

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA  
ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑARÍA



TRABAJO FIN DE GRADO

Grado en Ingeniería Química

**PLANTA DE PRODUCCIÓN DE  
ANHÍDRIDO ACÉTICO POR CARBONILACIÓN  
DE ACETATO DE METILO**

Rodrigo Tasende Reboredo

Jacobo Torres Pérez

Junio de 2024

# ÍNDICE GENERAL

## DOCUMENTO I: MEMORIA

ANEXO I: Balances de materia y de energía

ANEXO II: Cálculos justificativos

ANEXO III: Análisis de viabilidad económica

ANEXO IV: Fichas de seguridad\*

## DOCUMENTO II: PLANOS

## DOCUMENTO III: ESTUDIOS CON ENTIDAD PROPIA \*\*

## DOCUMENTO IV: PLIEGO DE CONDICIONES\*

## DOCUMENTO V: PRESUPUESTO

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

*\*\*El Estudio de Seguridad y Salud del Documento III: Estudios con Entidad Propia, se adjunta también en el archivo II.*

---

**DOCUMENTO I:**

**MEMORIA**

---

## Índice

1.	Objeto .....	1
2.	Alcance .....	1
3.	Justificación del Proyecto .....	2
4.	Estudio de alternativas .....	3
4.1.	Proceso Cetena .....	3
4.2.	Síntesis mediante oxidación de acetaldehído .....	4
4.3.	Síntesis por carbonilación de metil acetato .....	5
4.4.	Alternativa seleccionada .....	6
5.	Materias primas y producto .....	7
5.1.	Anhídrido acético .....	7
5.1.1.	Propiedades físicas .....	7
5.1.2.	Propiedades químicas .....	8
5.1.3.	Aplicaciones .....	8
5.1.4.	Transporte y almacenamiento .....	8
5.2.	Acetato de metilo .....	9
5.2.1.	Propiedades físicas .....	9
5.2.2.	Propiedades químicas .....	9
5.2.3.	Aplicaciones .....	9
5.2.4.	Transporte y almacenamiento .....	10
5.3.	Monóxido de carbono .....	10
5.3.1.	Propiedades físicas .....	10
5.3.2.	Propiedades químicas .....	10
5.3.3.	Aplicaciones .....	11
5.3.4.	Transporte y almacenamiento .....	11
6.	Análisis de mercado .....	11
6.1.	Análisis de mercado del anhídrido acético .....	11
6.1.1.	Mercados del anhídrido acético .....	12
6.1.2.	Análisis geográfico de la manufactura .....	13

6.1.3.	Importaciones y exportaciones .....	14
6.1.4.	Precios en el mercado y evolución. ....	15
6.1.5.	Principales empresas .....	15
6.2.	Análisis de mercado del acetato de metilo.....	16
6.3.	Análisis de mercado del monóxido de carbono .....	18
6.4.	Conclusión análisis de mercado.....	18
7.	Emplazamiento y localización.....	19
7.1.	Selección de la localización y parcela .....	19
7.1.1.	Disponibilidad de las materias primas.....	21
7.1.2.	Proximidad a mercados de consumo .....	22
7.1.3.	Disponibilidad de mano de obra.....	24
7.1.4.	Medios de transporte y comunicación .....	25
7.1.5.	Consideraciones estratégicas y políticas .....	28
7.1.6.	Impacto ambiental .....	28
7.1.7.	Climatología y sismología.....	29
7.1.8.	Servicios disponibles .....	29
8.	Análisis de viabilidad técnica.....	29
8.1.	Viabilidad de la tecnología .....	29
8.2.	Disponibilidad de recursos.....	30
8.3.	Seguridad del proceso.....	32
8.4.	Viabilidad económica .....	32
9.	Descripción del proceso, instalación y equipos.....	33
9.1.	Otros compuestos químicos.....	33
9.1.1.	Cloruro de carbonilo de rodio.....	33
9.1.2.	Yoduro de metilo .....	34
9.1.3.	Yoduro de litio .....	34
9.1.4.	Ácido acético.....	35
9.1.5.	Hidrógeno.....	35
9.2.	Descripción detallada del proceso .....	36

9.3.	Descripción de la instalación .....	39
9.4.	Descripción de los equipos .....	40
9.4.1.	Sección 100 .....	40
9.4.2.	Sección 200 .....	42
10.	Control e instrumentación .....	44
10.1.	Introducción .....	44
10.2.	Método de control .....	45
10.3.	Algoritmos de control .....	46
10.4.	Nomenclatura empleada .....	47
10.5.	Descripción de los lazos de control .....	48
10.5.1.	Sección 100: Acondicionamiento de las materias primas y reacción.....	48
10.5.2.	Sección 200: Purificación .....	54
10.6.	Válvulas de alivio, indicadores y alarmas.....	64
10.6.1.	Válvulas de alivio.....	64
10.6.2.	Indicadores .....	64
10.6.3.	Alarmas .....	65
11.	Seguridad .....	66
11.1.	Inventario de sustancias .....	66
11.2.	Clasificación según el reglamento CLP .....	67
11.3.	Clasificación de la instalación según la Directiva Seveso .....	70
11.4.	Clasificación NFPA .....	71
11.5.	Estudio de la reactividad química descontrolada.....	72
11.5.1.	Matriz de compatibilidad química.....	73
11.6.	Distancias de seguridad .....	74
11.6.1.	Distancia de seguridad entre áreas .....	75
11.6.2.	Distancias de seguridad entre equipos .....	76
11.7.	Índice DOW de fuego y explosión.....	77
11.7.1.	Selección de las unidades pertinentes .....	78
11.7.2.	Factor Material (FM).....	78

11.7.3.	Factor de Riesgos Generales del Proceso.....	79
11.7.4.	Factor de Riesgos Especiales del Proceso.....	79
11.7.5.	Formularios del Índice DOW de fuego y explosión.....	82
11.7.6.	Grado de peligrosidad .....	83
11.7.7.	Radio y área de exposición.....	84
11.7.8.	Factor de Daño .....	84
11.8.	Diseño de válvulas de alivio .....	84
11.9.	Escenarios de fuga .....	85
12.	Legislación aplicable, reglamentos y códigos.....	87
12.1.	Legislación general.....	87
12.2.	Legislación ambiental.....	87
12.3.	Legislación de seguridad e higiene.....	88
12.4.	Normas, guías y códigos de diseño.....	89
13.	Bibliografía .....	89

## 1. Objeto

El presente proyecto tiene como objeto el diseño de una planta de producción de anhídrido acético por carbonilación de acetato de metilo. La capacidad de producción de la planta a diseñar será de 100.000 toneladas al año de anhídrido acético al 99,7% en peso de pureza, y operará en régimen continuo durante 330 días al año, las 24 horas del día.

Los equipos fundamentales de la planta son el reactor de burbujeo R-101 que será diseñado por Rodrigo Tasende Reboredo y la columna de destilación T-202 que será diseñada por Jacobo Torres Pérez.

Este Trabajo de Fin de Grado constituye el proyecto final con el que Rodrigo Tasende Reboredo y Jacobo Torres Pérez optan al título del Grado en Ingeniería Química otorgado por la Escola Técnica Superior de Enxeñaría de la Universidade de Santiago de Compostela.

## 2. Alcance

El proyecto consta de cinco documentos que se describen a continuación: (1)

### 1. Documento I: Memoria

Es el documento en donde se describe el proyecto y la justificación del mismo. Comprende además las alternativas estudiadas junto con sus ventajas y desventajas, y las razones que han conducido a la solución final. Algunos de los apartados que componen la Memoria son el análisis de mercado, justificación del terreno seleccionado, estudio de seguridad del proceso y de sistemas de instrumentación y control de equipos industriales y legislación de aplicación.

Este documento incluye cuatro anexos que abarcan las siguientes temáticas:

- Anexo I: Balances de materia y energía. Lugar del proyecto en donde se recogen los cálculos realizados para cada equipo del proceso.
- Anexo II: Cálculos justificativos. Recopila el procedimiento de diseño de equipos, dos de ellos diseñados rigurosamente, y se divide en cuatro partes.
  - Parte A: Diseño mecánico.
  - Parte B: Reactor R-101.
  - Parte C: Columna de destilación T-202.
  - Parte D: Dimensionamiento básico de equipos.
- Anexo III: Análisis de viabilidad económica. Se realiza un estudio económico del proyecto en su conjunto y se presenta información considerando aspectos como el desembolso inicial, flujos de caja o parámetros de rentabilidad como VAN y TIR, etc.

- Anexo IV: Fichas de seguridad.

## **2. Documento II: Planos**

Incluye un total de siete planos: Plano de Situación y Emplazamiento, de Implantación, Diagrama de flujo del proceso, dos Diagramas de tuberías e instrumentación, y los respectivos planos de los equipos diseñados rigurosamente, el reactor R-101 y la columna de destilación T-202. Todos los planos se dibujan según las normas UNE.

## **3. Documento III: Estudios con entidad propia**

El tercer documento abarca dos temáticas, un estudio de impacto ambiental y un estudio básico de seguridad y salud.

## **4. Documento IV: Pliego de condiciones**

El pliego de condiciones es el documento que recoge las condiciones técnicas, administrativas, facultativas, legales y económicas para que el proyecto pueda ser llevado a cabo.

## **5. Documento V: Presupuesto**

El presupuesto determina el coste económico en unidades monetarias del proyecto en conjunto.

Toda la información recopilada en los cinco documentos se divide en dos archivos, donde el primero reúne: Memoria junto a los Anexos a excepción del número IV, Planos, el estudio de impacto ambiental del Documento III y el Presupuesto. El segundo: Anexo IV de la Memoria, Estudio básico de seguridad y salud del Documento III y pliego de condiciones.

# **3. Justificación del Proyecto**

El Proyecto propone el diseño de una planta de producción industrial de anhídrido acético mediante la carbonilación de acetato de metilo.

Producir este compuesto químico a nivel industrial surge debido a la elevada y creciente demanda que existe a nivel mundial de este compuesto. Pues es empleado como materia prima en multitud de procesos de fabricación de fármacos, cosmética, acetato de celulosa, etc. Además, España no cuenta con ninguna fábrica industrial de anhídrido acético, esto no solo supondría una ventaja competitiva significativa, sino que también generaría un gran impacto socioeconómico al ser una planta pionera en el sector nacional. (2)

Este producto se produce a escala industrial en otros países del mundo, por lo que, teniendo en cuenta el tamaño de las empresas competidoras y del mercado, se ve viable plantear

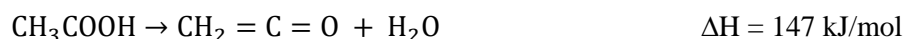
una producción anual de 100.000 t/año. El proceso se enfocará en optimizar los costes de producción mientras se generan beneficios significativos promoviendo la innovación, la sostenibilidad, y aplicando un modelo de economía circular que maximice los recursos del proceso.

## 4. Estudio de alternativas

La producción de anhídrido acético se realiza industrialmente de distintas maneras dependiendo principalmente de las materias primas involucradas. A continuación, se presentan los procesos más distintivos y utilizados en la industria.

### 4.1. Proceso Cetena

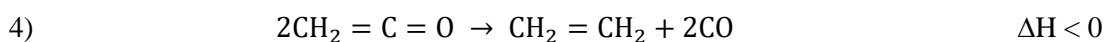
Esta vía de producción de anhídrido acético conlleva la realización de dos importantes pasos. El primero consiste en someter ácido acético a descomposición térmica con unas condiciones de presión de entre 15 y 20 kPa, y, con el fin de maximizar el rendimiento de la cetena, se requiere una temperatura óptima de unos 730-750 °C. (3)



La reacción que transcurre es exotérmica, la conversión de equilibrio es próxima al 85-90% de ácido acético y se lleva a cabo en fase vapor en presencia de un 0,2-0,3% de trietil fosfato (4). Este es usado como catalizador deshidratante para el agua formada en la reacción y es neutralizado con una solución de amoníaco a la salida del reactor. Una vez se llega a este punto del proceso, la cantidad de agua es insignificante. (3)

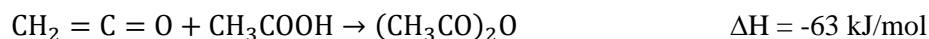
Además, esta primera etapa se lleva a cabo en un reactor *multicoil* fabricado con bobinas de alta resistividad térmica construido con una aleación Sincromal. (5)

Es relevante destacar que a bajas presiones el rendimiento de la cetena se ve incrementado. Sin embargo, ello conlleva que la eficiencia del proceso disminuya, ya que se originan reacciones competidoras que hacen que reaccione la propia cetena y se produzcan productos no deseados como metano, dióxido de carbono o coque entre otros. (3)



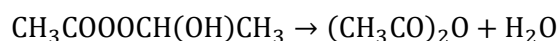
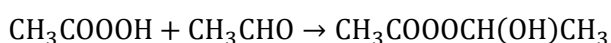
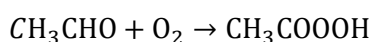
El segundo paso comienza después de realizar la correspondiente condensación de la corriente de salida del reactor, debido a que este se lleva a cabo en fase líquida y consiste en la

reacción de ácido acético fresco y recirculado con cetena. El producto resultante es el anhídrido acético. (3)



#### 4.2. Síntesis mediante oxidación de acetaldehído

Este método consiste en la oxidación catalítica en fase líquida del acetaldehído con aire. A continuación, se muestran las reacciones que ocurren en el proceso obteniéndose como producto una mezcla de anhídrido acético y ácido acético. (5)



En este proceso el acetaldehído reacciona con el oxígeno formando ácido peracético que reaccionara con acetaldehído dando lugar a monoperoxiacetato. A continuación, se producen una serie de reacciones paralelas que producirán una mezcla de ácido acético, anhídrido acético y agua. (5) (3)

La utilización de catalizadores es fundamental y los más utilizados son mezclas de sales metálicas. Normalmente, es la mezcla de acetato de cobre y de acetato de cobalto, en proporción 3:1, pero también se emplean compuestos de acetato de manganeso y acetato de cobre o de acetato de cobalto y acetato de níquel. (3) (5)

Otro aspecto importante a controlar es la necesidad de una rápida eliminación del agua formada en la reacción, ya que se produce la hidrólisis de anhídrido acético. Para evitar esto se arrastra el agua del reactor con el aire empleado en la oxidación y se trabaja a una temperatura que inhiba o minimice la hidrólisis. (6) (5) (3)

Este proceso se lleva a cabo a una temperatura de entre 40 y 60 °C, lo que favorece la absorción del oxígeno y reduce las pérdidas del acetaldehído, y a una presión entre 1 y 3 bar. La reacción es muy exotérmica, por lo que se necesita un enfriamiento considerable y la utilización de disolventes con bajo punto de ebullición es beneficioso para este fin. Los más usados son los acetatos de metilo y etilo ya que forman azeótropos con el agua, lo que favorece su rápida separación en el reactor. Además, estos disolventes moderan la oxidación de acetaldehído y hacen la operación más segura. Por esas razones, la relación entre el disolvente y el acetaldehído va a condicionar la proporción de la mezcla de anhídrido acético y ácido acético obtenida. Como afecta esta proporción se ilustra en la Tabla 1. (5) (3)

Tabla 1. Rendimientos obtenidos de Ac<sub>2</sub>O dependiendo de la proporción de la mezcla inicial (5)

Proporción inicial acetato de etilo-acetaldehído	Conversión de acetaldehído (%)	Rendimiento de anhídrido acético (%)
20:80	80	13,5
30:70	80	57
60:40	80	64
70:30	80	68,5

#### 4.3. Síntesis por carbonilación de metil acetato

La primera vez que se presentó este proceso fue en el año 1951 con la patente de *BASF* y, a partir de ese momento, se han desarrollado numerosas modificaciones para optimizar el proceso y favorecer la producción de anhídrido acético. (6)

Este método de síntesis se basa en la siguiente reacción:



Como materia prima se utiliza el acetato de metilo que sufre una reacción de carbonilación al hacerlo reaccionar con monóxido de carbono dando lugar al anhídrido acético.

Este proceso se caracteriza por emplear un catalizador homogéneo, es decir, en el sistema se encuentra un complejo organometálico en fase líquida. El sistema catalítico es complejo y consiste en una mezcla de un metal noble del grupo IX, una mezcla de haluro de metilo/haluro iónico y una sal de acetato. Destaca principalmente la utilización de casi cualquier sal de rodio, yoduro de litio, yoduro de metilo y ácido acético, este último empleado como disolvente. (6)

Este conjunto de sustancias que forman el sistema catalítico, junto con el acetato de metilo y el anhídrido acético recirculado, serán la corriente líquida que entre al reactor. Por otro lado, la corriente de gas de entrada al sistema está compuesta por un 95% de CO y un 5% de hidrógeno. El objetivo de esta adición de H<sub>2</sub> es potenciar la actividad y prolongar la vida útil del catalizador. (5) (7)

Se trabaja en un reactor de burbujeo a 50 bares y a una temperatura entre 175-190 °C. La reacción que tiene lugar es exotérmica, por tanto es necesario eliminar una cantidad considerable de calor. Cabe destacar la necesidad de un control preciso de la temperatura, ya que se puede producir la descomposición térmica del Ac<sub>2</sub>O dando lugar a la formación de alquitranes. Esto es perjudicial debido a que la mezcla de salida del reactor es separada por destilación, con el objetivo de devolver el catalizador al reactor, lo que supone una acumulación de estos compuestos en el interior del reactor perjudicando de este modo al sistema. (6) (5)

Como se muestra en la Figura 1, tras la reacción, la corriente líquida se separa mediante una destilación flash. En ese equipo se separa una corriente de líquido formada principalmente

por el catalizador, la cual es recirculada al interior del reactor. Por otro lado, la corriente de vapor es condensada y sometida a una serie de destilaciones, obteniendo así compuestos que se deben recircular, como el acetato de metilo, el yoduro de metilo y el ácido acético; y el producto final deseado con la pureza requerida, anhídrido acético. (5) (6)

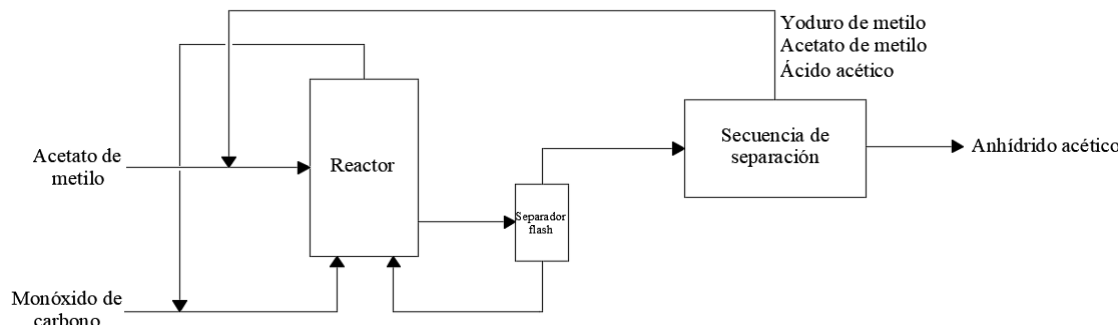


Figura 1. Diagrama del proceso de carbonilación de acetato de metilo (Elaboración propia a partir de (5))

#### 4.4. Alternativa seleccionada

A continuación, se presentan algunas de las ventajas y desventajas de cada posible alternativa en la Tabla 2.

Tabla 2. Ventajas y desventajas de las diferentes alternativas de producción (5) (3)

	Ventajas	Desventajas
<b>Proceso Cetena</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Proceso simple</li> <li>• Conversión a cetena elevada (<math>\approx 85\%</math>)</li> <li>• Selectividad a cetena elevada (<math>\approx 90\%</math>)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Operación a vacío (0,15 atm) y a elevadas temperaturas (<math>\approx 750^\circ\text{C}</math>)</li> <li>• Reacciones secundarias no deseadas que afectan al rendimiento del proceso</li> <li>• Alto coste energético</li> <li>• Uso de aleaciones especiales en los tubos para evitar la formación de hollín y otros productos tóxicos</li> </ul>
<b>Oxidación de acetaldehído</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Operación a baja presión y temperatura, lo que reduce costos y riesgos</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se necesita una rápida eliminación de agua para evitar hidrólisis</li> <li>• Rendimiento a anhídrido acético bajo</li> <li>• Proceso en desuso</li> </ul>
<b>Carbonilación de metil acetato</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Alta selectividad hacia el anhídrido acético</li> <li>• Menor demanda energética</li> <li>• Rendimientos altos (99,9 %)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Proceso complejo</li> <li>• Uso de catalizadores de coste elevado</li> <li>• Formación de alquitranes</li> </ul>

Como se mencionó con anterioridad, el anhídrido acético es un producto altamente demandado en un amplio abanico de sectores industriales. De las opciones presentadas para la obtención de dicha sustancia, se decide seleccionar el proceso de carbonilación de metil acetato.

Se ha decidido descartar la oxidación de acetaldehído ya que, en la actualidad, es un proceso que ha sido sustituido por las otras dos rutas de producción indicadas. De hecho, la última planta que empleaba este método cerró antes del 2004. (5)

Por otro lado, se ha decidió seleccionar la carbonilación de acetato de metilo frente al proceso ceteno, ya que, este último, proporciona conversiones más bajas hacia anhídrido acético y, además, requiere una gran cantidad de energía para descomponer térmicamente el ácido acético a ceteno. (8)

Por tanto, utilizando el proceso de carbonilación se consiguen conversiones más altas y hay un menor consumo de energía. Asimismo, como el proceso está exento de agua, al contrario que en el proceso ceteno, no se producirá la hidrólisis del anhídrido en ácido acético, lo que significa que habrá un mayor rendimiento de  $(Ac)_2O$ . (8)

## 5. Materias primas y producto

En este apartado se procederá a la recopilación de los aspectos más importantes de las materias primas y del producto del proceso.

