de importes parciais do apartado 4.1, na Táboa 17 preséntase o orzamento total tendo en conta os custos directos e indirectos, así como o importe correspondente ao capital circulante.

Táboa 17. Orzamento global. Fonte: Elaboración propia

CONCEPTO	IMPORTE (€)
Adquisición equipos	2.826.887,88
Instalación equipos	1.130.755,15
Conducións	1.978.821,52
Instrumentación e control	565.377,58
Instalación eléctrica	282.688,79
Utilidades	1.413.443,94
<i>Off-Sites</i>	565.377,58
Edificios	565.377,58
Acondicionamento	282.688,79
Adquisición terreo	3.470.760,00
Enxeñaría, deseño e construción	2.826.887,88
Continxencias	1.130.755,15
Capital circulante	1.978.821,52
<b>Total</b>	<b>19.018.643,36 €</b>

O orzamento correspondente á planta de produción de ciclohexanona a partir da hidroxenación catalítica de fenol ascende a un total de DEZANOVE MILLÓNS DEZAOITO MIL SEISCENTOS CORENTA E TRES CON TRINTA E SEIS (19.018.643,36) EUROS.

Santiago de Compostela, 29 de xuño de 2020

Autores:



Ismael Fernández Pazó



Raúl Bonenfant Muñiz

## 6. BIBLIOGRAFÍA

1. SMITH, R. *Chemical Process Design and Integration*. West Sussex : John Wiley & Sons, Ltd., 2005. ISBN: 0-471-48681-7

2. SINNOTT R. e G. TOWLER. *Chemical Engineering Design*. Burlington : Elsevier, 2008. ISBN: 978-0-7506-8423-1

3. CHEMICAL ENGINEERING ONLINE. *The chemical Engineering Plant Cost Index* [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en:

<https://www.chemengonline.com/pci-home>

4. XE. Conversor de divisas [en liña]. [Consultado en Xuño 2020]. Dispoñible en:

<https://www.xe.com/es/currencyconverter/convert/?Amount=1&From=USD&TO=EUR>