### 5.1. Anhídrido acético

El anhídrido acético es un líquido móvil, incoloro, con un olor intenso y penetrante y es más lacrimógeno que el ácido acético. Actualmente, es uno de los intermediarios orgánicos de mayor relevancia y se emplea de manera significativa en la investigación y en la industria. Cabe destacar que es el anhídrido de ácido carboxílico que se produce en mayor cantidad, destacando la producción de 900.000 toneladas anuales en EE.UU. (9) (3)

Fue sintetizado por primera vez en 1852 por C. Gerhardt a partir de la reacción entre cloruro de bencilo y acetato de potasio. Posteriormente se descubrieron otros métodos de producción que permitieron llevar el proceso a escala industrial. (9) (6)

#### 5.1.1. Propiedades físicas

El anhídrido acético tiene la fórmula empírica  $C_4H_6O_3$  y su fórmula estructural se corresponde a  $(CH_3CO)_2O$ . Normalmente se abrevia como  $Ac_2O$  y también se conoce como "óxido de acetilo", "anhídrido etanoico", "óxido acético", "éter de acetilo", "acetato de acetilo" y "anhídrido acético". En la Tabla 3 enumera las propiedades físicas principales. (6)

Tabla 3. Propiedades físicas del anhídrido acético (6) (3)

Propiedad	Valor	Unidades
<b>Peso molecular</b>	102,09	g/mol
<b>Densidad del líquido (a 20 °C)</b>	1080	kg/m <sup>3</sup>
<b>Punto de fusión (a 101,2 kPa)</b>	-71,3	°C
<b>Punto de ebullición (a 101,2 kPa)</b>	139,5	°C
<b>Calor de vaporización</b>	406,6	J/g
<b>Calor específico (a 20°C)</b>	1817	J//kg
<b>Temperatura crítica</b>	296	°C
<b>Presión crítica</b>	4680	kPa

#### 5.1.2. Propiedades químicas

El anhídrido acético experimenta una amplia variedad de reacciones químicas y es el anhídrido de ácido carboxílico alifático más investigado. En los últimos años se utilizó para la acetilación de grupos OH y NH. Además, es usado también como agente deshidratante, por ejemplo en la industria de explosivos, y para sintetizar cetonas de metilo en las reacciones Friedel-Crafts, reacciones que implican la participación de los  $\alpha$ -protones en una molécula, o incluso reacciones en las que solo reacciona un grupo carbonilo del anhídrido acético. (9)

#### 5.1.3. Aplicaciones

Los usos principales del anhídrido acético son su empleo como reactivo en reacciones de acetilación y para la obtención de acetato de celulosa. También destaca su aplicación en el tratamiento de la madera para aumentar la resistencia química, a la intemperie y a la descomposición biológica; así como mejorar sus propiedades mecánicas y la estabilidad dimensional de la madera. (6) (3)

Por otro lado, también es un reactivo muy utilizado en la industria farmacéutica y alimentaria, destacando su utilización en la producción de aspirinas. Además, se emplea en una amplia variedad de aplicaciones en síntesis orgánica, y es útil como disolvente en análisis químico. (3) (6)

#### 5.1.4. Transporte y almacenamiento

Respecto al transporte, el  $\text{Ac}_2\text{O}$  es una mercancía peligrosa por lo que las condiciones y características del transporte dependen de la normativa especificada en cada país. En cuanto a los métodos de distribución, es viable el transporte por carreteras, por ferrocarril y por medios marítimos y aéreos. (Fichas de seguridad)

Para su almacenamiento se emplean tanques de acero inoxidable, hierro, aluminio o polietileno que deben encontrarse cerrados de manera hermética. Asimismo, debido a su inflamabilidad, es necesario que se mantenga alejado de cualquier fuente de ignición. Por último, su temperatura de almacenamiento debe estar entre 15 y 25 °C. (Fichas de seguridad) (5)

## 5.2. Acetato de metilo

El acetato de metilo es un líquido incoloro con un olor agradable y que destaca por ser una sustancia altamente inflamable. Sus características son muy similares a las del acetato de etilo y es muy soluble en otros disolventes orgánicos. (9) (10)

### 5.2.1. Propiedades físicas

El acetato de metilo tiene la fórmula empírica  $C_3H_6O_2$  y su fórmula estructural se corresponde a  $CH_3COOCH_3$ . Normalmente se abrevia como MeOAc y también se conoce como "éster metílico del ácido acético", "acetato metílico", "acetato de metilo", "metil acetato", "éster metílico del etanoato" y "metanoato de metilo". La Tabla 4 enumera las propiedades físicas principales. (11)

Tabla 4. Propiedades físicas del acetato de metilo (11)

Propiedad	Valor	Unidades
Peso molecular	74,08	g/mol
Densidad del líquido (a 20 °C)	0,9342	g/cu
Punto de ebullición (a 101,2 kPa)	56,7	°C
Punto flash	-10	°C
Calor de vaporización (a 25 °C)	32,29	kJ/mol
Densidad relativa de vapor (aire=1)	2,6	-
Temperatura de autoignición	450	°C
Viscosidad (a 25 °C)	0,364	mPa·s
Tensión superficial (a 25 °C)	24,73	mN/m

### 5.2.2. Propiedades químicas

El acetato de metilo es un compuesto muy estable en condiciones de manipulación y almacenamiento adecuadas. Sin embargo, reacciona con oxidantes fuertes, lo que genera peligro de incendio o explosión. Además, reacciona violentamente con ácidos y bases fuertes y ataca el caucho y algunas formas de plásticos. (Fichas de seguridad) (12)

### 5.2.3. Aplicaciones

El acetato de metilo, con su bajo punto de ebullición (55.8 - 58.2 °C), es el acetato orgánico de menor temperatura de ebullición. Se caracteriza por evaporarse aproximadamente cinco veces más rápido que el acetato de butilo, lo que lo convierte en una mejor opción en aplicaciones que demandan una rápida evaporación. Se utiliza como solvente en procesos para la fabricación de nitratos de celulosa y se emplea como reactivo en la transesterificación para la síntesis de ésteres. Además, su producción es esencial para obtener anhídrido acético. (9)

#### 5.2.4. Transporte y almacenamiento

El transporte de acetato de metilo puede llevarse a cabo por carretera, ferrocarril o por vía marítima o área. Al igual que el anhídrido, al ser mercancía peligrosa las condiciones del transporte dependen de la regulación de cada país. (Fichas de seguridad).

Por otro lado, los tanque de almacenamiento del MeOAc deben estar también cerrados herméticamente y lejos de fuentes de ignición. Asimismo, la temperatura de almacenamiento debe estar entre los 5 °C y los 30 °C y no es recomendable su almacenamiento por un periodo mayor a dos años. (13)

#### 5.3. Monóxido de carbono

El monóxido de carbono, CO, es un gas producido por la combustión incompleta de compuestos con contenido en carbono. Es tóxico, incoloro, inodoro, no tiene sabor y es muy inflamable a temperatura ambiente y presión atmosférica. (3) (9)

En 1776, J. M. F. de Lassone preparó y aisló por primera vez el monóxido de carbono al llevar a cabo el calentamiento de una mezcla de carbón y óxido de zinc. No obstante, fue W. Cruikshank quien reconoció su composición química 20 años después y, en 1801, fue confirmada por F. Clement y J. B. Desormes. (9)

##### 5.3.1. Propiedades físicas

El monóxido de carbono está formado por la unión de dos átomos, uno de carbono y otro de oxígeno, a través de un enlace covalente. También se puede conocer como "óxido carbónico" u "óxido de carbono". La Tabla 5 enumera las propiedades físicas principales. (14)

*Tabla 5. Propiedades físicas del monóxido de carbono (9)*

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>	<b>Unidades</b>
<b>Peso molecular</b>	28,011	g/mol
<b>Densidad del gas (STP)</b>	1,250	kg/m <sup>3</sup>
<b>Densidad del líquido (a 81,63 K)</b>	788,6	kg/m <sup>3</sup>
<b>Punto de ebullición (a 101,2 kPa)</b>	81,63	K
<b>Calor de vaporización (a 81,63 K)</b>	6,042	kJ/mol
<b>Temperatura crítica</b>	132,91	K
<b>Presión crítica</b>	3,4987	MPa
<b>Temperatura de autoignición</b>	880	K
<b>Mezcla CO-Aire</b>	12,5-74,2	% vol
<b>Mezcla CO-O<sub>2</sub></b>	15,5-93,9	% vol

##### 5.3.2. Propiedades químicas

El CO es una molécula insaturada, que destaca por sus propiedades reductoras y su habilidad para combinarse con una gran variedad de moléculas distintas. Respecto a su

reactivad, es una molécula metaestable, que es casi inerte en condiciones suaves, pero se vuelve muy reactiva a presiones y temperaturas elevadas. (9)

### 5.3.3. Aplicaciones

Es utilizado como combustible, agente reductor en la metalurgia para la producción de metales como el acero y el hierro y como materia prima en la manufactura de una gran variedad de compuestos químicos. Entre ellos, destaca en la producción de hidrógeno mediante la reacción de cambio de fase de agua a gas, y en la carbonilación de sustratos orgánicos como alcoholes, aminas y ésteres. (9) (3)

Las mezclas de  $H_2$  y  $CO$  (gas de síntesis) se utilizan como materias primas fundamentales en el crecimiento significativo de la producción a gran escala de diversos productos químicos, tales como metanol, alcoholes alifáticos y aldehídos. (9)

Se espera un aumento en el uso del  $CO$  que proviene del carbón en la fabricación de productos químicos y combustibles si la tecnología económica de gasificación del carbón continúa avanzando y desarrollándose. (3)

### 5.3.4. Transporte y almacenamiento

El monóxido de carbono seco y sin impurezas puede almacenarse en recipientes de acero y otros metales hasta presiones de 15 a 20 MPa. Sin embargo, en presencia de impurezas como azufre y humedad aumenta la corrosión y solo los aceros con alto contenido en cromo la resisten. Por otro lado, si se almacena a elevada temperatura y presión el mejor material son el cobre y sus aleaciones, aunque también es compatible con materiales sintéticos a excepción del caucho o el neopreno. Materiales como hierro o níquel no son recomendables, pues pueden reaccionar con el monóxido incluso a temperatura ambiente. (9)

El monóxido de carbono suele producirse in situ, aunque en algunos países se encuentra disponible a granel como gas licuado, pero es más común transportarlo como gas comprimido en cilindros de acero o aluminio. (9)

## 6. Análisis de mercado

### 6.1. Análisis de mercado del anhídrido acético

El mercado del anhídrido acético está experimentando un crecimiento exponencial a nivel mundial debido a su versatilidad como materia prima para diferentes tipos de procesos. Destaca principalmente en el sector del plástico y en la producción de fibras de acetato de celulosa, industria del tabaco, cosmética o farmacéutica, entre otros. (15)

En el año 2022 fue registrado un volumen de mercado de anhídrido acético de 2,1 millones de toneladas a nivel mundial. Se estima que para el año 2032 esta cifra aumente hasta las 3,2 millones de toneladas con una tasa de crecimiento anual compuesta (CAGR) superior al 4%. (16)

Si se compara dicho 4% con los valores de la Figura 2 se puede apreciar que es superior al CAGR de Europa o Norteamérica y muy próximo a la de otras regiones como Asia-Pacífico. Esto se traduce en que el rendimiento de una posible inversión podría ser favorable. (17)

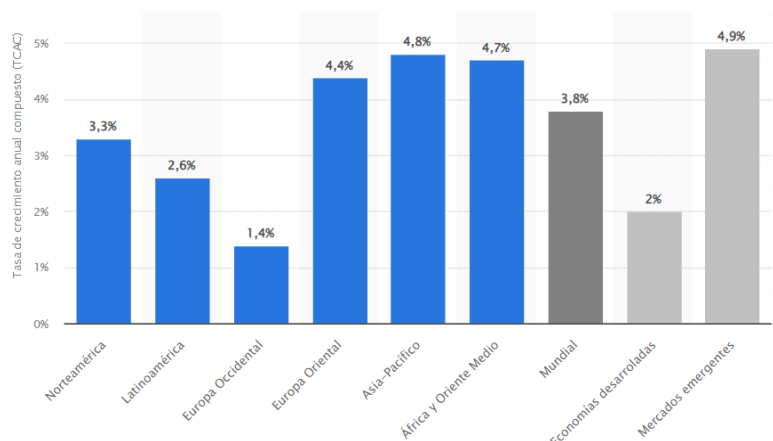


Figura 2. Tasa de crecimiento anual compuesta (CAGR) de la industria química mundial entre 2015 y 2018 (17)

Por otra parte, es importante destacar que el mercado del anhídrido acético se valoró en 2,9 mil millones de dólares en el año 2022. Se pronostica alcanzar los 4,07 mil millones de dólares para el 2030 debido a su CAGR y a la alta demanda. (18)

#### 6.1.1. Mercados del anhídrido acético

El uso del anhídrido acético destaca principalmente en el sector farmacéutico, ya que es una materia prima fundamental para la fabricación de determinados productos como las aspirinas, los medicamentos sulfamídicos, algunas vitaminas y hormonas, paracetamol... Además, como mundialmente ha habido un aumento de problemas de salud (dolores corporales, tos, resfriados, etc) se espera que la demanda de medicamentos genéricos aumente considerablemente, favoreciendo la producción de anhídrido acético. (18)

Otro factor que impulsa el crecimiento del mercado es el aumento de la demanda de acetato de celulosa, un tipo de plástico biodegradable que es medioambientalmente sostenible. Este material destaca por su uso en la industria textil y de envases, donde existe una creciente preocupación por cuestiones ambientales y por la búsqueda de alternativas más sostenibles. Por estas razones se espera, sobre todo con la industria de la moda en auge, que aumente la producción de este producto, impulsado el mercado de anhídrido acético. (19) (2)

Otra industria donde destaca el uso del acetato de celulosa es en el mercado del tabaco, donde este material es utilizado para los filtros de cigarrillos. En este sector se espera una disminución debido a la creciente utilización de cigarrillos electrónicos y a las medidas de los gobiernos para reducir el consumo de tabaco. Sin embargo sí que se espera un amplio aumento de este mercado en países asiáticos como China e India. (20) (21)

La tasa de crecimiento del mercado de acetato de celulosa en 2021 era del 5%, como se observa en la Figura 3 se espera un crecimiento continuado en los próximos años.

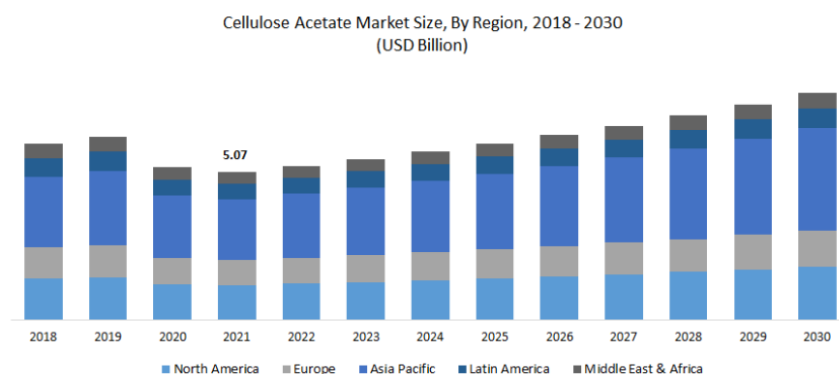


Figura 3. Crecimiento esperado del mercado de acetato de celulosa por región hasta 2030 (21)

Otro mercado en desarrollo es el de la lavandería donde es necesario la utilización de  $\text{Ac}_2\text{O}$  para la producción de tetracetiletilendiamina (TAED), que es un componente fundamental en la manufactura de blanqueadores y detergentes (22). Por último, también se espera un avance en la manufactura de la madera acetilada, sintetizada utilizando anhídrido acético y con propiedades mejoradas que permiten una mayor resistencia y durabilidad. (20)

### 6.1.2. Análisis geográfico de la manufactura

La mayor parte de la producción de anhídrido acético se divide en cinco regiones diferenciadas: América del norte, Europa, Asia Pacífico, América del Sur y Medio Oriente y África. (20)

El mercado lo lidera Norteamérica debido a la elevada demanda de acetato de celulosa y de la industria farmacéutica. En esta región se incluyen a los Estados Unidos, México y Canadá. El primero es el mayor productor ya que cuenta con un amplio número de empresas que producen acetato de celulosa y actualmente se está produciendo un crecimiento significativo del campo médico, ya que hay un elevado gasto en medicamentos y un aumento de las enfermedades crónicas. (18) (22)

El principal consumidor de anhídrido acético es la región de Asia Pacífico. Esto se debe principalmente al crecimiento exponencial de problemas de salud en la zona debido a la contaminación producida por la actividad industrial y, como consecuencia, se ha reforzado el

servicio médico. Por estas razones se espera que la producción de anhídrido acético aumente de manera rápida. Los países que más destacan a nivel de producción son India, China y Japón. Entre ellos el mayor productor es el segundo debido a los costes más bajos de fabricación y mano de obra. Por último, destacar también que se espera un crecimiento próximo del mercado del producto debido al aumento de las preocupaciones de la higiene y limpieza que han llevado al crecimiento del sector de la lavandería en la región, así como un aumento de la industria del tabaco en Japón y China. (22) (20)

Respecto a Europa, los principales contribuidores al mercado son Alemania, Reino Unido, Italia y Francia, ya que existe una amplia demanda del producto. Por otro lado, se espera que en Medio Oriente y África crezca el mercado debido al crecimiento de la industria farmacéutica en el futuro cercano. (22)

### 6.1.3. Importaciones y exportaciones

El análisis de los principales exportadores e importadores de un producto es crucial para comprender la dinámica de comercio internacional y la competitividad de las compañías en el mercado global.

En lo que a exportaciones se refiere, en el año 2021 el mercado se encontraba liderado por América del norte con aproximadamente el 40% de este. En la Figura 4 queda reflejado que los principales países exportadores de anhídrido acético fueron Estados Unidos, México, Bélgica, India y Países Bajos. Es decir, alrededor del 70% de las exportaciones a nivel mundial se produjeron por estos países. (23)

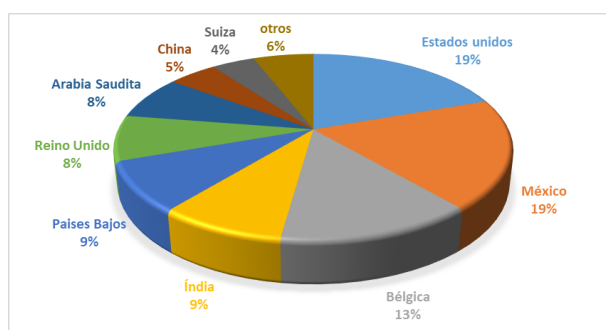


Figura 4. Países exportadores de anhídrido acético en 2021. Elaboración propia a partir de datos de: (23)

Estados Unidos es el mayor exportador de anhídrido acético y más del 80% de las exportaciones van destinadas al continente europeo, siendo Países Bajos el más relevante, ya que recibe más del 50% de las exportaciones del EE.UU. (23)

Por su parte, puede apreciarse que en la Figura 5 los países con mayor importación del producto en el año 2021 fueron Alemania, Bélgica, Países Bajos, Estados Unidos e India. Esto representa más del 60% de las importaciones. (23)

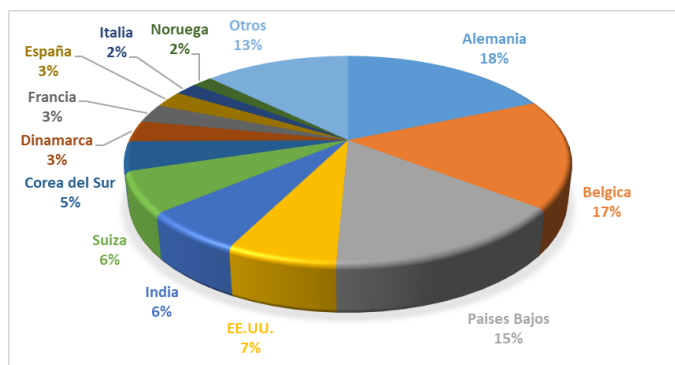


Figura 5. Países importadores de anhídrido acético en 2021. Elaboración propia a partir de datos de: (23)

Alemania es el país que recibe mayor cantidad de anhídrido acético importado del mundo. Más de un 75% del  $\text{Ac}_2\text{O}$  proviene de los siguientes países europeos: Bélgica, Países Bajos, Reino Unido y Suiza. El 25% restante corresponde a Estados Unidos, México e India. (23)

#### 6.1.4. Precios en el mercado y evolución.

Los precios del anhídrido acético fluctúan dependiendo de la localización y de la demanda de los productos que derivan del mismo.

Entre el año 2020 y 2022 hubo un aumento significativo de los precios de venta, ya que se incrementó exponencialmente la demanda de fármacos debido al COVID-19 y a la reaparición posterior de la gripe derivada de las medidas tomadas durante la pandemia. En 2022 se reportan precios medios de 0,99 €/kg en China, 1,87 €/kg en India, 1,01 €/kg en Estados Unidos y 1,9 €/kg en Europa. (24)

En los años posteriores, el precio del anhídrido ha ido disminuyendo, debido a la disminución de la demanda de fármacos, y se han registrado precios de 0,83 €/kg en China, 0,97 €/kg en India, 0,98 €/kg en Estados Unidos y 0,93 €/kg en Europa. (25)

Respecto a la situación en España, durante la pandemia, el anhídrido acético tenía un precio de venta de 2,2 €/kg, en octubre de 2022. Este valor ha ido fluctuando a lo largo del tiempo y en marzo de 2023 se registró un valor de 0,93 €/kg que, posteriormente, en junio de ese mismo año volvió a ascender hasta los 1,36 €/kg. Cabe destacar, que los precios de esta sustancia en España son mayores que la media europea, debido a los costes añadidos por el transporte. En cambio, los precios más bajos se encuentran en los países del este, puntos en donde se concentra la producción del compuesto. (26) (27)

#### 6.1.5. Principales empresas

El mercado del anhídrido acético se caracteriza por ser un mercado donde muchas empresas compiten entre sí y no hay empresas que tengan el monopolio, en la Tabla 6 se

muestran algunas de las compañías líderes del mercado de anhídrido acético mundial. Entre ellas se destacan *Celanese Corporation* y *Eastman Chemical Company*, empresas que nacieron en Estados Unidos pero que se han expandido alrededor del mundo. La primera opera en 27 países y cuenta con cerca de 50 fábricas situadas en América, Europa y Asia. Por otro lado, Eastman también opera en estos tres continentes contando con 40 fábricas. A un nivel menos internacional, pues su mercado se enfoca principalmente a clientes nacionales, destaca *Jubilant Ingrevia Ltd* el cuarto productor de anhídrido acético a nivel de ventas y que ocupa la mitad del mercado del producto en la India. (22)

Tabla 6. Principales empresas del mercado de anhídrido acético (18) (20) (28)

Empresa	Ubicación
Celanese Corporation	Estados Unidos
Eastman Chemical Company	Estados Unidos
Jubilant Ingrevia Ltd	India
BASF SE	Alemania
INEOS Group Limited	Reino Unido
Jiangsu Danhua Group Co. Ltd	China
DuPont	Estados Unidos
Daicel Corporation	Japón
Fisher Chemic	India

Respecto a los datos de producción, las compañías con mayor capacidad son: *Eastman*, que tiene una planta en Kingston, Estados Unidos, con una producción de 600.000 t/año; *INEOS* con una fábrica en Hull City, Reino Unido, que produce 200.000 toneladas al año; *Celanese* en Cangrejera, Mexico, con 100.000 toneladas al año y *Jubilant Ingrevia* que instaló recientemente una nueva planta con una producción de 60.000 t/año. También destacan otras plantas como la de *Saudi International Petrochemical Company* que coproduce 420.000 toneladas al año de ácido acético y anhídrido acético y, otras más pequeñas, como la de *Laxmi Orgnaic Industries*, en Mahad, de 20.000 toneladas al año. Además, en India la compañía *Reliance Industries* está llevando a cabo la construcción de una planta de producción que tendrá una capacidad de 750.000 t/año. (28) (29) (30)

## 6.2. Análisis de mercado del acetato de metilo

El acetato de metilo es utilizado en distintos sectores en crecimiento. Por tanto, se espera que sea un recurso disponible ya que los mercados que lo necesitan son amplios y variados. En concreto, en el año 2023 el volumen de producción de acetato de metilo ascendió a los dos millones de toneladas en todo el mundo y se espera que para el año 2030 su producción llegue a los 2,4 millones de toneladas. (31)

Un sector en el que destaca su aplicación es en el sector del embalaje. El MeOAc es una materia prima importante en la producción de tintas flexográficas que son utilizados para la impresión de material de embalaje. En la actualidad está aumentando de manera exponencial la

compra de manera online de productos, por tanto existe una gran necesidad de la producción de estas tintas y, por extensión, del metil acetato. (32)

Uno de sus principales usos es como solvente para recubrimientos y adhesivos en la industria automotriz. El sector automovilístico es un sector en auge que está en continua evolución mediante la búsqueda de mejoras para los automóviles. Los recubrimientos de metil acetato son utilizados por su gran adherencia, brillo y durabilidad y también se utiliza para volver a pintar vehículos dañados. Asimismo, se prevé que su utilización en la producción de adhesivos aumente en el sector de la construcción debido al crecimiento de potencias emergentes como China e India. (33)

También resalta su utilización como intermedio en la industria farmacéutica y en el sector cosmética, ya que hay un creciente aumento de este sector debido a la preocupación de la juventud por el cuidado de la piel. (34)

Respecto al mercado a nivel global, el continente con mayor movimiento de este producto es América del Norte, donde destaca principalmente Estados Unidos, que engloba un tercio del mercado mundial. Por otro lado están Europa y Asia, cada uno de ellos domina un cuarto del mercado. En Europa los países que más producen, importan o exportan este producto son Alemania, Francia, Reino Unido y España; y en Asia sobresalen India, Japón y China. A continuación se muestran algunas de las empresas más destacadas del sector de producción de acetato de metilo en la Tabla 7. (33)

Tabla 7. Principales empresas del mercado de acetato de metilo (34) (35)

<b>Empresa</b>	<b>Ubicación</b>
Celanese Corporation	Estados Unidos
Eastman Chemical Company	Estados Unidos
Wacker Chemie AG	Alemania
BASF SE	Alemania
Anhui Wanwei Group	China
Sichuan Chuanwei Group	China
Kishida Chemical Co., Ltd.	Japón
China Petrochemical Corp	China
Loba Chemie	India

La capacidad de producción de metil acetato de estas empresas varía entre unas y otras. Por ejemplo, *Eastman Chemical Company* produce 200.000 toneladas al año, mientras que *Anhui Wanwei Group* manufactura 100.000 toneladas al año. Por otro lado, también existen otras fábricas de menor tamaño, sobre todo en China, como *Henan Brilliant Biotech Co.* que cuenta con una capacidad de 50.000 t/año y *Qingdao Sincere Chemical Co.* de 50.000 t/año. (36) (37) (38) (39)

Por último, los precios más baratos para la compra de acetato de metilo en cantidades industriales son los ofrecido por el mercado chino, donde el precio medio ronda los 0,68€/kg.

Sin embargo, este precio varía dependiendo de la empresa y puede oscilar entre 0,42€/kg y 0,8€/kg. Estos precios también dependerán de la pureza de la materia prima deseada que varía habitualmente entre el 98% y el 99,95%, siendo evidentemente mayores los precios cuanto mayor sea el grado de pureza requerido. (40) (41)

### 6.3. Análisis de mercado del monóxido de carbono

El mercado del monóxido de carbono está segmentado principalmente en cinco sectores. Sin embargo, aproximadamente dos tercios del uso industrial que se le da al monóxido de carbono, corresponde a la industria de fabricación de metales y a la química. Se espera que el mercado global del CO experimente un crecimiento a nivel global en los próximos años, especialmente se prevé una elevada demanda en el ámbito metalúrgico e ingresos significativos en el de productos químicos. (42) (43)

El tamaño de mercado en 2022 fue de 5,6 billones de dólares y para 2032 se espera que dicha cifra aumente hasta 8,2. (43)

Las empresas líderes a nivel mundial son las recogidas en la Tabla 8.

Tabla 8. Principales empresas del mercado de monóxido de carbono. (42)

<b>Empresa</b>	<b>Ubicación</b>
Air Liquide	Francia
Linde Plc.	Irlanda
Air Products	Estados Unidos
Praxair	Estados Unidos
American Gas Products	Estados Unidos
Sipchem	Arabia Saudita
Messer	Alemania
Tosoh	Japón

Una de las empresas que dominan este mercado a nivel español es *Carburos Metálicos*. Cuenta con una capacidad de producción de más de 1200 millones de toneladas al día de diferentes gases licuados entre sus 12 plantas de producción. Entre sus productos se encuentra el monóxido de carbono a distintas purezas. También cuenta con 14 plantas de envasado y 2 laboratorios de gases de alta pureza. Desde 1995 pertenece a la compañía estadounidense *Air Products* anteriormente mencionada en la Tabla 8. (44)

Respecto al precio, este producto tiene un coste medio en el mercado de 0,2 €/kg. Siendo los precios mínimos de venta 0,17 €/kg y los máximos 0,26 €/kg. (45)

### 6.4. Conclusión análisis de mercado

Después del correspondiente estudio de mercado tanto del producto como de los reactivos, se puede concluir que el panorama del anhídrido acético es favorable. Además, el hecho de que sea un mercado en crecimiento y la ausencia de plantas de producción de  $Ac_2O$  en

España, puede representar una buena oportunidad. Esto también se ve respaldado por la existencia de proveedores capaces de abastecer las cantidades necesarias de materias primas.

## 7. Emplazamiento y localización

Para seleccionar el lugar más adecuado para la localización de la planta de producción de anhídrido acético se deben tener en cuenta una serie de factores cruciales que afectan directamente a la rentabilidad económica de la planta.

Primero se debe valorar la disponibilidad de materias primas, el acceso a transporte, red de agua y energía, además de conocer la proximidad de clientes y mercados potenciales.

Una vez consideradas diferentes zonas en donde ubicar la fábrica, es necesario considerar aspectos que posibiliten la selección de una localización determinada. Entre los que se encuentran particularidades ambientales, legislativas o consideraciones económicas entre otros.

A priori, dentro de España se pueden considerar tres posibles opciones en donde explotar producir el producto. La costa cantábrica, por zonas como País Vasco con su consolidada tradición industrial; la zona central del país, como Madrid y alrededores debido a la centralización; o la costa mediterránea, desde Andalucía hasta Cataluña.

### 7.1. Selección de la localización y parcela

Finalmente se decide que la planta se localizará en la provincia de Tarragona (Cataluña), más concretamente en el polígono industrial del Morell en la comarca de Tarragonès. La Figura 6 indica (de izquierda a derecha) la provincia y la comarca en donde se situará la fábrica.

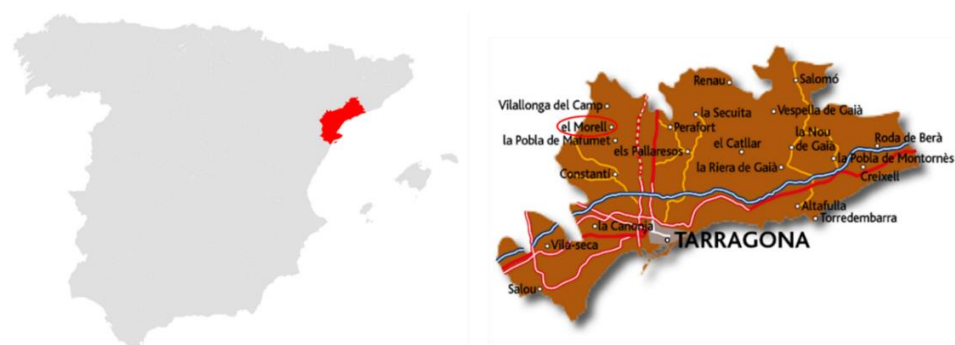


Figura 6. Provincia y comarca en donde se situará la planta. Elaboración propia a partir de: (46)

El motivo de esta elección viene dado por las ventajas que ofrece la zona. Principalmente, por el nivel de infraestructura industrial ya consolidado en la comunidad autónoma, las conexiones de transporte, el acceso a personal cualificado, suministros y materias primas, etc.

El Morell es un municipio catalán con una extensión de aproximadamente 600 hectáreas, de las cuales unas 95 pertenecen a suelo industrial. Se trata de un polígono creado en el año 2008 y su actividad abarca la industria química y farmacéutica. En la Figura 7 se puede ver en sombreado amarillo la extensión del municipio, y en morado las parcelas en las que ya existe algún tipo de planta industrial. Se observa que es una zona con bastante actividad industrial, tanto dentro de los límites del municipio como en los alrededores. (47)

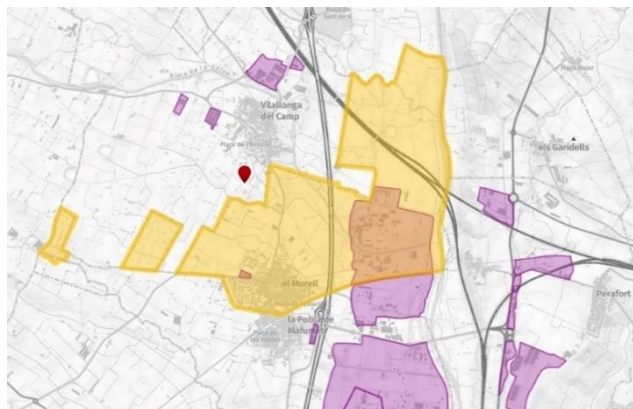


Figura 7. Extensión del municipio del Morell (amarillo) y del terreno industrial (morado). (47)

La Figura 8 muestra diferentes terrenos sombreados. El de color azul corresponde al finalmente seleccionado para la construcción de la planta de producción de anhídrido acético. Los solares colindantes corresponden a:

- **Amarillos:** Solares vacíos que no fueron seleccionados como terrenos para la planta por ser de tamaño insuficiente o por tener un difícil acceso por carretera. Sin embargo, podrían ser una buena opción para futuras ampliaciones de la planta.
- **Rojo:** Solares en propiedad de la empresa *Carburos metálicos SA* y *Messer*, principales proveedores de monóxido de carbono e hidrógeno, materias primas del proceso.



Figura 8. Terreno seleccionado y fincas colindantes. (Elaboración propia a partir de (48))

El terreno seleccionado cuenta con una extensión de 102.129 m<sup>2</sup>. Teniendo en cuenta que el precio del suelo de la zona es de 153€/m<sup>2</sup> actualmente. El coste de la parcela ascendería hasta los 15.625.737€. (49)

En los subapartados siguientes se detallan las razones de esta elección con más profundidad.

#### 7.1.1. Disponibilidad de las materias primas

Las materias primas de este proceso de producción de anhídrido acético son el acetato de metilo (MeOAc) y el monóxido de carbono (CO). Asimismo, al ser un proceso catalítico se precisa tener disponibilidad de los catalizadores y promotores implicados. El cloruro de carbonilo de rodio (Rh<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>), yoduro de metilo (MeI), yoduro de litio (LiI) e hidrógeno (H<sub>2</sub>). Por último, se requiere la adquisición de un disolvente para el sistema catalítico, que en este caso será el ácido acético (CH<sub>3</sub>COOH).

**Acetato de metilo:** Para abastecer la cantidad necesaria de esta materia prima se precisa de distintos proveedores. En la Tabla 7 se mostraban empresas productoras de este compuesto con elevadas capacidades de producción. Estas cuentan con diferentes condiciones de pureza, sin embargo alguna como *Celanese*, *Eastman* o *Wacker*, ofrecen la posibilidad de comprar acetato de metilo con purezas superiores a 99,5% como mínimo. Las posibles impurezas de la mezcla suelen ser pequeñas cantidades de metanol, agua o ácido acético (50) (51) (52). El metil acetato puede llegar a la planta mediante diferentes medios de transporte como barco o avión si se exporta desde países como Estados Unidos o China, y principalmente por tren en caso de países europeos. Finalmente, se comprará para su uso en planta a empresas chinas como *Anhui Wanwei Group* y *Sichuan Chuanwei Group* con una pureza mínima de 99,90% en peso con impurezas de ácido acético. (36)

**Monóxido de carbono:** La empresa *Carburos metálicos* mencionada en el apartado 6.3. *Análisis de mercado del monóxido de carbono*, cuenta con un servicio de suministro personalizado de monóxido de carbono según volumen, presión y pureza. Enfocado para consumo diario o como fuente de reserva en plantas de producción de procesos de carbonilación con necesidades estrictas (53). Otro factor positivo, es que el terreno contiguo al de la planta de anhídrido acético cuenta con una instalación perteneciente a *Carburos Metálicos*, por lo que se llegará a un acuerdo entre compañías para contar con una conducción que conecte ambas plantas y se garantice el suministro continuo de monóxido de carbono. En la Figura 9 se puede ver cómo es una empresa con presencia en varias partes de España, con siete puntos de distribución en Cataluña. De estos, tres se ubican en Tarragona a menos de 3,5 kilómetros la más distante a la planta de producción de Ac<sub>2</sub>O.



Figura 9. Lugares donde se localiza Carburos metálicos en España (54)

**Hidrógeno:** Es hidrógeno involucrado en el proceso también puede ser suministrado por la empresa *Carburos Metálicos*. Comercializan este producto con una pureza de hasta 99,97% (55) y uno de los métodos que emplean para producirlo consiste en el reformado con vapor de metano, donde el vapor reacciona con gas natural con unas condiciones de temperatura elevadas para obtener gas de síntesis, una mezcla de hidrógeno y monóxido de carbono. A este gas de síntesis se le puede aplicar una serie de procesos para convertir el CO en más H<sub>2</sub>. (56)

**Catalizador de rodio:** El compuesto involucrado es el cloruro de carbonilo de rodio (Rh<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>). Son varias las empresas que disponen de este con purezas de entre 97 y 98%, *Alfa Chemical*, *BLDpharm* o *Sigma-Aldrich*. (57) (58) (59)

**Yoduro de litio:** Este producto se comercializa normalmente hidratado o anhídrido. La empresa francesa *Altichem* dispone de cantidades industriales en sus almacenes para ser enviado a centros de producción europeos (60). Además, existen otras empresas como *Sigma-Aldrich* que lo proveen de forma anhídrida con una pureza superior a 99,99%. (61)

**Yoduro de metilo:** Al igual que el yoduro de litio, la empresa *Altichem* (62) dispone de grandes cantidades industriales de yoduro de metilo con un grado de calidad técnico listo para su distribución por centros de Europa. También *Sigma-Aldrich* dispone de este compuesto comercializándolo con una pureza superior a al 99,0%. (63)

**Ácido acético:** En España el ácido acético se asocia a 92 empresas, de las cuales 25 se encuentran en Barcelona (64). Suele ser comercializado de dos formas, ácido acético glacial con purezas superiores a 99,7% o con menor porcentaje ya no considerado como tal. La empresa catalana *Barcelonesa*, provee ambos tipos y tiene a su disposición varios almacenes en Cataluña y tres *shore tanks* en Tarragona, Barcelona y Motril. (65)

#### 7.1.2. Proximidad a mercados de consumo

Como se detalla en el apartado 6.1.1. *Mercados del anhídrido acético* del presente documento, de entre los mercados para los que se destina Ac<sub>2</sub>O, destacan principalmente el del acetato de celulosa y el farmacéutico.

En la Figura 10 se muestra un mapa del territorio español con el volumen de empresas asociadas al mercado de acetato de celulosa. Entre estas empresas se engloban aquellas que se dedican a la producción de dicho compuesto o en su lugar lo utilizan como materia prima en la manufactura de otros productos.

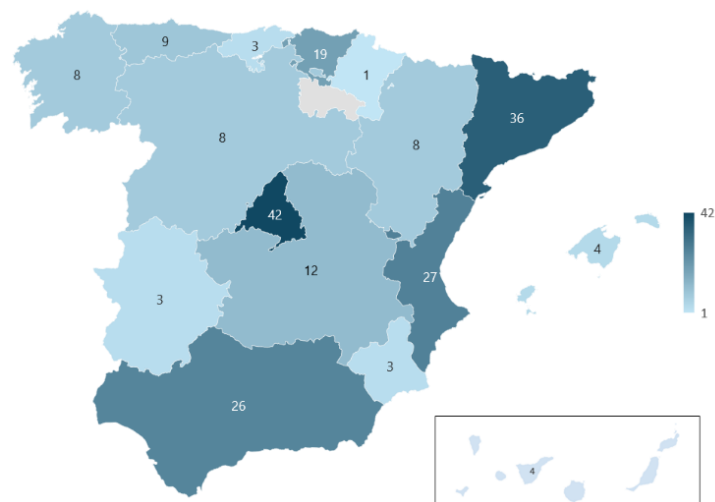


Figura 10. Volumen de empresas asociadas al mercado del acetato de celulosa en España (Elaboración propia a partir de datos de (66))

Se observa una concentración de las empresas en tres zonas predominantes: en la meseta central, la costa mediterránea y en menor medida la costa cantábrica. En la meseta central sobresale la Comunidad de Madrid, que cuenta con el número más elevado de empresas de este sector en la península. Por otro lado, en el mediterráneo se distinguen Cataluña, la Comunidad Valenciana y Andalucía. Por último, en el norte destaca el País Vasco.

En relación a la industria farmacéutica, ciento tres fueron las plantas de producción de medicamentos para uso humano registradas en el año 2022. Para este mismo año, también lo fueron veinticuatro destinadas a medicamentos de uso veterinario. Además, en el año 2020 el número de laboratorios asociados a la Federación Europea de Industrias y Asociaciones Farmacéuticas (EFPIA) era de 139 en España. (67) (68)

En la Figura 11 se pueden apreciar las plantas industriales de producción de fármacos humanos y veterinarios en España.

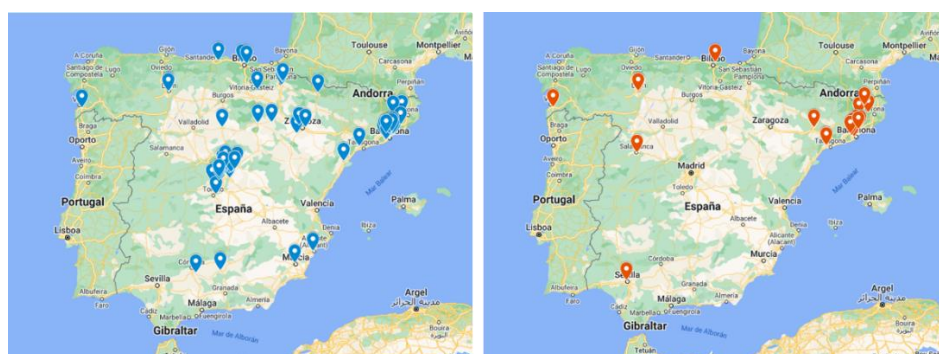


Figura 11. Plantas industriales de fármacos humanos (izquierda) y veterinarios (derecha) en España (69)

Se puede concluir que Madrid y Cataluña son puntos con elevada concentración de instalaciones industriales. Las demás fábricas de la misma índole se encuentran dispersas por el resto del territorio sobre todo por la zona norte del país.

En el ámbito internacional, aproximadamente el 70% de las importaciones de anhídrido acético a nivel mundial corresponde a países europeos. En la Figura 5 destacaban Alemania, Bélgica y Países Bajos como principales compradores del producto. Por otro lado, la eurozona cuenta con 1157 laboratorios asociados a la EFPIA. Francia es el país dentro de esta zona que cuenta con mayor número de ellos, 270 repartidos por todo su territorio. Al mismo tiempo, los laboratorios italianos son los que más produjeron monetariamente hablando, 34.300 millones de euros también en 2020. Por último, mencionar que en el año 2021 España exportó un 32% del Ac<sub>2</sub>O que produjo a escala laboratorio a Francia, un 19% al Reino Unido e incluso un 25% y 5% a Paraguay y Turquía respectivamente. (23) (68)

Por tanto, se concluye que España se presenta como un lugar favorable para la construcción de la planta de producción industrial de anhídrido acético. La combinación de un mercado sólido tanto en el propio país como en el resto del mundo ofrece una oportunidad estratégica para el crecimiento y expansión de este producto.

### 7.1.3. Disponibilidad de mano de obra

Según el Instituto de Estadística de Cataluña en 2022 el municipio de El Morell contaba con una población de 3803 personas, de las cuales el setenta por ciento tiene entre 16 y 64 años, como se recoge en la Tabla 9. Asimismo, en 2023 se registraron 172 personas desempleadas de las cuales un 8,3% tenían como ocupación anterior un puesto en la industria y un 11,0% se dedicaban al sector de la construcción. (70)

Tabla 9. Datos de la población de El Morell (70)

<b>Propiedad</b>	<b>Total</b>	<b>Hombres</b>	<b>Mujeres</b>
<b>Población</b>	3803	1956	1847
<b>0-15 años</b>	645	337	308
<b>16-64 años</b>	2645	1393	1252
<b>Más de 65 años</b>	513	226	287
<b>Residentes extranjeros</b>	503	259	244

Por otro lado, dentro de la comarca de Tarragonés sobresale, sin discusión, Tarragona como el municipio con mayor número de personas desempleadas, 6669, de las cuales un 6,8% eran trabajadores del sector industrial y un 10,2% de la construcción. (70)

Respecto a instituciones que impartan formación para trabajar en el sector destaca, en Tarragona, la *Universitat Rovira i Virgili* que cuenta con titulaciones universitarias como el Grado de Ingeniería Química, Ingeniería Mecánica, Ingeniería de Bioprocesos Alimentarios, Ingeniería Eléctrica o Ingeniería Electrónica Industrial y Automática, entre otras. Además

también se imparten diferentes estudios de posgrado como el Máster en Prevención de Riesgos laborales, de Ingeniería Ambiental y en Sistemas y Tecnologías de conversión de Energía. (71)

Asimismo, en Tarragona existen distintos centros de formación profesional en los cuales se ofertan estudios como el Grado Medio en Instalaciones Eléctricas, el Grado Superior en Sistemas Electrónicos y Automatizados, el Grado Superior en Energías Renovables, el Grado Superior en Eficiencia Energética y Energía Solar y el Grado Superior en Prevención de Riesgos Profesionales. (72)

Por tanto, se espera que en la región se pueda realizar una búsqueda de talento y que se dispondrá de una cantidad considerable de personas interesadas y aptas para trabajar en la planta de producción.

#### 7.1.4. Medios de transporte y comunicación

Una buena red de transportes es fundamental a la hora de llevar a cabo el proyecto de explotación de una planta de producción. Tanto para la obtención de las materias primas necesarias para el proceso como para la exportación del producto final.

Por otra parte, una buena conexión vial, portuaria, aeroportuaria y ferroviaria permite que las materias primas puedan llegar a la planta con facilidad, y que el anhídrido acético pueda ser exportado a diferentes lugares de manera relativamente sencilla.

- Conexión por carreteras

La privilegiada ubicación de la planta permite tener conexión prácticamente directa a la autopista A-27, permitiendo de este modo un fácil transporte tanto de materias primas como de productos. Además, como se muestra en la Figura 12, en los alrededores de la fábrica se encuentra el puerto de Tarragona, ubicado a escasos 10 kilómetros, o el Aeropuerto de Reus a unos 20. Por otra parte, la propia conexión de carreteras de Cataluña hace muy sencillo el desplazamiento dentro de ella, hacia el resto de España o incluso países europeos como Francia.



Figura 12. Mapa de carreteras de España (izquierda) y de los alrededores de la planta (derecha) (Elaboración propia a partir de (73))

- Conexión marítima

El Port de Tarragona es el quinto puerto con mayor tráfico de mercancías de España; el segundo de Cataluña después del de Barcelona. En la Figura 13 se muestran todos los puertos comerciales del territorio español, además se destaca la importancia de estos comparando su volumen de mercado.

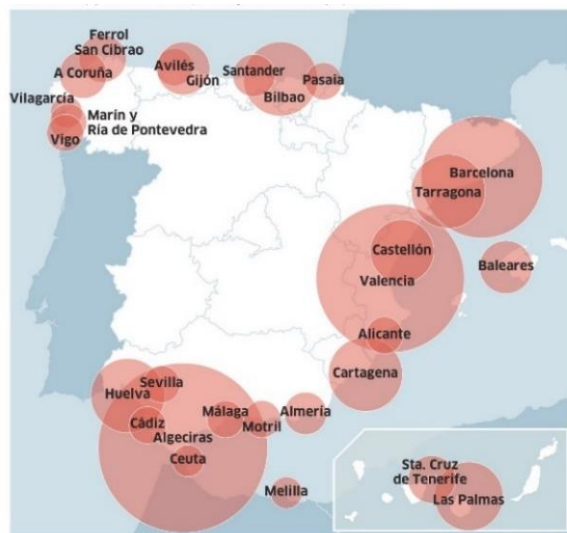


Figura 13. Puertos comerciales del territorio español (74)

Según el Instituto de Estadística de Cataluña, el puerto industrial de Tarragona alcanzó una afluencia de más de 2300 portacontenedores en el año 2022 y se llevó a cabo el transporte de cerca de 30 millones de toneladas de mercancías. En concreto, según la Memoria Anual del año 2022 del puerto de Tarragona, se ha registrado un transporte de productos químicos de cerca de dos millones de G.T., de los cuales algo más de 1.700.000 G.T. representan importaciones y exportaciones internacionales. (70) (75)

Cabe destacar que el medio de transporte que se utiliza para transportar o recoger productos químicos en el puerto es variado. Destaca la utilización de las vías de ferrocarril, camiones cisterna por carretera o incluso tuberías. (75)

- Conexión ferroviaria

Una sólida comunicación ferroviaria entre puntos clave como clientes o puertos es crucial para una industria de este calibre. España cuenta con una red de trenes de carga capaces de conectar los puntos de mayor relevancia del país en cuanto a transporte de mercancías se refiere. La Figura 14 muestra cómo se distribuye dicha red.

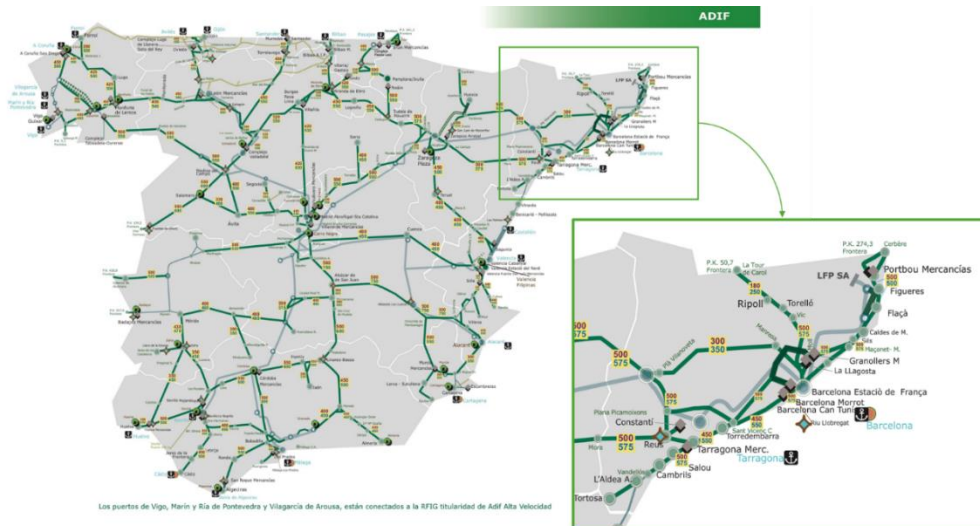


Figura 14. Mapa de la red ferroviaria para el transporte de mercancías. (Elaboración propia a partir de (76))

Una de las ventajas del terreno escogido es que limita con vías de tren. Esto proporciona un acceso eficiente a materias primas, transporte del producto, flexibilidad logística, reducción de emisiones y congestión vial.

La apuesta por el mercado internacional exige una cuidadosa gestión de distribución. En este caso, Europa cuenta con una excelente red ferroviaria de la que Tarragona forma parte. Comprender y aprovechar las principales líneas y conexiones por tren del continente, permiten una distribución efectiva del producto. En el mapa de la Figura 15 se ven las diferentes rutas.



Figura 15. Ejes ferroviarios de mercancías en Europa. (77)

- Conexión aérea

Como se ha comentado anteriormente, la región de Tarragona cuenta con un aeropuerto situado en la zona de Reus a 20 kilómetros de la planta. En estas instalaciones no se lleva a cabo transporte de mercancías, se dedica exclusivamente al transporte de personas. (78)

El aeropuerto más cercano dedicado al transporte de mercancías es el Aeropuerto Josep Tarradellas Barcelona-El Prat que se encuentra situado a 90 km de la planta. En el año 2023, se registró un movimiento de 156.000 toneladas de carga de exportación e importación y el aeropuerto cuenta con rutas comerciales a Europa, América, Asia y Oriente Medio; destacando principalmente el comercio internacional con Estados Unidos y China. (79) (80)

#### 7.1.5. Consideraciones estratégicas y políticas

Como se mencionó anteriormente en el apartado 6. *Análisis de mercado*, la construcción y puesta en marcha de una planta industrial de anhídrido acético puede ser una buena oportunidad para atraer inversores, para apoyar la industria del país o fomentar la creación de nuevos puestos de trabajo entre otros factores relevantes.

Para llevar a cabo dicha construcción y explotación de la planta de producción, será necesario acudir a ayudas y subvenciones para que el proyecto pueda ser viable económicamente. A continuación, se listan algunas de las que se solicitarán:

- Horizonte Europa: Se trata de un programa de la Unión Europea con un presupuesto de 95.517 millones de euros que pretende apoyar desafíos científicos, industriales, tecnológicos... de los Estados Miembros. (81)
- Ayudas para empresas industriales de la Generalitat de Catalunya: El gobierno catalán subvenciona proyectos industriales si cumple una serie de requisitos como que la actividad explotadora se encuentre dentro de la comunidad autónoma, que se generen como mínimo 100 puestos de trabajo, usar algún proveedor local fomentando así la dinamización de la cadena de valor... La cantidad aportada depende del tipo de empresa, no obstante entre los años 2016 y 2022 se formalizaron 66 operaciones con un valor de 188,7 millones de euros. (82)

#### 7.1.6. Impacto ambiental

La planta de producción de anhídrido acético tan solo tiene como producto el  $\text{Ac}_2\text{O}$  y no genera residuos químicos. Por otro lado, se espera que las emisiones atmosféricas contaminantes no sean significativas y que solo se den en caso de la existencia de alguna fuga inevitable.

Por otro lado, un problema actual en Cataluña es la existencia de una sequía extrema que provoca que las reservas de agua estén bajo mínimos. Actualmente, hay alrededor de 240 municipios en estado de emergencia y El Morell se encuentra en estado de prealerta, por tanto el uso del agua en la planta debe ser un tema a tratar con prudencia. (83)

Por último, a un radio de unos dos kilómetros del polígono se encuentran varias zonas residenciales que podrían verse afectadas por la actividad de la planta. Por ende, se debe tener en cuenta la necesidad de trabajar con precaución para evitar molestias acústicas, lumínicas o incluso algún derrame o escape accidental no deseado.

#### 7.1.7. Climatología y sismología

El clima de la zona donde se sitúa la planta es un factor determinante y fundamental a la hora de la selección de la localización, ya que afecta directamente al funcionamiento de la planta. La región de Tarragona presenta un clima mediterráneo, donde los veranos son secos y con temperaturas elevadas mientras que en invierno la temperatura es suave. En lo que respecta a la sismología, esta no supone un riesgo debido a la ínfima actividad en la zona. El *Documento III. Estudios con entidad propia* explica estos aspectos con más profundidad. (84) (85)

#### 7.1.8. Servicios disponibles

El Polígono del Morell cuenta en sus proximidades con los servicios básicos de emergencia en caso de que sucediese un accidente. A algo más de un kilómetro y medio se encuentra el Parc Químic de Seguret, una estación de bomberos situada en Pobla de Mafumet (86). Respecto a centros médicos, en la ciudad de Reus hay varios que cuentan con servicios de urgencias como el Centre MQ Reus y el Hospital Universitari Sant Joan de Reus. (87)

Dentro el propio polígono hay acceso a suministro de agua, energía eléctrica o gas licuado distribuido por canalización. Además, cuenta con una estación transformadora de alta tensión que permitirá garantizar los requerimientos eléctricos de la planta. (47)

Por último, mencionar que el polígono dispone de 100 plazas de aparcamiento para vehículos pesados y 250 para turismos. Asimismo, hay conexión con centros urbanos por vía ferroviaria y autobús. (47)

## 8. Análisis de viabilidad técnica

Son varios los factores que se precisan analizar para comprobar si el proceso de producción industrial de anhídrido acético por la alternativa seleccionada, es decir, carbonilación de acetato de metilo, es viable. Entre esos factores destacan la disponibilidad de materias primas, catalizadores y promotores, un solar con la capacidad suficiente, personal, servicios, tecnología. Además, el proceso solo será viable si es seguro y responsable con el ambiente.

### 8.1. Viabilidad de la tecnología

En la Tabla 2 de ventajas y desventajas de las alternativas que existen para producir anhídrido acético, se seleccionaba la vía de carbonilación por ser la que contaba con más puntos

positivos pese a su alta complejidad y coste. Sin embargo, es necesario comprobar si la tecnología necesaria para llevar a cabo el proceso está disponible y si es viable utilizarla.

El anhídrido acético es un compuesto que se sintetizó por primera vez en 1852, y que con el paso de los años se comenzó a producir a escala industrial mediante el proceso vía cetena y carbonilación de acetato de metilo. La carbonilación es una reacción de catálisis homogénea industrialmente importante. Los procesos por vía carbonilación se realizan a gran escala para producir diferentes compuestos, como el ácido acético además del anhídrido acético, en todo el mundo. (88) (89)

La empresa *Celanese* ya desarrolló a principios de los años 80 un proceso de carbonilación de metanol catalizado con rodio, mismo catalizador que el proceso del presente proyecto. Con toda la información recogida se puede concluir que el proceso de producción de anhídrido acético que se plantea será viable técnicamente. (89)

## 8.2. Disponibilidad de recursos

Cualquier proyecto de esta índole requiere una serie de recursos materiales, humanos, financieros o logísticos entre otros.

### **Recursos materiales**

Primero que todo, mencionar que el proceso no será viable si no se dispone de las materias primas, catalizadores y promotores del proceso. En el apartado *7.1.1. Disponibilidad de las materias primas* se trata este tema y queda constancia de que sí existe disponibilidad.

No obstante, hay otro tipo de recursos sin los que el proyecto no podría llevarse a cabo, como lo son las utilidades del proceso, pues los intercambiadores de calor del proceso y la camisa del reactor operan con agua de refrigeración o vapor de media presión. Son elementos básicos e indispensables en cualquier planta química, además, como se reflejó en la ubicación del terreno, la planta se encuentra en un polígono industrial rodeada de más empresas como *Repsol* o *Carburos metálicos*, dedicadas al sector de la industria química. Ya se demostró la buena conexión por cualquier tipo de vía en Tarragona, por ende se entiende que no habrá inconvenientes en tener disponibilidad de utilidades.

Las utilidades y las materias primas no son el único recurso necesario para confirmar la viabilidad del proceso. Los equipos que se encuentren instalados en la planta deben estar disponibles y al alcance. Elementos como bombas, válvulas, sistemas de control, tanques de almacenamiento o intercambiadores de calor, son equipos industriales típicos en plantas de este tipo que incluso están disponibles en catálogos. Por lo que por esa parte no habrá ningún tipo de problema. Sin embargo, las columnas de destilación y el reactor son equipos de mayor

complejidad que deben ser diseñados a medida, pero de igual manera se concluye que no debería haber ningún inconveniente, pues por ejemplo, la columna de destilación de *Repsol*, situada en la misma polígono, cuenta con una altura de 95 m y 4,2 m de diámetro. En las partes *B* y *C* del *Anexo II: Cálculos justificativos* se diseñan el Reactor R-101 y la Columna de destilación T-202 y se adelanta que sus dimensiones son mucho menores a las de la columna de *Repsol*. (90)

Por último, es importante resaltar que las bombas, el compresor y el agitador del tanque de mezcla son elementos que precisan suministro eléctrica. El consumo eléctrico total de los equipos asciende hasta los 125,7 kW. (Los valores individuales de potencia de cada equipo se determinan en el *Anexo I. Balances de materia y energía* y en la *Parte D: Dimensionamiento básico de equipos del Anexo II. Cálculos justificativos*).

### **Recursos humanos**

Un recurso indispensable es contar con un equipo profesional, ético y responsable para cualquier área de la planta. Lo principal serán los propios operarios de la planta, encargados de manejar los equipos, pero también ingenieros encargados del diseño y supervisión del proceso, técnicos de laboratorio, personal de servicios y limpieza, además de los correspondientes especialistas de seguridad de procesos y medioambiente.

Cataluña es una de las comunidades autónomas más pobladas de España, y en el apartado 7.1.3. *Disponibilidad de mano de obra* se concluyó que se sí se espera disponibilidad de personal.

Mediante la *Ecuación 2* del *Anexo III: Viabilidad económica* se calcula un total de 16 operarios en la planta. Como la producción es continua durante 24 h/día y 330 días/año, los trabajadores se organizarán en turnos de 40 h/semana en jornadas de 8 h/día. Los días se dividen a su vez en tres turnos de mañana en horario de 6:00 a 14:00, de tarde de 14:00 a 22:00 y de noche de 22:00 a 6:00. En el *Anexo III* se recoge más información acerca de los trabajadores.

### **Recursos de infraestructura**

La parcela seleccionada permite albergar todo lo necesario para satisfacer las necesidades del proyecto, zona de procesos, zona de carga y descarga, almacenamiento, servicios, etc. Además, como ya se comentó, el lugar cuenta con acceso a servicios públicos de agua, electricidad, gas... y en el apartado 7.1.8. *Servicios disponibles* se menciona que próximo a la parcela se encuentran servicios de urgencia sanitaria y una estación de bomberos. Pese a ello, la propia planta contará con servicios de emergencia propios.

### **Recursos logísticos y de gestión**

La planta debe contar con una cadena de producción controlada y continua, para ello se cuenta con un plan de inventarios que contabilice la cantidad de sustancias, fechas de recepción de materias primas y envío del producto. Por otra parte, una óptima distribución del *layout* de la planta será un factor que favorezca siempre a la logística del proceso.

Otro punto importante será la gestión de calidad del proceso, pues se busca garantizar clientes satisfechos. Eso se consigue ofreciendo un producto de calidad que cumpla con las especificaciones que se prometen junto con a una buena experiencia de compra.

Para finalizar, mencionar que un último punto beneficioso para la logística y gestión será el uso de herramientas informáticas que permitan a los trabajadores estar conectados entre ellos y tener al alcance toda la información pertinente que envuelve el proyecto. Pues no contar con este tipo de herramientas en la sociedad digital actual, limitaría la eficiencia del proceso no haciéndolo viable.

### **8.3. Seguridad del proceso**

Indiscutiblemente el proyecto no será viable si no es seguro para los trabajadores, el medioambiente y la sociedad en general. En el apartado *II. Seguridad* se explica con mayor profundidad este aspecto.

Las sustancias presentes en la planta de producción de anhídrido acético presentan una serie de peligros como inflamabilidad, toxicidad o corrosión, pero si se manipulan adecuadamente tanto en su transporte como manipulación no deberían suponer un peligro.

Siguiendo el Real Decreto 840/2015 (91) se adelanta que la clasificación de la planta según Seveso es de nivel superior, y en cuando al índice DOW (92) el reactor del proceso supone un grado de peligrosidad grave para la planta. Adicionalmente, señalar que la reactividad entre compuestos presentes es compatible a excepción de alguna mezcla en particular con la que se debe trabajar con precaución.

Las condiciones de operación del proceso son extremas en puntos del proceso como son en el reactor R-101, 50 bar y 175 °C. En el resto de proceso las presiones rondan la presión atmosférica y las temperaturas los 150 °C como máximo. Por ello se instalarán los correspondientes sistemas de control para mantener al proceso en los valores de consigna.

### **8.4. Viabilidad económica**

Para comprobar la viabilidad de un proyecto es fundamental asegurar que se pueda conseguir beneficios por la venta del producto que se desea producir.

En primera instancia, se puede evaluar la viabilidad económica calculando el beneficio bruto, que se corresponde con el beneficio teniendo en cuenta únicamente la reacción que tiene lugar en el proceso con una conversión del 100 %. Para ello, se hace uso de los precios comentados en el apartado 6. *Análisis de mercado*. La información pertinente para el cálculo se muestra en la Tabla 10.

Tabla 10. Parámetros para el beneficio bruto del proceso

Propiedad	MeOAc	+	CO	→	(Ac) <sub>2</sub> O
kmol	1		1		1
kg/kmol	74,08		28,01		102,09
kg/kg de (Ac) <sub>2</sub> O	0,73		0,27		1
€/kg	0,68		0,20		1,36
€/kg de (Ac) <sub>2</sub> O	0,49		0,05		1,36

Finalmente, se calcula el beneficio bruto como se indica a continuación. El resultado final es positivo lo que indica que el proyecto sí que podría ser viable.

$$BB = 1,36 \frac{\text{€}}{\text{kg de (Ac)}_2\text{O}} - 0,49 \frac{\text{€}}{\text{kg de (Ac)}_2\text{O}} - 0,05 \frac{\text{€}}{\text{kg de (Ac)}_2\text{O}} = 0,81 \frac{\text{€}}{\text{kg de (Ac)}_2\text{O}}$$

Posteriormente, se llevará a cabo el análisis riguroso de la rentabilidad del proyecto en el *Anexo III. Análisis de viabilidad económica*. Se calcularán distintos parámetros de rentabilidad (VAN, TIR) que indican la viabilidad del proyecto a lo largo de su vida útil, teniendo en cuenta los ingresos y costes del proyecto. Finalmente, de los resultados obtenidos se concluye que el proyecto será viable económicamente.

## 9. Descripción del proceso, instalación y equipos

### 9.1. Otros compuestos químicos

En apartados anteriores se estudiaron las características principales de las materias primas (acetato de metilo y monóxido de carbono) y del producto deseado (anhídrido acético). A continuación, se describirán de manera breve otras sustancias químicas que intervienen en el proceso.

#### 9.1.1. Cloruro de carbonilo de rodio

El cloruro de carbonilo de rodio, Rh<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>, es un sólido cristalino de color naranja rojizo. Entre sus características más destacables sobresale su gran solubilidad en la mayoría de los disolventes orgánicos, donde suele dar lugar a una disolución anaranjada. Su peso molecular es de 388,76 g/mol, su punto de fusión está entre los 120 y 125 °C y su densidad a 25 °C es de 1,23 g/mL. (93) (58)

Este compuesto de rodio es fundamental ya que en el medio de reacción se formará un complejo organometálico, que será el catalizador de la reacción. El sistema catalítico y como interviene en la reacción se explica con más detalle en la *Parte B: Reactor R-101 del Anexo II. Cálculos justificativos.* (57)

Por último resaltar el alto coste de este compuesto, pues su precio en el mercado es de 619 € el gramo. Destacar que, cada año en la parada de mantenimiento anual, este compuesto será tratado para poder eliminar los alquitranes que se pueden formar durante la operación y que reducen su actividad. Existen distintos métodos que pueden ser empleados, en este caso se utiliza una extracción en la que se utiliza yoduro de metilo para disolver los alquitranes y, después, son extraídos empleando una disolución de ácido yódico. (7)

### 9.1.2. Yoduro de metilo

El yoduro de metilo es un líquido incoloro y transparente, que se vuelve marrón al exponerse a la luz. Se produce de manera industrial a partir del alcohol de metilo, del yodo y de fósforo. Se emplea como intermediario en la fabricación de fármacos y pesticidas y en procesos de metilación. (9) (94)

En concreto, en el proceso su presencia es necesario para favorecer la cinética de la reacción química que se produce en el reactor. A pesar de ello, su inserción en el compuesto organometálico de rodio es la etapa limitante de la cinética. Su intervención en la reacción química se detalla con mayor profundidad en la *Parte B: Reactor R-101 del Anexo II. Cálculos justificativos.*

Por último, el yoduro de metilo tiene un precio elevado y, en España, su valor es de 241 euros el kilogramo. (95)

Sus características principales se muestran en la Tabla 11.

*Tabla 11. Propiedades físicas y químicas del yoduro de metilo (94) (96)*

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>	<b>Unidades</b>
<b>Peso molecular</b>	141,94	g/mol
<b>Densidad del líquido a 20 °C</b>	2279	kg/m <sup>3</sup>
<b>Punto de fusión a 101,2 kPa</b>	- 66,5	°C
<b>Punto de ebullición a 101,2 kPa</b>	42,5	°C
<b>Calor de vaporización a 25 °C</b>	27,97	kJ/mol
<b>Calor específico a 20°C</b>	82,75	J/mol·K
<b>Viscosidad a 40 °C</b>	0,424	cP
<b>Temperatura de autoignición</b>	355	°C

### 9.1.3. Yoduro de litio

El yoduro de litio es un sólido cristalino de color blanco con un peso molecular de 133,85 g/mol, un punto de fusión de 469 °C y una densidad de 4,08 g/mL. En la industria se

emplea habitualmente como catalizador en la síntesis de sustancias orgánicas, como medio de transferencia de calor en reactores de sales fundidas o para fabricar baterías de litio. (97)

En concreto, se emplea como promotor en el sistema catalítico, reaccionando en primer lugar con el acetato de metilo y recuperándose al final de la reacción. Estas reacciones en las que participa se profundizan en la *Parte B: Reactor R-101 del Anexo II. Cálculos justificativos*.

Para finalizar indicar que el precio del yoduro de litio al 99,9 % ronda los 60 €/kg. (98)

#### 9.1.4. Ácido acético

El ácido acético es un líquido orgánico incoloro y con un olor muy característico. Es producido principalmente en la industria por la carbonilación de metanol o mediante procesos de fermentación. Se emplea principalmente para producir vinagre o para manufacturar otras sustancias en la industria química y en el sector cosmético y farmacéutico. En concreto, en el proceso del presente proyecto se introduce como disolvente del sistema catalítico. (99)

Por otro lado, los precios del ácido acético a fecha de 2024 oscilan entre los 0,327 €/kg y los 0,576 €/kg. Por tanto, se obtiene un precio medio de venta en el mercado de 0,451 €/kg. (100)

Algunas de sus características físicas, químicas y termodinámicas se presentan en la Tabla 12.

Tabla 12. Propiedades del ácido acético (101)

Propiedad	Valor	Unidades
<b>Peso molecular</b>	60,05	g/mol
<b>Densidad del líquido a 20 °C</b>	1051	kg/m <sup>3</sup>
<b>Punto de fusión (a 101,2 kPa)</b>	16,6	°C
<b>Punto de ebullición (a 101,2 kPa)</b>	117,9	°C
<b>Calor de vaporización a 25 °C</b>	23,36	kJ/mol
<b>Viscosidad a 25 °C</b>	1,056	mPa·s

#### 9.1.5. Hidrógeno

El hidrógeno es un gas sin color ni olor característico. Entre sus características destaca su inflamabilidad, ya que es la sustancia más inflamable conocida. Tiene un peso molecular de 2,016 g/mol, su densidad a 20 °C es de 0,071 g/mL y su punto de ebullición es -257,9 °C. Su aplicación se encuentra en multitud de sectores como el químico, alimentario, metalúrgico o en el de la energía, utilizándose como combustible. (102) (103)

En el proceso se requiere la presencia del hidrógeno en el reactor para favorecer la actividad del catalizador y aumentar su estabilidad. Se debe introducir en el reactor junto al monóxido de carbono y debe estar con una composición inicial del 5% molar.

En el mercado se pueden adquirir distintos tipos de hidrógeno dependiendo de su procedencia y grado de sostenibilidad. En este caso, como se requiere en el sistema en poca cantidad, se ha adquirido hidrógeno verde a partir de la compra de botellas de 50 litros a la empresa *Carburos Metálicos*. El precio de cada botella es de 130 €. (55)

## 9.2. Descripción detallada del proceso

Se va a proceder a una descripción detallada del proceso de carbonilación de acetato de metilo para la producción de anhídrido acético. Se divide en dos secciones, la 100, destinada al acondicionamiento de materias primas y zona de reacción, y la 200, enfocada a la separación del producto. El diagrama de flujo del proceso se presenta en el *Plano N° 3 del Documento II*.

Las materias primas de partida son acetato de metilo y monóxido de carbono. El acetato de metilo, con una pureza del 99,90% en peso, se introduce al proceso por la corriente 1 en estado líquido y condiciones de presión y temperatura de 1,01 bar y 20 °C respectivamente, con un caudal másico de 9144,19 kg/h. Esta confluye con la corriente 2, encargada de la entrada de ácido acético al proceso en las mismas condiciones de presión y temperatura que la corriente 1 y un caudal de 28,07 kg/h. La unión de las dos primeras corrientes mencionadas resulta en la corriente 3, que soporta un flujo másico de 9172,26 kg/h y de nuevo 20 °C de temperatura y 1,01 bar de presión. Esta tercera conducción ingresa a la bomba P-101 A/B con el fin de bombear la mezcla hasta el tanque de mezcla TM-101 por la corriente 4, con unas condiciones de 20,21 °C y 2,89 bar e igual caudal que la corriente 3. Por la caída de presión a través de la tubería llega al tanque de mezcla con una presión de 1,25 bar. Al TM-101 también ingresa la corriente 25 a 117 °C y 1,25 bar, la cual contiene una mezcla de catalizadores, promotores, anhídrido acético, ácido acético y metil acetato no reaccionante proveniente de la corriente de salida de líquidos del separador flash V-201, con un caudal de 3600,10 kg/h. Del mismo modo, las corrientes 26 y 27 son otras de las entradas del mezclador TM-101. En este caso, corresponden, en ese orden, a las salidas por cabezas de las columnas de destilación T-201 y T-202 donde la 26 alberga principalmente yoduro de metilo, acetato de metilo no reaccionante y una pequeña fracción de ácido acético. El caudal másico y las condiciones de presión y temperatura de dicha corriente a la entrada del tanque son 11660,23 kg/h, 1,25 bar y 46,54 °C. Por su parte, la corriente 27 con un caudal de 3942,89 kg/h rico en CH<sub>3</sub>COOH y en menor medida Ac<sub>2</sub>O, tiene unas condiciones de 1,25 bar en el tramo final de la conducción y 126,22 °C. La corriente resultante del mezclador, corriente 5 con un flujo de 28375,48 kg/h, es bombeada hasta 50 bar mediante la bomba P-102 A/B obteniendo la corriente 6 la cual va a ser calentada en el intercambiador E-101 empleando vapor de media presión (mps) hasta 175 °C. Estas modificaciones se llevan a cabo para alcanzar las condiciones de entrada, corriente 7, del reactor R-101.

En cuanto al monóxido de carbono, se incorpora al proceso puro por la corriente 8 en fase gas y a razón de 3454,12 kg/h. Las condiciones de presión y temperatura son 51,50 bar y 20 °C. Esto es posible debido a que el proveedor de esta materia prima ofrece generación de gases in situ con requisitos de pureza, presión y caudal personalizados. (104). Sin embargo, como dicha empresa cuenta con una instalación situada en el mismo polígono industrial que la planta de anhídrido acético, se decide establecer una conexión entre instalaciones mediante gaseoductos.

La corriente 8 es mezclada con hidrógeno y monóxido no reaccionante a razón de 3480,28 kg/h, corriente 12. La unión de estas corrientes daría lugar a la número 9, que tendría un caudal másico de 6934,40 kg/h, 50,91 bar y 108,53 °C. Como las condiciones del reactor son 50 bar y 175 °C, la corriente 9 se introduce en el intercambiador de calor E-102 en donde se eleva la temperatura hasta los 175 °C deseados usando mps y dando lugar a la corriente 10 de entrada de gases al reactor R-101. Este es de tipo burbujeo, de ahí la necesidad de dos corrientes de entrada, una de líquido y otra de gas equipada con un difusor que distribuya la mezcla CO-H<sub>2</sub> por toda el área transversal del reactor. Además, el equipo de reacción alberga una reacción exotérmica por eso se encuentra equipado con una camisa operada por agua de refrigeración y con un aislante.

En la cabeza del reactor, se ubica la corriente 11 de salida de gases, cuyas condiciones y caudal másico son 3480,28 kg/h, 48,59 bar y 175 °C respectivamente. Esta última corriente mencionada sirve como alimentación del compresor C-101, el cual tiene como salida la corriente 12 ya mencionada. En relación al reactor, faltaría por mencionar la salida de líquidos por la corriente 13 con 31829,60 kg/h, 175 °C y 51,41 bar. Albergaría a los promotores y el acetato de metilo que no reaccionó, junto al ácido acético y al anhídrido acético. Con esto finalizaría la sección 100 del proceso y de aquí en adelante comenzaría la sección 200 del proceso.

La válvula VLV-201 une las corrientes 13 y 14 con el objetivo de reducir la presión de 51,41 a 3,01 bar. Debido a la disminución de la presión, la temperatura también sufre un cambio descendiendo hasta los 134,95 °C. El siguiente punto del proceso sería el evaporador parcial E-201, con la corriente 14 como entrada, la 15 como salida y mps empleado para calentar y evaporar la mezcla. En este punto el caudal másico es de 31829,60 kg/h, la temperatura de 154,80 °C y la presión ha descendido hasta los 2,66 bar debido a la caída de presión en el intercambiador. La corriente 15 actúa como alimentación del flash V-201 que a su vez se divide en la corriente 16 de salida líquida y la 17 de salida de vapor. Este equipo tiene la función de separar el catalizador de rodio y el yoduro de litio disueltos por la parte baja para ser recirculado al reactor.

Esta estrategia se debe a que como varios de los catalizadores y promotores son sólidos disueltos en la mezcla líquida, se precisa que permanezcan en disolución. Por lo que por la salida de líquido, corriente 16, habría un caudal másico de 3600,10 kg/h y por la de vapor, corriente 17, uno de 28229,50 kg/h. Como la corriente 16 no puede ingresar directamente al tanque de mezcla debido a sus condiciones, se hace pasar por el intercambiador E-207, operado con agua de refrigeración, con la que la temperatura bajaría hasta los 117 °C y obteniendo la corriente 24. En este punto tampoco se podía descargar en el TM-101 puestos que primero habría que adecuar la presión de la corriente 24 mediante el uso de la válvula VLV-203, pasando de 2,55 bar a los 1,25 bar de la corriente 25, ya mencionada al comienzo del apartado. Por lo general, en combinaciones de este tipo en las que es necesario modificar presión y temperatura, se suele variar primero la presión, pero en este caso para evitar que se formara una corriente con dos fases líquido-vapor se decidió aplicar esta disposición.

Recapitulando, en la corriente 17 de salida del vapor del flash, sus condiciones de presión y temperatura son 2,65 bar y 154,80 °C. Estas condiciones no son las óptimas para introducirse en la primera columna de destilación T-201. Por ende, se hace atravesar la corriente por la válvula VLV-202 y el intercambiador E-202, dando lugar a las corrientes 18 y 19 con unas presiones y temperaturas respectivas de 1,42 y 1,07 bar y 154,80 y 78,47°C. La corriente 19 con un flujo másico de 28229,50 kg/h actúa como alimentación de la primera de las dos torres, entrando como líquido saturado.

La T-201 está equipada con los correspondientes equipos auxiliares (caldera, condensador, bomba de reflujo...). La corriente 20 de cabezas, con 46,37°C, 1,01 bar y 11660,23 kg/h de una mezcla cuaternaria formada por anhídrido y ácido acético, yoduro de metilo y acetato de metilo, es impulsada hasta el tanque de mezcla empleando la bomba P-203 A/B, que da lugar a la corriente 26 ya explicada. Por otro lado, la cola de esta primera columna, corriente 21, también es la alimentación a la segunda columna de destilación T-202. En esta se encontraría una mezcla binaria de anhídrido y ácido con 16569,27 kg/h y 1,17 bar de presión y 136,05°C, pero por culpa a la caída de presión debida al arrastres por la tubería la presión con la que llega la mezcla justo a la entrada de la T-202 son 1,15 bar. En esta columna, se busca la separación de estos dos compuestos con el fin de obtener la máxima pureza de anhídrido acético y un caudal tal que satisfaga la producción de 100.000 t/año de este producto. Las dimensiones entre columnas son diferentes pero el funcionamiento es análogo. Por la cabeza de la segunda torre, corriente 22, las condiciones son de 126,04°C, 1,01 bar y 3942,89 kg/h con más de un 75% de ácido. Haciendo uso de la bomba P-204 A/B, se impulsa la corriente 27 hasta TM-101.

Finalmente se obtiene la corriente 23, de colas de la T-202, con un caudal de 12626,38 kg/h de anhídrido acético con una pureza del 99,7% y 143,02 °C y 1,74 bar. Esta corriente 23 se

hace atravesar por el intercambiador E-208 con el finde enfriar el la corriente y almacenar el producto a una temperatura no tan elevada.

### 9.3. Descripción de la instalación

Una buena distribución de los diferentes elementos que exige una instalación industrial de este tipo es crucial para la correcta explotación del lugar. Sumado a esto, una buena ergonomía favorece a la eficiencia, seguridad y comodidad del proceso y del personal.

Además de los propios equipos del proceso, también se debe contar con laboratorios, sala de control, zona de carga y descarga, despachos... A continuación se describirán brevemente las diferentes zonas de la planta.

**Zona de carga y descarga:** Es necesario disponer de una zona habilitada para este fin para poder descargar materias primas, suministros u otros y cargar productos salientes. Sin ella no sería posible llevar a cabo una buena logística.

**Zona de almacenamiento:** Su ubicación debe ser próxima a la zona de carga y descarga para favorecer a la economía, medioambiente y óptimo flujo de tráfico en el interior de las instalaciones. Su función es la de conservar de manera ordenada y segura materias primas, productos, catalizadores...

**Zona de proceso:** Sin duda la zona más amplia y el corazón de cualquier planta química. Es el lugar donde se encuentran los equipos distribuidos de forma estratégica para propiciar la mayor eficiencia y eficacia. Es la zona en la cual las materias primas, es decir, el monóxido de carbono y el acetato de metilo, son sometidas al proceso en donde se van a transformar en un producto de valor añadido.

**Zona de mantenimiento:** Encargada de conservar en el mejor estado posible las instalaciones de la planta. Busca desde la revisión, cuidado y limpieza de los equipos e instalación, hasta la reparación o sustitución de las mismas de ser preciso. Sin ella, el óptimo funcionamiento de la planta de anhídrido no sería posible, pues sin las inspecciones periódicas necesarias en industrias de este estilo, se verían afectados aspectos como la seguridad o la satisfacción de los clientes.

**Zona de laboratorios y control de calidad:** Crucial para garantizar que el producto final cumple con las características deseadas. Sirve para detectar posibles fallos o irregularidades que han de ser mejoradas para satisfacer las necesidades del cliente. Uno de los ejemplos de aplicación en la planta de producción de anhídrido acético sería controlar la pureza del compuesto.

**Zona de servicios:** Lugar en donde se hallarían las oficinas, salas de reuniones, aseos, vestuarios, cafetería, comedor, etc.

**Zona de control de proceso:** Destinada al monitoreo y supervisión del proceso, examinando que todos los equipos operen de la forma deseada. Entre los elementos que se pueden encontrar en su interior destacan pantallas, alarmas, sistemas de detección de incendios, paneles de control, etc. Uno de los usos de esta zona se observa de forma clara en el reactor, este opera a unas condiciones de 175 °C y 50 bares de presión. Una pequeña anomalía en el caudal de entrada o con el fluido refrigerante podría ocasionar desastres fatales.

**Zona de tratamientos:** Esta área se centra en la gestión y tratamiento de los residuos que se generen en la planta. Además, también se encarga de regenerar y reactivar el catalizador y promotores del proceso en las paradas de mantenimiento anuales, ya que como se comentó anteriormente, el coste del catalizador es muy elevado y es inviable tanto económica como medioambientalmente sustituirlo por uno nuevo.

**Zona de utilidades:** En esta zona se almacenan y se tratan las utilidades que retornan del proceso, como el agua de refrigeración o el vapor de media presión, con el fin de poder volver a utilizarlos en el proceso.

## 9.4. Descripción de los equipos

### 9.4.1. Sección 100

**Bomba P-101 A/B:** El objetivo de este equipo es impulsar la corriente de entrada del acetato de metilo y del ácido acético, corriente 3, desde sus tanques de almacenamiento hasta el tanque de mezcla TM-101. Por tanto, se emplea para aumentar la presión de 1,01 bar a 2,89 bar, para que sea introducido por la parte inferior del tanque a una presión de 1,25 bar. Se incluyen dos bombas centrífugas en paralelo, para que, en caso de que la bomba P-101 A deje de funcionar por algún fallo o se necesite realizar mantenimiento, la bomba P-101 B pueda ser empleada como repuesto.

**Mezclador TM-101:** Este equipo se encarga de unificar en una única corriente de salida el acetato de metilo fresco con las corrientes recirculadas de catalizador, promotores, disolvente y metil acetato no reaccionante. Además se encarga de ayudar a los compuestos sólidos a ser disueltos en la mezcla. Del equipo sale la corriente 5 a una temperatura de 63,09 °C y una presión de 1,25 bar.

**Bomba P-102 A/B:** Con este equipo se busca acondicionar la mezcla de la corriente 5, junto con el intercambiador de calor E-101, para alcanzar las condiciones de operación

requeridas por el reactor del proceso, las cuales son 50 bar y 175 °C. Por tanto, se emplea para aumentar la presión de 1,25 bar a 50,59 bar.

**Intercambiador de calor E-101:** Como se menciona en la descripción del equipo anterior, este intercambiador es el paso previo a la corriente de entrada de líquidos al reactor, corriente 6. Tiene como objetivo aumentar la temperatura de la mezcla de los 65,64 °C a los 175 °C, temperatura de operación del reactor R-101.

Se emplea un intercambiador de calor de carcasa y tubo con dos pasos por carcasa que emplea como fluido de servicio vapor de media presión, que disminuye de temperatura desde los 185 °C a los 162 °C. En este caso la mezcla que se quiere calentar circula por el interior de los tubos y el vapor por la carcasa.

**Intercambiador de calor E-102:** Intercambiador empleado para acondicionar la corriente de gas de entrada al reactor, corriente 9. Tiene como objetivo aumentar la temperatura de la mezcla de los 108,53 °C a los 175 °C.

Se emplea un intercambiador de calor de carcasa y tubo con dos pasos por carcasa que emplea como fluido de servicio vapor de media presión, que disminuye de temperatura desde los 185 °C a los 165 °C. En este caso la mezcla que se quiere calentar circula por el interior de los tubos y el vapor por la carcasa.

**Reactor R-101:** Reactor de burbujeo donde se produce la reacción de carbonilación del acetato de metilo, de carácter exotérmico. Como opera de manera isotérmica, a 175 °C, se emplea una camisa de media tubería por la que circula agua de refrigeración, para retirar el calor generado por la reacción.

Se trata de un recipiente cilíndrico con orientación vertical de acero inoxidable AISI 316 y su diseño riguroso se lleva a cabo en el *Anexo II. Cálculos justificativos*. El volumen total del reactor es de 60,38 m<sup>3</sup>, teniendo un diámetro interno de 2,34 m y una altura total de 21,76 m (contando los cabezales y el soporte).

La corriente líquida entra por la parte superior de la columna y sale por la parte inferior. Por otro lado, la corriente de gas entra por la parte inferior del reactor mediante un distribuidor y sale por la parte superior.

**Compresor C-101:** Compresor reciprocante empleado para aumentar la presión de la corriente gas que sale del reactor R-101, corriente 11. Su objetivo es aumentar la presión de 48,13 bar a 51,06 bar, para que la corriente gas entre al reactor a 50 bar.

#### 9.4.2. Sección 200

**Válvula VLV-201:** Válvula sellada con fuelle cuya función es reducir la presión de la corriente líquida de salida del reactor con el fin de alcanzar la presión deseada para separar la mezcla en el separador flash V-201. Se reduce la presión de 51,39 bar a 3,01 bar y se caracteriza por haber un cambio de fase que produce la evaporación del 27% en peso de la mezcla.

**Intercambiador de calor E-201:** Evaporador parcial para acondicionar la corriente de entrada al separador V-201. Tiene como objetivo aumentar la temperatura de la mezcla de los 134,95 °C a los 154,80 °C, consiguiendo que la corriente de salida este formada por un 88,7 % de vapor.

Se emplea un intercambiador de calor de carcasa y tubo de un único paso por carcasa que emplea como fluido de servicio vapor de media presión, que disminuye desde los 185 °C a los 162 °C. En este caso la mezcla que se quiere calentar circula por el interior de los tubos y el vapor por la carcasa.

**Separador flash V-201:** En este tanque se separan las dos fases obtenidas del intercambiador de calor E-201. El objetivo principal de este equipo es obtener una corriente líquida que contenga la totalidad del  $\text{Rh}_2(\text{CO})_4\text{Cl}_2$  y del LiI para que puedan ser recirculados al reactor, corriente 16.

**Válvula VLV-202:** Válvula de globo empleada para reducir la presión de la corriente de vapor que sale del separador V-201. Se reduce la presión de 2,65 bar a 1,42 bar, para que la mezcla llegue a la torre de destilación T-201 a una presión de 1,06 bar.

**Intercambiador de calor E-202:** Condensador total empleado para lograr que la corriente 19 entre a la columna de destilación T-201 como líquido saturado. Se reducirá la temperatura de la corriente 21 de los 154,80 °C a los 78,47 °C

Se emplea un intercambiador de calor de carcasa y tubo que emplea como fluido de servicio agua de refrigeración, que aumenta desde los 26 °C a los 45 °C. En este caso la mezcla que se quiere enfriar circula por el interior de los tubos y el agua por la carcasa.

**Columna de destilación T-201:** Es la primera torre de las dos presentes en el proceso. Una mezcla cuaternaria ingresa al equipo por la corriente de alimentación y su función será separar por colas una mezcla de ácido acético y anhídrido acético, es decir, los dos compuestos más pesados de la mezcla, y por cabezas acetato de metilo y yoduro de metilo junto a una pequeña cantidad de ácido acético. Está equipada con un condensador total operado con agua de refrigeración que devuelve una corriente de destilado a 46,37°C y presión atmosférica, y una caldera en la parte inferior que emplea vapor de media presión como fluido calefactor. La

corriente de colas sirve de alimentación para la siguiente columna del proceso y sus condiciones son 136,05°C y 1,17 bar. Ambos equipos auxiliares son intercambiadores de calor de tipo carcasa y tubos con un único paso por carcasa.

**Columna de destilación T-202:** Este equipo se diseña rigurosamente en la *Parte C del Anexo II. Cálculos justificativos*. Se trata de una columna de destilación de platos con un total de 71 etapas de equilibrio post eficiencia. Los platos son de tipo perforado con una separación entre ellos de 0,5 m, lo que hace que la altura total de la columna, contando el soporte de 4 m y los cabezales toriesféricos, sea de 45,30 m. El diámetro interno es de 1722 mm y contando con el espesor de carcasa y del aislante sería de 1800 mm. Mencionar que está equipada con las correspondientes bombas de reflujo, tanque de reflujo, condensador total y caldera. Estos dos últimos, al igual que los de la T-201, son de tipo carcasa y tubos con un único paso por carcasa.

A la torre se introduce una corriente pseudo-binaria de anhídrido acético y ácido acético a 1,15 bar y 136,05 °C, y pretende separar por colas el anhídrido acético a la pureza de venta y por cabezas una mezcla de los dos compuestos cuya composición es más rica en ácido.

**Intercambiador de calor E-207:** Se emplea para reducir la temperatura de la corriente líquida que sale del separador V-201, corriente 16, desde 154,8 °C hasta los 117,0 °C, para evitar que se produzca la vaporización de las sustancias al introducirse en el tanque TM-101.

Se emplea un intercambiador de doble tubo que emplea como fluido de servicio agua de refrigeración, que aumenta desde los 26 °C a los 45 °C. En este caso la mezcla que se quiere enfriar circula por el tubo interno y el agua de refrigeración por el tubo externo.

**Válvula VLV-203:** Válvula de globo empleada para reducir la presión de la corriente líquida que sale del separador V-201, que se desea recircular hacia el tanque de mezcla TM-101. En concreto, se utiliza para disminuir la presión de 2,52 bar a 1,26 bar, para que llegue al tanque de mezcla a presión deseada de 1,25 bar.

**Bomba P-203 A/B:** En este equipo se busca impulsar la mezcla de la corriente 20 para hacerla llegar hasta el tanque de mezcla TM-101. Se utiliza para aumentar la presión de 1,01 bar a 3,58 bar, para que la mezcla llegue al tanque a presión requerida.

**Bomba P-204 A/B:** En este equipo se busca impulsar la mezcla de la corriente 22 hasta el mezclador TM-101, además se utiliza para aumentar la presión de 1,01 bar a 4,34 bar.

**Intercambiador de calor E-208:** Se emplea para reducir la temperatura de la corriente de colas, corriente 23, que sale de la columna T-202. Para que el anhídrido acético al 99,7 % en peso pueda ser almacenado en el tanque de almacenamiento a una temperatura adecuada. Se reduce la temperatura de 143,02 °C a 27 °C.

Se emplea un intercambiador de calor de carcasa y tubo con un único paso por carcasa, que emplea como fluido de servicio agua de refrigeración, que aumenta desde los 26 °C a los 45 °C. En este caso la mezcla que se quiere enfriar circula por el interior de los tubos y el agua por la carcasa.

## 10. Control e instrumentación

### 10.1. Introducción

Los sistemas de control de procesos hacen referencia al conjunto de los equipos que permiten mantener las condiciones especificadas de un sistema, mediante el ajuste de determinadas variables. (105)

Los sistemas de control pueden trabajar de forma manual o automática. Se dice que está en manual o abierto cuando el controlador no está conectado al proceso, por lo que es el operario quien decide como actúa la variable manipulada. Por el contrario, el sistema está en automático o cerrado cuando el controlador está conectado y es este el que decide como debe actuar la variable manipulada. Normalmente, en el arranque de una planta, los sistemas suelen estar en manual, para que los operarios puedan llevar al sistema a las condiciones deseadas. Una vez alcanzado el estado estacionario se ponen en automático. (105)

A continuación, se explicarán una serie de conceptos relevantes en el área de control:

- Variable controlada: Variable que se pretende mantener en un valor deseado.
- Set-point: Valor que se desea que mantenga la variable controlada. El objetivo principal del sistema de control suele ser asegurar que este valor se mantenga constante durante la operación. (105)
- Variable manipulada o de control: Variable que se pretende modificar para compensar o corregir las distintas perturbaciones que puedan afectar a la variable controlada. (105)
- Perturbación: Factor externo al sistema que desencadena un cambio en la variable controlada. En los procesos químicos existen muchas variables que pueden afectar al sistema, pero solo algunas de ellas afectan al proceso de manera significativa. (105)
- Offset: Diferencia producida entre el valor de la variable controlada y el *set-point*.

Los sistemas de control constan de cinco elementos básicos. Estos elementos se describen a continuación:

- Sensor: Instrumento empleado para medir las variables que se desean controlar o las variables secundarias, que permiten conocer el valor de otras que no se pueden medir de

manera directa. Existen distintos tipos dependiendo de la variable que se desee controlar (temperatura, presión, caudal, etc.) (105)

- **Transmisor o transductor:** Instrumentos que convierten la magnitud física medida por el sensor en una señal eléctrica, neumática o digital, para que pueda ser transportada y analizada por el controlador. Normalmente la convierte en una señal eléctrica de entre 4 y 20 mA o en una neumática de entre 3 y 15 psi. (105)
- **Controlador:** Instrumento que recibe la señal del transmisor y calcula la acción de corrección necesaria, dependiendo del algoritmo de control empleado. El cálculo realizado por el equipo se convierte en una señal que es enviada al elemento final de control. (105)
- **Actuador:** Instrumento que actúa sobre la variable manipulada siguiendo la acción indicada por el controlador. Normalmente, en los procesos químicos, el elemento final es una válvula de control, para modificar el caudal de una corriente. (105)
- **Proceso:** Sistema donde se llevan a cabo las operaciones químicas y físicas y sobre el cual se desea realizar el control. Está formado por todos los equipos que integran el proceso (bombas, reactores, intercambiadores, etc.).

## 10.2. Método de control

Existen distintos métodos empleados a nivel industrial para controlar las variables que se desean en el sistema. En la planta de producción de anhídrido acético se ha decidido utilizar de manera mayoritaria el control *feedback*, el cual es el más simple y empleado. Este método consiste en comparar la medida de la variable de proceso (VP) con el valor del *set-point* (SP). De esta manera, si se detecta cierto grado de error, el controlador envía una señal al actuador para que cambie la variable manipulada (VM), devolviendo la variable del proceso al *set-point*. En la Figura 16 se presenta un esquema del control *feedback*. (106)

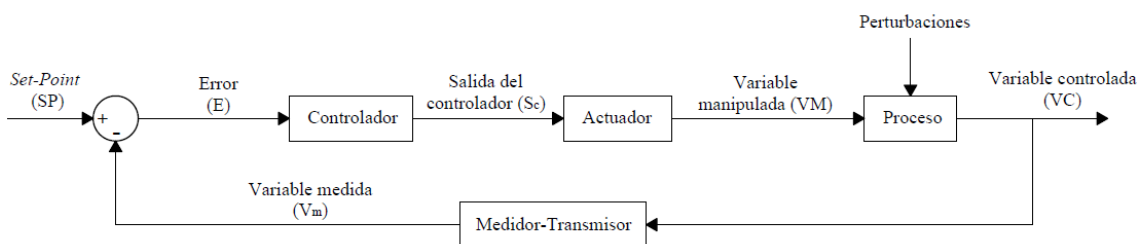


Figura 16. Lazo de control *feedback* (Elaboración propia)

Por otro lado, es necesario indicar que cada uno de los elementos del lazo de control tiene una acción particular, es decir, tiene una forma distinta de relacionar la señal de entrada con su respuesta de salida. Los elementos se clasifican en dos tipos dependiendo de la acción:

- Elemento de acción directa: Un aumento de su entrada produce un aumento en su salida y una disminución de su entrada produce una disminución en su salida.
- Elementos de acción indirecta: Un aumento en su entrada produce una disminución en su salida y una disminución en su entrada produce un aumento de su salida.

Cabe destacar, que los controladores son los últimos equipos en los que se especifica la acción, ya que pueden tener ambas. Por ello, una vez que se conoce la acción del resto de elementos del lazo, se especifica su acción para que el lazo tenga una acción indirecta. (106)

### 10.3. Algoritmos de control

Los algoritmos de control son las ecuaciones internas del controlador, que permiten que sea capaz de actuar frente a perturbaciones. Existen tres acciones básicas de control: proporcional (P), integral (I) y derivativa (D). Normalmente se combinan para dar lugar a otros algoritmos. Los tres más empleados en la industria para los sistemas de control se describen en la Tabla 13. (106)

Tabla 13. Algoritmos de control. (106)

Símbolo	Descripción
Proporcional (P)	Método más sencillo. Consigue detener las oscilaciones de la variable controlada, pero no la devuelve al <i>set-point</i> , siempre hay cierto grado de error. Sin embargo, tiene un velocidad de respuesta más rápida que el resto de los controladores.
Proporcional-Integral (PI)	Es el tipo de controlador más empleado en las plantas químicas. Destaca, ya que la acción integral, permite devolver completamente la variable controlada al <i>set-point</i> . Asimismo, al tener acción proporcional, el tiempo de respuesta no es mucho menor al del proporcional.
Proporcional-Integral-Derivativo (PID)	Gracias a la acción derivativa, el controlador permite proporcionar un tiempo de respuesta similar al del controlador P, y, además, no produce <i>offset</i> . Sin embargo, la acción derivativa, también provoca que no sea adecuada si hay ruido en el sistema.

Para seleccionar el controlador más adecuado es necesario conocer el sistema que se desea controlar. Ya que la selección de un algoritmo u otro depende de las características del proceso.

En la planta se ha decidido seleccionar los controladores P cuando se desea controlar el nivel de los tanques, ya que una pequeña variación en el nivel no afecta de manera significativa al sistema. Por tanto, se prefiere la selección de este algoritmo ya que es el más simple y rápido.

Sin embargo, para controlar la presión, el caudal y la temperatura se han seleccionado controladores PI, ya que se requiere un control preciso de estos parámetros, no se desea que se produzca *offset* y, además, son los más recomendados en la industria.

#### 10.4. Nomenclatura empleada

Para identificar los elementos de los lazos de control se emplea una nomenclatura internacional, que sigue el estándar ISA-5.1-1984. Esta guía establece un sistema de símbolos y códigos de identificación que permiten designar los distintos instrumentos empleados para la medición y el control. (107)

Según la norma, los elementos deben estar identificados por un código alfanumérico, formado por tres letras y tres números. Respecto a las letras, la primera indica la variable que se quiere controlar en el sistema y las letras sucesivas se emplean para designar el instrumento utilizado para el control. En la Tabla 14 se muestra el significado de cada una de las letras según la norma. (107)

Tabla 14. Nomenclatura empleada en el diagrama P&I (107)

Símbolo	Primera letra	Letras sucesivas
A	Análisis	Alarma
C	-	Controlador
F	Caudal	-
H	-	Alto
I	-	Indicador
L	Nivel	Bajo
P	Presión	-
T	Temperatura	Transmisor
V	-	Válvula
Y	-	Transductor

Por otro lado, los números hacen referencia al lazo que se quiere identificar. Los instrumentos de un lazo que estén indicados con el mismo número pertenecen al mismo lazo de control. Esto permite reconocer con facilidad los distintos lazos ya que cada uno tiene una identificación única. (107)

Además, también se emplea una simbología para representar donde se encuentran los instrumentos en planta. En la Figura 17 se muestran las tres más empleadas. La primera indica que el equipo está situado en la sala de control y que es accesible para los operarios. La segunda indica que es inaccesible para el operario, a pesar de que se localiza en la sala de control, y la última indica que el equipo se encuentra en planta. (107)

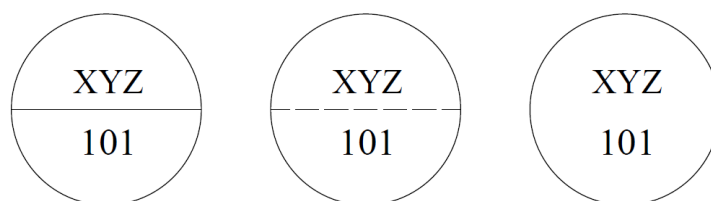


Figura 17. Nomenclatura de elementos de control y de localización (Elaboración propia a partir de (105))

Por último, también se emplea una simbología para identificar las conexiones entre los equipos de la planta. Cada tipo se identifica con un patrón de línea distinto. En la Figura 18 se muestran los más comunes.

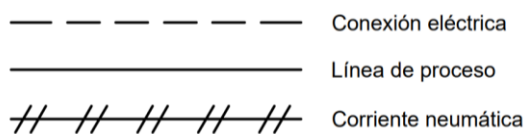


Figura 18. Conexiones de instrumentación y control (Elaboración propia a partir de (105) )

## 10.5. Descripción de los lazos de control

### 10.5.1. Sección 100: Acondicionamiento de las materias primas y reacción

Esta parte de la planta tiene como objetivo preparar las materias primas para alcanzar la temperatura de 175 °C y la presión de 50 bar en la que opera el reactor. Asimismo, se controla la operación en el propio reactor para que su funcionamiento sea correcto y se cumplan las condiciones especificadas de producto.

Consta de una serie de lazos que se definirán a continuación.

#### **Lazo FIC-101**

Este lazo tiene como principal objetivo controlar el flujo de metil acetato que se introduce al sistema. Es fundamental que se introduzca la cantidad de reactivo requerida para satisfacer la capacidad de la planta.

La variable manipulada por tanto será el flujo de caudal recirculado a la entrada de las bombas P-101 A/B mientras que la variable controlada será el caudal de la corriente 4, el cual sale de la bomba. Se utilizará un lazo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que, si varía el caudal de la corriente 4, el controlador FIC-101 detectará un error gracias al sensor FT-101 y enviará instrucciones a la válvula FV-101 para que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el flujo. Este proceso es de acción inversa, ya que si se aumenta el caudal de la corriente recirculada disminuirá el caudal de la corriente 4. Sin embargo, los medidores y las válvulas utilizadas son de acción directa y por tanto el controlador del proceso será de acción directa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 15.

Tabla 15. Elementos del lazo de control FIC-101

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
FT-101	Transmisor de flujo	Medir y transmitir el valor del caudal de la corriente 4
FIC-101	Controlador indicador de flujo	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control FV-101
FY-101	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por FIC-101 en neumática para accionar la válvula FV-101
FV-101	Válvula de control de flujo	Aumentar o disminuir el caudal de recirculación hacia las bombas P-101 A/B

### **Lazo FIC-102**

Lazo destinado a controlar el flujo de monóxido de carbono que entra al sistema en la corriente 8.

Tanto la variable controlada como manipulada es el propio flujo de caudal de la corriente 8. Se emplea un lazo *feedback*, cuyo funcionamiento consiste en que, si varía el caudal de la corriente 8, el controlador FIC-102 detectará un error gracias al sensor FT-102 y enviará instrucciones a la válvula FV-102 para que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el caudal. Este proceso es de acción directa, ya que si se abre la válvula se produce un aumento de caudal en la corriente. Además, los medidores y las válvulas utilizadas son también de acción directa. Por tanto el controlador del proceso será de acción inversa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 16.

*Tabla 16. Elementos del lazo de control FIC-102*

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
FT-102	Transmisor de flujo	Medir y transmitir el valor del caudal de la corriente 8
FIC-102	Controlador indicador de flujo	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control FV-102
FY-102	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por FIC-102 en neumática para accionar la válvula FV-102
FV-102	Válvula de control de flujo	Aumentar o disminuir el caudal de la corriente 8

### **Lazo LIC-103**

En el tanque de mezcla TM-101 es necesario controlar el nivel del líquido regulando el caudal de salida del mismo. La variable manipulada por tanto será el caudal de la corriente 5 mientras que la variable controlada será el nivel en el tanque. Se utilizará un lazo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que, si aumenta o disminuye el nivel en el tanque, el controlador LIC-103 detectará un error gracias al sensor LT-103 y enviará instrucciones a la válvula LV-103 para que se abra o cierre, permitiendo el paso de un mayor o menor caudal de salida del tanque de mezcla. Este proceso es de acción inversa, ya que si se aumenta el caudal de la corriente 5 disminuirá el nivel. Además, el controlador del proceso será de acción directa por ser los medidores y las válvulas utilizadas de acción directa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 17.

*Tabla 17. Elementos del lazo de control LIC-103*

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
LT-104	Transmisor de nivel	Medir y transmitir el valor del nivel en el interior del tanque TM-101
LIC-104	Controlador indicador de nivel	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control LV-103
LY-104	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por LIC-103 en neumática para accionar la válvula LV-103
LV-104	Válvula de control de nivel	Aumentar o disminuir el flujo del caudal de salida del tanque TM-101, corriente 5

### **Lazos PIC-104**

El objetivo principal de este lazo es controlar la presión a la que sale la corriente líquida que sale de la bomba P-102 A/B, para que llegue a las condiciones deseadas al reactor R-101.

La variable manipulada será el flujo de caudal recirculado a la entrada de las bombas P-102 A/B, mientras que la variable controlada será la presión de la corriente 6. Se utilizará un lazo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que, si varía la presión de la corriente 6, el controlador PIC-104 detectará un error gracias al sensor PT-104 y enviará instrucciones a la válvula PV-104 para que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el flujo recirculado. Este proceso es de acción inversa, debido a que si se aumenta el caudal de la corriente recirculada disminuirá la presión de la corriente 6. Además, como los medidores y las válvulas utilizadas son de acción directa, el controlador del proceso será de acción directa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 18.

*Tabla 18. Elementos de control del lazo PIC-104*

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-104	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de presión de la corriente 6
PIC-104	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-104
PY-104	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-104 en neumática para accionar la válvula PV-104
PV-104	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el caudal recirculado hacia la entrada de las bombas P-102 A/B

### **Lazo TIC-105**

En el intercambiador de calor E-101 es necesario controlar la temperatura de salida de la mezcla líquida, ya que posteriormente será introducida en el reactor R-101. La variable manipulada de este lazo es el caudal de vapor de media presión, mientras que la variable controlada será la temperatura de salida de la corriente 7. Se utilizará un lazo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que, si hay un cambio en la temperatura de dicha corriente, el controlador TIC-105 detectará una alteración con respecto al *set-point* (175 °C) gracias al sensor TT-105, y enviará instrucciones a la válvula TV-105 para que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el caudal de vapor de media presión introducido dependiendo del cambio en la temperatura que se desee. Este proceso es de acción directa, puesto que si se aumenta el caudal de vapor aumentará la temperatura de la corriente 7. Además, los medidores y las válvulas utilizadas son también de acción directa, por tanto el controlador del proceso será de acción inversa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 19.

Tabla 19. Elementos del lazo de control TIC-105

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
TT-105	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura de salida del intercambiador de calor E-101, corriente 7
TIC-105	Controlador indicador de temperatura	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control TV-105
TY-105	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por TIC-105 en neumática para accionar la válvula TV-105
TV-105	Válvula de control temperatura	Aumentar o disminuir el flujo de vapor de media presión que entra al intercambiador de calor E-101

### **Lazo TIC-106**

Este lazo de control en el intercambiador de calor E-102 tiene características similares al lazo TIC-105, pero en este caso la variable controlada es la temperatura de la corriente 10. Es decir, la temperatura de la mezcla gas que entra al reactor R-101. Los elementos de este lazo se indican en la Tabla 20.

Tabla 20. Elementos del lazo de control TIC-106

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
TT-106	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura de salida del intercambiador de calor E-102, corriente 10
TIC-106	Controlador indicador de temperatura	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control TV-106
TY-106	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por TIC-106 en neumática para accionar la válvula TV-106
TV-106	Válvula de control temperatura	Aumentar o disminuir el flujo de vapor de media presión que entra al intercambiador de calor E-102

### **Lazo TIC- 107**

Su función es crucial por ser empleado en el control de la temperatura del reactor. Este equipo opera a una temperatura constante de 175 °C, por tanto, siendo la reacción del proceso exotérmica, la retirada del calor liberado es un parámetro que debe estar perfectamente controlado. Por ello, se ha decidido utilizar un método de control avanzado denominado control en cascada.

Este método emplea dos controladores en un lazo *feedback*, en el cual uno está anidado dentro del otro. El controlador primario marca el *set-point* del controlador secundario y este último es el encargado de controlar el elemento final de control. (106)

En este caso, el controlador principal será aquel que controla la temperatura en el interior del reactor, y el controlador secundario controla la temperatura a la que ingresa el agua de refrigeración a la camisa del reactor.

Está constituido por el sensor TT-107 A, el cual envía una señal eléctrica con la medida de la temperatura en el interior del reactor al controlador principal TIC-107 A. La salida del

controlador principal marca el *set-point* del controlador secundario TIC-107 B, es decir, marca el valor de la cantidad de agua de refrigeración de entrada a la camisa dependiendo de su temperatura de entrada. A su vez, este controlador secundario se encarga de comparar el valor de consigna con el obtenido a través de la medida del transmisor TT-107 B. Este sensor envía una señal eléctrica al controlador secundario, en relación a la temperatura a la que se encuentre el caudal de agua de refrigeración. En caso de que exista un error, el controlador TIC-107 B le indicará a la válvula TV-107 que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el caudal de entrada del fluido refrigerante, dependiendo del cambio de temperatura que se desee compensar.

En resumen, el controlador de la temperatura del reactor marcará el *set-point* del controlador secundario. De tal forma que las perturbaciones en la temperatura de entrada del fluido refrigerante quedarían compensadas por este lazo secundario antes de que afectasen a la variable controlada principal, la temperatura en el interior del reactor.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 21.

Tabla 21. Elementos del lazo de control TIC-107

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
TT-107 A	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura en el interior del reactor R-101
TIC-107 A	Controlador indicador de temperatura principal	Marcar el <i>set-point</i> del controlador secundario TIC-107 B
TT-107 B	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura del agua de refrigeración que entra a la camisa del reactor R-101
TIC-107 B	Controlador indicador de temperatura secundario	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control TV-107
TY-107	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por TIC-107 B en neumática para accionar la válvula TV-107
TV-107	Válvula de control de temperatura	Aumentar o disminuir el flujo de agua de refrigeración que entra a la camisa

### **Lazo PIC-108**

El control de la presión en el interior del reactor es vital, pues afecta de manera directa a la cinética y a la solubilidad del monóxido de carbono en la mezcla líquida. Además, permite evitar que se produzca una sobrepresión en el sistema.

La variable manipulada será el caudal del gas de salida del reactor R-101, corriente 11, mientras que la variable controlada será la presión en el interior del reactor. Se utilizará un lazo de tipo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que, si hay un cambio en la presión, el controlador PIC-108 detectará una alteración con respecto al *set-point* (50 bar) gracias al sensor PT-108 y enviará instrucciones a la válvula PV-108 para que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el caudal de la corriente 11, dependiendo del cambio en la presión que se desee. Este proceso es de acción inversa, ya que si se aumenta el caudal de gas de salida disminuirá la

presión en el interior de la columna. Además, los medidores y las válvulas utilizadas son de acción directa, por tanto el controlador del proceso será de acción directa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 22.

Tabla 22. Elementos del lazo de control PIC-108

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-108	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de la presión en el interior del reactor R-101
PIC-108	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-108
PY-108	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-108 en neumática para accionar la válvula PV-108
PV-108	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el flujo de la corriente 11

### **Lazo LIC-109**

Otro factor que se precisa controlar en el reactor R-101 es el nivel del líquido regulando el caudal de salida de la mezcla líquida. La variable manipulada por tanto será el caudal de la corriente 13 y la variable controlada será el nivel en el tanque. Se utilizará un lazo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que si aumenta o disminuye el nivel en el tanque, el controlador LIC-109 detectará un error gracias al sensor LT-109 y enviará instrucciones a la válvula LV-109 para que se abra o cierre permitiendo el paso de un mayor o menor caudal de salida del líquido. Este proceso es de acción inversa, porque si se aumenta el caudal de la corriente 13, se produce una disminución del nivel. Además, como los medidores y las válvulas utilizadas son de acción directa, el controlador del proceso será de acción también directa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 23.

Tabla 23. Elementos del lazo de control LIC-110

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
LT-109	Transmisor de nivel	Medir y transmitir el valor del nivel del líquido en el reactor R-101
LIC-109	Controlador indicador de nivel	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control LV-109
LY-109	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por LIC-109 en neumática para accionar la válvula LV-109
LV-109	Válvula de control de nivel	Aumentar o disminuir el flujo de salida del líquido, corriente 13

### **Lazo PIC-110**

Este lazo se centra en controlar la presión a la salida del compresor C-101 de la corriente de gases recirculada, corriente 12. Su objetivo es lograr que se alcance el valor de presión deseado para que la corriente llegue al reactor R-101 a la presión requerida.

La variable manipulada por tanto será el flujo de caudal recirculado a la entrada del compresor C-101, mientras que la variable controlada será la presión de la corriente 12. Se utilizará un lazo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que, si varía la presión de la corriente 12, el controlador PIC-110 detectará un error gracias al sensor PT-110 y enviará instrucciones a la válvula PV-110 para que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el flujo recirculado. Este proceso es de acción inversa, ya que si se aumenta el caudal de la corriente recirculada disminuirá la presión de la corriente 12. Además, los medidores y las válvulas utilizadas son de acción directa. Por tanto el controlador del proceso será también de acción directa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 24.

Tabla 24. Elementos de control del lazo PIC-111

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-110	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de presión de la corriente 12
PIC-110	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-110
PY-110	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-110 en neumática para accionar la válvula PV-110
PV-110	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el caudal recirculado hacia la entrada del compresor C-101

#### 10.5.2. Sección 200: Purificación

En esta sección se lleva a cabo la separación de las distintas sustancias que salen del reactor R-101, que serán separadas para su recirculación y para obtener el producto deseado con la pureza requerida.

Los lazos correspondientes que presenta esta sección se describen a continuación.

##### **Lazo PIC-201**

Este lazo tiene como objetivo controlar la presión a la salida de la válvula VLV-201, corriente 14.

Por tanto, la variable manipulada será el caudal de la corriente 14 y la variable controlada será la presión de salida de misma corriente 14. Se utilizará un lazo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que, si hay un cambio en la presión, el controlador PIC-201 detectará una alteración con respecto al *set-point* gracias al sensor PT-201, y enviará instrucciones a la válvula PV-201 (o válvula VLV-101) para que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el flujo. Este proceso es de acción inversa, ya que si se aumenta el caudal disminuirá la presión en la corriente 14. Además, como el medidor y la válvula son de acción directa, el controlador del proceso será de acción directa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 25.

Tabla 25. Elementos del lazo de control PIC-201

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-201	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de presión de la corriente 14
PIC-201	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-201
PY-201	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-201 en neumática para accionar la válvula PV-201
PV-201	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el flujo de la corriente 14

### **Lazo TIC-202**

Este lazo funciona de manera análoga al lazo TIC-106 y al TIC-107, pero, en este caso, se controla la temperatura de la corriente 15, la cual entra al separador V-201. Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 26.

Tabla 26. Elementos del lazo de control TIC-202

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
TT-202	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura de salida del intercambiador de calor E-201, corriente 15.
TIC-202	Controlador indicador de temperatura	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control TV-202
TY-202	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por TIC-202 en neumática para accionar la válvula TV-202
TV-202	Válvula de control de temperatura	Aumentar o disminuir el flujo de vapor de media presión que entra al intercambiador de calor E-201

### **Lazo PIC-203**

El control de la presión en el tanque flash es fundamental debido a los posibles problemas que puede causar una variación de este parámetro en el equipo o en la eficiencia de la separación.

En este caso, la variable manipulada será el caudal del gas de salida del flash V-201, corriente 17, mientras que la variable controlada será la presión en el interior del tanque. Se utilizará un lazo de tipo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que, si hay un cambio en la presión, el controlador PIC-203 detectará una alteración con respecto al *set-point* mediante el sensor de presión PT-203, y enviará instrucciones a la válvula PV-203 para que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el caudal de la corriente 17, dependiendo del cambio en la presión que se desee. Este proceso es de acción inversa, ya que si se aumenta el caudal de gas de salida disminuirá la presión en el interior de la columna. Sin embargo, al ser el medidor y la válvula de acción directa, el controlador del proceso será de acción directa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 27.

Tabla 27. Elementos del lazo de control PIC-203

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-203	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de presión en el tanque V-201
PIC-203	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-203
PY-203	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-203 en neumática para accionar la válvula PV-203
PV-203	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el flujo de la corriente 17

#### **Lazo LIC-204**

En el tanque flash V-201 es necesario controlar el nivel del líquido para que permanezca en la franja adecuada. La variable manipulada por tanto será el caudal de salida del líquido, corriente 16, mientras que la variable controlada será el nivel en el tanque. Este lazo es igual lazo de control LIC-103. Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 28.

Tabla 28. Elementos del lazo de control LIC-204

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
LT-204	Transmisor de nivel	Medir y transmitir el valor del nivel del líquido en el flash V-201
LIC-204	Controlador indicador de nivel	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control LV-204
LY-204	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por LIC-204 en neumática para accionar la válvula LV-204
LV-204	Válvula de control de nivel	Aumentar o disminuir el flujo de salida del líquido, corriente 16

#### **Lazo PIC-205**

Este lazo funciona de la misma manera que el PIC-201. Se emplea para controlar la presión de la corriente 18, para que la mezcla llegue a la torre T-201 a su presión de operación. Los elementos del lazo se indican en la Tabla 29.

Tabla 29. Elementos del lazo de control PIC-205

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-205	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de presión de la corriente 18
PIC-205	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-205
PY-205	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-205 en neumática para accionar la válvula PV-205
PV-205	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el flujo de la corriente 18

#### **Lazo TIC-206**

En el condensador E-202 se lleva a cabo la condensación de la corriente vapor que sale del tanque V-201 y que debe entrar a la primera torre de destilación, T-201, a la temperatura de saturación de la mezcla.

Este lazo tiene un funcionamiento similar al lazo TIC-202, pero en este caso, la variable manipulada es el agua de refrigeración introducida al intercambiador E-202 y la variable controlada es la temperatura de la corriente 19. En cambio, este proceso es de acción inversa, puesto que si se aumenta el caudal de agua disminuye la temperatura de la corriente 19. Además, los medidores y las válvulas utilizadas son de acción directa, por tanto el controlador del proceso será de acción directa.

Los elementos de control que constituyen el lazo se indican en la Tabla 30.

Tabla 30. Elementos del lazo de control TIC-206

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
TT-206	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura de salida del condensador E-202, corriente 19.
TIC-206	Controlador indicador de temperatura	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control TV-206
TY-206	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por TIC-206 en neumática para accionar la válvula TV-206
TV-206	Válvula de control de temperatura	Aumentar o disminuir el flujo de agua de refrigeración que entra al intercambiador de calor E-202

#### Lazo PIC-207

Es esencial mantener la presión de la columna bajo control, pues posibles perturbaciones podrían hacer que el *set-point* se escape del valor de consigna. En este caso se pretende controlar la presión de cabeza de la columna de destilación T-201 manipulando el caudal de salida del fluido refrigerante del condensador total E-203.

Para lograr el objetivo se utiliza un lazo *feedback* que consta de un transmisor PT-207 que mide la presión en la cabeza del equipo. A su vez, envía el valor medido al controlador PIC-207 para compararlo con el valor de consigna y enviar una señal eléctrica al transductor PY-207, que se encarga de transformar la señal en neumática y ordenar la instrucción correspondiente a la válvula PV-207 encargada de manipular el caudal de salida del refrigerante del condensador.

Este proceso es de acción inversa y el controlador de acción directa, pues si aumenta el caudal de salida de agua refrigerante, disminuirá la presión en cabeza. Los elementos de este lazo de control se presentan en la Tabla 31.

Tabla 31. Elementos del lazo de control PIC-207

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
PT-207	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de la presión de cabeza de la columna de destilación T-201
PIC-207	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-207
PY-207	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-207 en neumática para accionar la válvula PV-207
PV-207	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el flujo de agua de refrigeración que entra del condensador total E-203

### ***Lazo LIC-208***

El tanque de reflujo V-202 sirve para contener el caudal condensado por el intercambiador E-203. Es importante mantener controlado el nivel de líquido de este recipiente para evitar desbordamientos o inundación excesiva.

El sistema de control se realiza utilizando un lazo *feedback* en donde el transmisor LT-208 detecta el nivel de líquido del interior del tanque y envía una señal al controlador LIC-208 que compara el valor que recibe con el de consigna y envía otra señal eléctrica al transductor LY-208, para convertirla en neumática y poder manipular la apertura de la válvula LCV-208 que manipula la corriente de salida del tanque de reflujo.

Este proceso es de acción inversa, ya que si aumenta el caudal de salida, disminuirá el nivel del tanque de reflujo V-202. Por ende, la acción del controlador es directa. Los elementos de este lazo de control se presentan en la Tabla 32.

*Tabla 32. Elementos del lazo de control LIC-208*

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
LT-208	Transmisor de nivel	Medir y transmitir el valor del nivel del líquido en el tanque de reflujo V-202
LIC-208	Controlador indicador de nivel	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control LV-208
LY-208	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por LIC-208 en neumática para accionar la válvula LV-208
LV-208	Válvula de control de nivel	Aumentar o disminuir el flujo de salida del tanque V-202

### ***Lazo FIP-209***

Mantener el reflujo de columna de destilación T-201 bajo control es de suma importancia. Pues asegura una separación más eficiente, mejora la interacción líquido-vapor o, entre otros motivos, estabiliza la temperatura de la columna.

Se propone un lazo *feedback* en el que el transmisor FT-209 mide el caudal de la corriente de reflujo y envía la información al controlador FIC-209, en donde se compara el valor medido con el de consigna. La diferencia entre valores se envía en forma de señal eléctrica hasta el transductor FY-209, que transforma la señal en neumática y ordena a la válvula FV-209 actuar sobre el caudal de reflujo.

Este proceso es de acción directa, ya que si la apertura de la válvula FV-209 aumenta dejando atravesar un mayor flujo, aumentará el caudal de la corriente de reflujo. Los elementos de este lazo de control se presentan en la Tabla 33

Tabla 33. Elementos del lazo de control FIC-209

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
FT-209	Transmisor de flujo	Medir y transmitir el valor del caudal de la corriente de reflujo de la torre T-201
FIC-209	Controlador indicador de flujo	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control FV-209
FY-209	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por FIC-209 en neumática para accionar la válvula FV-209
FV-209	Válvula de control de flujo	Aumentar o disminuir el caudal de la corriente de reflujo

### **Lazo LIC-210**

La columna de destilación T-201 precisa de cierta cantidad de líquido en el fondo para evitar problemas de inundación o vaciado no deseadas.

Para evitarlo se instala un lazo de control *feedback* donde un transmisor LT-210 detecta el nivel de líquido del interior de la torre y envía una señal al controlador LIC-210, el cual compara el valor que le llega con el de consigna y envía una señal eléctrica que es transformada en neumática utilizando el transductor LY-210. Este ejerce la orden de manipular la apertura de la válvula LCV-210 que controla el caudal de salida de colas de la columna.

Este proceso es de acción inversa, pues si aumenta el caudal de la corriente de colas, disminuirá el nivel de la torre T-201. Los elementos de este lazo de control se presentan en la Tabla 34.

Tabla 34. Elementos del lazo de control LIC-210

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
LT-210	Transmisor de nivel	Medir y transmitir el valor del nivel del líquido en la columna de destilación T-201
LIC-210	Controlador indicador de nivel	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control LV-210
LY-210	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por LIC-210 en neumática para accionar la válvula LV-210
LV-210	Válvula de control de nivel	Aumentar o disminuir el flujo de la corriente de colas

### **Lazo TIC-211**

Este lazo tiene como función controlar la temperatura de la corriente de colas que retorna a la columna, manipulando el caudal del fluido calefactor de la caldera E-204.

Se trata de un lazo *feedback* con el que si el controlador TIC-211 detecta una perturbación en el *set-point* con respecto al valor de consigna establecido, la válvula TV-211 actúa abriendo o cerrando su apertura para dejar atravesar más o menos caudal y hacer que el valor de temperatura de la corriente que se controla vuelve al valor estipulado. Se usa un

transmisor TT-211 para medir la temperatura y un transductor TY-211 para cambiar de eléctrica a neumática la señal.

Este proceso es de acción directa, pues si aumenta el caudal de fluido calefactor de la caldera, aumentará la temperatura de la corriente de colas que es devuelta a la columna. Los elementos de este lazo de control se presentan en la Tabla 35.

Tabla 35. Elementos del lazo TIC-211

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
TT-211	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura de la corriente de entrada de colas de la columna de destilación T-201
TIC-211	Controlador indicador de temperatura	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control TV-211
TY-211	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por TIC-211 en neumática para accionar la válvula TV-211
TV-211	Válvula de control de temperatura	Aumentar o disminuir el flujo de vapor de media presión que entra a la caldera E-204

### ***Lazo PIC-212***

Este lazo pretende controlar, de la misma manera que el PIC-207, la presión de cabeza de la columna de destilación T-202 manipulando el caudal de salida de agua de refrigeración empleada en el condensador E-205.

Cuenta con un transmisor PT-212, el controlador PIC-212, un transductor PY-212 y una válvula de control PV-212. La acción es inversa, ya que si aumentara el caudal de salida de fluido refrigerante, disminuiría la presión en cabezas de la torre. Los elementos de este lazo se recogen en la Tabla 36.

Tabla 36. Elementos del lazo PIC-212

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-212	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de la presión de cabeza de la columna de destilación T-202
PIC-212	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-212
PY-212	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-212 en neumática para accionar la válvula PV-212
PV-212	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el flujo de agua de refrigeración que sale del condensador total E-205

### ***Lazo LIC-213***

Como se mencionó para el tanque de reflujo de la columna de destilación T-201, es sumamente importante mantener el nivel de este recipiente entre cierto rango de nivel. Por ello, se propone de nuevo un controlador de nivel, en este caso para el tanque V-203, cuyos instrumentos de control y funcionamiento es igual al del lazo LIC-208. En la Tabla 37 se presentan los instrumentos de este lazo.

Tabla 37. Elementos del lazo LIC-213

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
LT-213	Transmisor de nivel	Medir y transmitir el valor del nivel del líquido en el tanque de reflujo V-203
LIC-213	Controlador indicador de nivel	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control LV-213
LY-213	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por LIC-213 en neumática para accionar la válvula LV-213
LV-213	Válvula de control de nivel	Aumentar o disminuir el flujo de la corriente de salida de V-203

#### Lazo FIP-214

El caudal de reflujo de la columna de destilación T-202 es controlado mediante un sistema de control análogo al de la torre T-201. De nuevo es un sistema de acción directa y los instrumentos de control empleados se presentan en la Tabla 38.

Tabla 38. Elementos del lazo FIC-214

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
FT-214	Transmisor de flujo	Medir y transmitir el valor del caudal de la corriente de reflujo de la columna T-202
FIC-214	Controlador indicador de flujo	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control FV-214
FY-214	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por FIC-214 en neumática para accionar la válvula FV-214
FV-214	Válvula de control de flujo	Aumentar o disminuir el caudal de la corriente de reflujo

#### Lazo LIC-215

Ya fue mencionada la importancia de mantener controlado un nivel de líquido en la cola de las columnas de destilación, para evitar que posibles perturbaciones provoquen inundaciones o el vaciado del equipo. De la misma forma que para la torre T-201, en la columna T-202 se propone el mismo lazo de control *feedback*. La acción del sistema sigue siendo inversa, debido a que si se abre la válvula de control de la corriente de colas, aumenta el caudal, y por ende disminuye el nivel de líquido en el equipo. Los elementos de control de este lazo se presentan en la Tabla 39.

Tabla 39. Elementos del lazo LIC-215

Etiqueta	Nombre del elemento	Función del elemento
LT-215	Transmisor de nivel	Medir y transmitir el valor del nivel del líquido en la columna de destilación T-202
LIC-215	Controlador indicador de nivel	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control LV-215
LY-215	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por LIC-215 en neumática para accionar la válvula LV-215
LV-215	Válvula de control de nivel	Aumentar o disminuir el flujo de la corriente de colas

### ***Lazo TIC-216***

El último lazo que se propone para controlar la columna de destilación T-202 sirve para controlar la temperatura de la corriente que retorna al interior del equipo por la zona de agotamiento. Consta de un transmisor de temperatura TT-216, que envía una señal al controlador TIC-216, que por su parte envía una señal eléctrica al transductor TY-216 el cual modifica la señal a neumática y hace manipular la válvula TV-216 abriendo o cerrando, dependiendo de los requerimientos, el caudal de vapor de media presión que ingresa a la caldera E-206. De igual manera que el lazo TIC-211, la acción es directa y los instrumentos de este lazo se resumen en la Tabla 40.

*Tabla 40. Elementos del lazo TIC-216*

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
TT-216	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura de la corriente de entrada de colas de la columna de destilación T-202
TIC-216	Controlador indicador de temperatura	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control TV-216
TY-216	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por TIC-216 en neumática para accionar la válvula TV-216
TV-216	Válvula de control de temperatura	Aumentar o disminuir el flujo de vapor de media presión que entra a la caldera E-206

### ***Lazo TIC-217 y Lazo TIC-218***

Ambos lazos tienen un funcionamiento similar a los otros lazos de control de temperatura de los intercambiadores. En el TIC-217 se controla la temperatura de la corriente 24 y en el TIC-218 la temperatura de la corriente 28.

Los elementos de control que constituyen los lazos se indican en la Tabla 41 y 42.

*Tabla 41. Elementos del lazo de control TIC-217*

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
TT-217	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura de salida del condensador E-207, corriente 24.
TIC-217	Controlador indicador de temperatura	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control TV-217
TY-217	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por TIC-217 en neumática para accionar la válvula TV-217
TV-217	Válvula de control de temperatura	Aumentar o disminuir el flujo de agua de refrigeración que entra al intercambiador de calor E-207

*Tabla 42. Elementos del lazo de control TIC-218*

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
TT-218	Transmisor de temperatura	Medir y transmitir el valor de la temperatura de salida del condensador E-208, corriente 28.
TIC-218	Controlador indicador de temperatura	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control TV-218
TY-218	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por TIC-218 en neumática para accionar la válvula TV-218
TV-218	Válvula de control de temperatura	Aumentar o disminuir el flujo de agua de refrigeración que entra al intercambiador de calor E-209

### **Lazo PIC-219**

Este lazo es idéntico al PIC-201. Se emplea para controlar la presión de la corriente 25, para que llegue al tanque de mezcla TM-101 a la presión deseada. Sus elementos se indican en la Tabla 43.

Tabla 43. Elementos del lazo de control PIC-219

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-219	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de presión de la corriente 25
PIC-219	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-219
PY-219	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-219 en neumática para accionar la válvula PV-219
PV-219	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el flujo de la corriente 25

### **Lazo PIC-220 y PIC-221**

Ambos lazos se emplean para controlar las presiones de salida de las corrientes que se desea recircular desde las cabezas de las columnas de destilación.

En este caso la variable manipulada será el caudal de líquido recirculado a la entrada de la bomba, mientras que las variables controladas serán las presiones de las corrientes 26 y 27, para el lazo PIC-220 y PIC-221 respectivamente.

Se utilizará un lazo de tipo *feedback*, cuyo funcionamiento consistirá en que, si hay un cambio en la presión de las corrientes 26 y/o 27, el respectivo controlador detectará una alteración en el *set-point* gracias al sensor de presión, y enviará instrucciones a la válvula para que se abra o cierre, aumentando o disminuyendo el caudal de recirculación, dependiendo del cambio en la presión que se desee. Este proceso es de acción inversa, ya que si se aumenta el caudal de líquido recirculado a la entrada de la bomba disminuirá la presión de la corriente correspondiente. Además, los medidores y las válvulas utilizadas son de acción directa. Por tanto el controlador del proceso será de acción directa.

En la Tabla 44 e 45 se indican, en ese orden, los elementos de los lazos PIC-220 y 221.

Tabla 44. Elementos del lazo PIC-220

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-220	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de presión de la corriente 26
PIC-220	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-220
PY-220	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-220 en neumática para accionar la válvula PV-220
PV-220	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el caudal recirculado hacia las bomba P-203 A/B

Tabla 45. Elementos del lazo de control PIC-221

<b>Etiqueta</b>	<b>Nombre del elemento</b>	<b>Función del elemento</b>
PT-221	Transmisor de presión	Medir y transmitir el valor de presión de la corriente 27
PIC-221	Controlador indicador de presión	Comparar la variable controlada con el valor de consigna y decidir la acción de la válvula de control PV-221
PY-221	Transductor	Convertir la señal eléctrica transmitida por PIC-221 en neumática para accionar la válvula PV-221
PV-221	Válvula de control de presión	Aumentar o disminuir el caudal recirculado hacia las bomba P-204 A/B

## 10.6. Válvulas de alivio, indicadores y alarmas

### 10.6.1. Válvulas de alivio

Son dispositivos utilizados para actuar en caso de que se produzca una sobrepresión en determinados equipos. Se utilizan principalmente en todos los equipos que trabajan a presiones elevadas o en donde hay o pueda haber presencia de gases. En la Tabla 46, se indican las válvulas de alivio instaladas en los distintos equipos, así como su nomenclatura.

Tabla 46. Listado de válvulas de alivio

<b>Etiqueta</b>	<b>Equipo</b>
PSV-111	Tanque de mezcla TM-101
PSV-112	Intercambiador de calor E-101
PSV-113	Reactor R-101
PSV-114	Intercambiador de calor E-102
PSV-115	Compresor C-101
PSV-222	Evaporador E-201
PSV-223	Flash V-201
PSV-224	Condensador E-202
PSV-225	Intercambiador de calor E-207
PSV-226	Columna de destilación T-201
PSV-227	Condensador E-203
PSV-228	Caldera E-204
PSV-229	Columna de destilación T-202
PSV-230	Condensador E-205
PSV-231	Caldera E-206
PSV-232	Intercambiador de calor E-208

### 10.6.2. Indicadores

Los indicadores son instrumentos que se utilizan para conocer los valores de algunos parámetros de interés en el proceso. Algunos de estos son colocados en diferentes partes del proceso para conocer la presión y la temperatura en determinados puntos. En la Tabla X, se presentan los indicadores instalados en los distintos equipos, así como su nomenclatura.

Tabla 47. Listado de indicadores

<b>Etiqueta</b>	<b>Función del elemento</b>
PI-101 A/B	Indicadores de presión en las bombas P-101 A/B
TI-116	Indicador de temperatura en el tanque de mezcla TM-101
PI-232 A/B	Indicadores de presión en las bombas P-201 A/B
TI-233	Indicador de temperatura en la entrada de la columna T-202, corriente 21
PI-234	Indicador de presión en la entrada de la columna T-202, corriente 21
PI-235 A/B	Indicadores de presión en las bombas P-202 A/B

### 10.6.3. Alarmas

Estos dispositivos se emplean para avisar a los trabajadores de la planta de problemas graves en las condiciones de operación del proceso. Pueden ser sonoras, visuales o ambas a la vez y se activan con interruptores o relés situados en los equipos. De igual manera, estos instrumentos deben contar con un sistema de disparo automático (p.ej. cierre de las bombas, válvulas y activación de sistemas de emergencia) que se active en el caso de circunstancias potencialmente dañinas donde no haya una acción por parte de los operarios. (108)

Las alarmas que se emplean en los equipos del proceso se representan en la Tabla 48.

Tabla 48. Listado de alarmas

<b>Etiqueta</b>	<b>Función del elemento</b>
LAH-103	Alarma de nivel alto en el tanque de mezcla TM-101
LAL-103	Alarma de nivel bajo en el tanque de mezcla TM-101
TAH-107	Alarma de alta temperatura en el reactor R-101
PAH-108	Alarma de alta presión en el reactor R-101
PAL-108	Alarma de baja presión en el reactor R-101
LAH-109	Alarma de alto nivel en el reactor R-101
LAL-109	Alarma de bajo nivel en el reactor R-101
LAH-204	Alarma de nivel alto en el tanque flash V-201
LAL-204	Alarma de nivel bajo en el tanque flash V-201
PAH-203	Alarma de presión alta en el tanque flash V-201
PAH-207	Alarma de presión alta en la columna de destilación T-201
LAH-208	Alarma de alto nivel en el tanque de reflujo V-203
LAL-208	Alarma de bajo nivel en el tanque de reflujo V-203
LAH-210	Alarma de alto nivel en la columna de destilación T-201
LAL-210	Alarma de bajo nivel en la columna de destilación T-201
PAH-212	Alarma de presión alta en la columna de destilación T-202
LAH-213	Alarma de alto nivel en el tanque de reflujo V-203
LAL-213	Alarma de bajo nivel en el tanque de reflujo V-203
LAH-215	Alarma de alto nivel en la columna de destilación T-202
LAL-215	Alarma de bajo nivel en la columna de destilación T-202

Las alarmas de nivel se colocan en todos los tanques donde haya acumulación de líquido, es decir, en el TM-101, en el R-101, en el V-201, en las T-201 y T-202, además de en los propios tanques de reflujo V-202 y V-203. Se instalará una que avise si se supera un valor mínimo del nivel de líquido en el recipiente, y otra que avise en caso de que se supere un valor máximo. Son fundamentales para alertar en caso de que se produzca un vaciado o un llenado excesivo de los tanques o del reactor.

En aquellos tanques con presencia de gases también se colocará una alarma que dé un aviso en caso de un aumento excesivo de la presión, por acumulación de los propios gases. En este caso se instalan en el reactor R-101, en el compresor C-101, y en la sección 200 en el en el tanque flash V-201, y en las torres de destilación T-201 y T-202.

En el reactor R-101 también se dispone de una alarma que informe cuando se supere una temperatura máxima fijada. En el reactor se trabaja con una reacción exotérmica, por lo que

si ocurre un fallo en el sistema de refrigeración, la temperatura puede aumentar drásticamente causando una reacción *runaway*, que desencadena en un descontrol de las condiciones de operación, lo cual puede derivar en accidentes graves y peligrosos en la planta.

## 11. Seguridad

La seguridad en una planta de producción industrial es vital para el correcto desarrollo de la misma. Por ello se debe contar con un plan de actuación para prevenir accidentes, o en caso de que se produzcan saber proceder. En la misma línea, se debe contar con personal cualificado que sepa ejercer sus labores de manera ética evitando la mala praxis y priorizando la seguridad en todas sus acciones.

Son varios los peligros que se pueden dar en una industria química, explosiones, incendios, fugas... Además, tener presentes otro tipo de riesgos que puedan originar los diferentes elementos del proceso como riesgos mecánicos, eléctricos, manejo de productos químicos, reactividad, condiciones de operación y almacenamiento o similares.

En el presente apartado se presenta el estudio de seguridad dividido en los subapartados explicados a continuación.

### 11.1. Inventario de sustancias

Los compuestos presentes en el proceso de producción industrial de anhídrido acético son el propio anhídrido, el acetato de metilo, el monóxido de carbono, el hidrógeno, el ácido acético, el yoduro de metilo, el yoduro de litio y el cloruro de carbonilo de rodio. Se hace uso de las fichas de seguridad de dichos compuestos presentadas en el *Anexo IV*, para conocer las propiedades más relevantes en lo que a seguridad de la planta respecta. Estos son el punto flash, temperatura de autoignición y límites superior e inferior de inflamabilidad, que se definen a continuación y en la Tabla 49 se recogen sus valores correspondientes.

- Punto flash: Temperatura mínima a la que un líquido emite suficiente vapores inflamables para que se produzca una combustión espontánea en presencia de una fuente de ignición. (109)
- Temperatura de autoignición: Temperatura mínima en la que cualquier sustancia tiene la suficiente energía para inflamarse y mantener la combustión en ausencia de una fuente de ignición. (109)
- Límite superior de inflamabilidad: Concentración de sustancia combustible o comburente por encima de la cual ni se iniciará ni se mantendrá la combustión. Se expresa habitualmente como porcentaje de la sustancia en la mezcla gas. (109)

- Límite inferior de inflamabilidad: Concentración de sustancia combustible o comburente por debajo de la cual no se inicia ni se mantiene la combustión. (109)

Tabla 49. Propiedades físico-químicas de las sustancias del proceso. (Fichas de seguridad)

Sustancias	Nº CAS	Punto flash (°C)	Tº de autoignición (°C)	Límite inferior (% vol.)	Límite superior (% vol.)
Anhídrido acético	108-24-7	49	316	2,7	10,3
Acetato de metilo	79-20-9	-13	454	3,1	16,0
Monóxido de carbono	630-08-0	No aplica	607	10,9	74,0
Hidrógeno	1333-74-0	No aplica	560	4,0	77,0
Ácido acético	64-19-7	40	463	4,0	19,9
Yoduro de metilo	74-88-4	42,5	352	8,5	66,0
Yoduro de litio	10377-51-2	No disponible	No disponible	No disponible	No disponible
Catalizador de rodio	14523-22-9	No disponible	No disponible	No disponible	No disponible

## 11.2. Clasificación según el reglamento CLP

El reglamento (CE) nº 1272/2008, también conocido como CLP (Classification, Labelling and Packaging), entró en vigor en enero de 2009 e introdujo en la Unión Europea el Sistema Globalmente Armonizado (SGA) de las Naciones Unidas sobre clasificación, etiquetado y envasado de productos químicos. El Reglamento CLP tiene como principal objetivo determinar de manera clara si una sustancia o mezcla química es peligrosa. A esto se añade la obligatoriedad de notificar a la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas (ECHA), la clasificación y etiquetado de las sustancias fabricadas o importadas en el Espacio Económico Europeo, de sustancias peligrosas o aquellas comercializadas sujetas a registros conforme a REACH. (110)

El modo de identificar los peligros es mediante el uso de pictogramas, las frases de peligro H (Hazard) y las frases P (Precaution). Es información que todo proveedor debe incluir en las fichas de seguridad (FDS) de cada sustancia o mezcla química. (110) (111)

Las frases H aportan información acerca de la naturaleza y gravedad de los peligros que presenta un producto químico. Cada frase se indica con un código formado por la letra H seguida de tres números (HXYZ), en donde si el valor de X es 2 se trataría de un peligro físico, si es 3 peligro para la salud humana y si es 4, peligro para el medio ambiente. Los números YZ van del 00 al 99 y sirven para establecer una secuencia. (110) (111)

En cambio, las frases P ofrecen consejos de prudencia, es decir, medidas recomendadas para minimizar o evitar los efectos que puedan originar el uso o eliminación de sustancias químicas. Al igual que las H, se identifican con códigos que comienzan por la letra P junto con tres números (PXYZ). En este caso, si X vale 1 se trataría de un consejo general, 2 uno de

prevención, 3 de respuesta, 4 de almacenamiento y por último 5 de eliminación. YZ se utilizan como número secuencial. (110) (111)

La Tabla 50 muestra las frases H que aparecen en las FDS del *Anexo IV* del *Documento I*, de las sustancias involucradas en el proceso de producción de anhídrido acético.

Tabla 50. Frases H de indicación de peligro (110)

Frases	Indicación de peligro
H220	Gas extremadamente inflamable
H225	Líquidos y vapores muy inflamables
H226	Líquidos y vapores inflamables
H280	Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento
H301	Tóxico en caso de ingestión
H302	Nocivo en caso de ingestión
H312	Nocivo en contacto con la piel
H314	Provoca quemaduras graves en la piel y lesiones oculares graves
H315	Provoca irritación cutánea
H319	Provoca irritación ocular grave
H330	Mortal en caso de inhalación
H331	Tóxico en caso de inhalación
H335	Puede irritar las vías respiratorias
H336	Puede provocar somnolencia o vértigo
H351	Se sospecha que provoca cáncer
H360D	Puede dañar al feto
H372	Provoca daños en los órganos tras exposiciones prolongadas o repetidas
H410	Muy tóxico para los órganos acuáticos, con efectos nocivos duraderos

A continuación se presenta la Tabla 51, en la cual aparece recogida la clasificación de las sustancias del proceso según el Reglamento (CE) nº 1272/2008 (CLP).

Tabla 51. Clasificación de las sustancias del proceso según el Reglamento (CE) nº 1272/2008 (CLP). (110) (111) (Fichas de seguridad)

Sustancia	Clase de peligro	Categoría de peligro	Frases H	Pictograma
Anhídrido acético	Líquidos inflamables	3	H226	
	Toxicidad aguda (oral)	4	H302	
	Toxicidad aguda (inhalación)	2	H330	
	Corrosión o irritación cutáneas	1B	H314	
	Lesiones oculares graves o irritación ocular	1	H318	
	Toxicidad específica en determinados órganos – exposición única (exposición de las vías respiratorias)	3	H335	
Acetato de metilo	Líquidos inflamables	2	H225	
	Lesiones oculares graves o irritación ocular	2	H319	
		Toxicidad específica en determinados órganos – exposición única (efectos narcóticos, somnolencia)	3	H336

Tabla 51. Continuación de la clasificación de las sustancias del proceso según el Reglamento (CE) nº 1272/2008 (CLP). (110) (111) (Fichas de seguridad)

Sustancia	Clase de peligro	Categoría de peligro	Frase H	Pictograma
Monóxido de carbono	Gas inflamable	1	H220	
	Gas a presión	Gas comprimido	H280	
	Toxicidad aguda (inhalación)	3	H331	
	Toxicidad para la reproducción	1A	H360	
	Provoca daños en los órganos	1	H370	
	Toxicidad específica en determinados órganos por exposición repetida	1	H373	
Hidrógeno	Gas inflamable	1	H220	
	Gas a presión	Gas comprimido	H280	
Ácido acético	Líquidos inflamables	3	H226	
	Corrosión o irritación cutánea	1A	H314	
	Lesiones oculares graves o irritación ocular	1	H318	
Yoduro de metilo	Líquidos y vapores inflamables	3	H226	
	Toxicidad aguda (oral)	3	H301	
	Toxicidad aguda (cutánea)	4	H312	
	Toxicidad aguda (por inhalación)	3	H331	
	Corrosión o irritación cutánea	2	H315	
	Irritación ocular	2	H319	
	Toxicidad específica en determinados órganos – exposición única (exposición de las vías respiratorias)	3	H335	
	Carcinogenicidad	2	H351	
	Muy tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos	2	H410	
Yoduro de litio	Corrosión o irritación cutánea	2	H315	
	Lesiones oculares graves o irritación ocular	2	H319	
	Toxicidad específica en determinados órganos tras una exposición única	3	H335	
	Corrosión o irritación cutánea	2	H315	
Catalizador de rodio	Lesiones oculares graves o irritación ocular	2	H319	
	Toxicidad específica en determinados órganos tras una exposición única	3	H335	

Evaluando la Tabla superior se concluye que los compuestos que suponen un mayor peligro son el monóxido de carbono y el yoduro de metilo. Sin embargo, la cantidad en el proceso es mucho más elevada para el monóxido de carbono.

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

Para clasificar la planta de producción de anhídrido acético según la Directiva Seveso, se seguirá el **Real Decreto 840/2015**, de 21 de septiembre, por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas, también conocida como Seveso III. El objetivo de dicha Directiva es la prevención de accidentes graves hacia la salud humana, bienes y/o el medio ambiente, en los que estén involucradas sustancias peligrosas. (91)

Lo que permite determinar cómo se clasifica la planta es el Anexo I, que se divide en Parte 1 y Parte 2. En la primera se definen las categorías y las cantidades umbrales inferiores y superiores para sustancias peligrosas de conformidad con el Reglamento (CE) n.º 1272/2008, del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008. En la segunda, aparecen sustancias peligrosas nominadas junto con nuevos umbrales que prevalecen sobre los de la Parte 1. En los puntos 5, 6 y 21 del Artículo 3 del Real Decreto, se define qué se entiende por establecimiento de nivel inferior, establecimiento de nivel superior y sustancia peligrosa. A continuación se muestran dichas definiciones. (91)

- Establecimiento de nivel inferior: un establecimiento en el que haya presentes sustancias peligrosas en cantidades iguales o superiores a las especificadas en la columna 2 de la Parte 1 o de la Parte 2 del Anexo I, pero inferiores a las cantidades especificadas en la columna 3 de la Parte 1 o de la parte 2 del Anexo I. Todo ello empleando, cuando sea aplicable, la regla de la suma de la nota 4 del Anexo I. (91)
- Establecimiento de nivel superior: un establecimiento en el que haya presentes sustancias peligrosas en cantidades iguales o superiores a las especificadas en la columna 3 de la Parte 1 o de la Parte 2 del Anexo I. Todo ello empleando, cuando sea aplicable, la regla de la suma de la nota 4 del Anexo I. (91)
- Sustancia peligrosa: toda sustancia o mezcla incluida en la Parte 1 o enumerada en la Parte 2 del Anexo I, incluyendo aquellas en forma de materia prima, producto, subproducto, residuo o producto intermedio. (91)

Para esta clasificación solo se tendrán en cuenta el anhídrido acético y las sustancias que se introducen en el proceso de forma continua, es decir, acetato de metilo, monóxido de carbono y ácido acético. Esto se debe a que el resto de los compuestos involucrados en el proceso se recirculan constantemente y solo son introducidas en casos puntuales. Por su parte, el Real Decreto establece que la clasificación debe hacerse en base a la cantidad máxima de sustancia presente en un momento dado. Es por ello que se considerarán 72 horas como periodo máximo en el que las sustancias permanecen en la planta almacenadas. (91)

En la Tabla 52 se muestran las cantidades de cada sustancia para dicho stock de tres días junto a la categoría de peligro a las que pertenecen, los umbrales y si la planta está afectada por Seveso III. Destacar que el Real Decreto indica que si alguna de las sustancias de estudio para la clasificación se encuentra listada en la Parte 2 de ‘Sustancias peligrosas nominadas’, se deben utilizar los umbrales estipulados para los propios compuestos. No obstante, en este caso ninguna de las sustancias consta en el listado, por lo que se aplica la Parte 1 de ‘Categorías de sustancias peligrosas’.

Tabla 52. Datos para clasificar la planta según la Directiva Seveso. (91)

Sustancias	Cantidad (t)	Categoría	Umbral inferior (t)	Umbral superior (t)	Afecta (sí/no)	Nivel
<b>Anhídrido acético</b>	906,4	H2	50	200	Sí	Superior
		P5a	10	50		
<b>Acetato de metilo</b>	877,0	H2	50	200	Sí	Superior
		P5a	10	50		
<b>Monóxido de carbono</b>	497,4	H2	50	200	Sí	Superior
		P2	10	50		
<b>Ácido acético</b>	243,7	H3	50	200	Sí	Superior
		P5a	10	50		

Como se aprecia, la planta estaría afectada a nivel superior por la Directiva Seveso III, por superar en todas las sustancias de estudio el umbral máximo que estipula el Real Decreto 840/2015.

#### 11.4. Clasificación NFPA

La norma NFPA 704 desarrollada por la *National Fire Protection Association*, es utilizada para evaluar de forma rápida y visual los peligros relacionados con salud, inflamabilidad y reactividad química que presenta una sustancia química. (112)

A través de un rombo dividido en cuatro partes diferenciadas por colores y números, se indica el grado de peligrosidad de la sustancia que se está clasificando. El color azul hace referencia al ‘Riesgo a la salud’, el rojo a la ‘Inflamabilidad’, el amarillo a la ‘Reactividad’ y por último el blanco a algún tipo de riesgo específico, como por ejemplo si la sustancia es oxidante, corrosiva, etc. La escala numérica va de 0 a 4, siendo 0 poco grave y 4 muy grave. En la Figura X se puede observar dicho rombo conocido como ‘Diamante de fuego’. (112)



Figura 19. Diamante NFPA. (113)

A continuación, en la Tabla 53 aparece reflejada la clasificación de las sustancias involucradas en el proceso de producción de anhídrido acético según la norma NFPA 704.

Tabla 53. Clasificación NFPA. (CRW4) (Fichas de seguridad)

Sustancias	Riesgo de salud	Inflamabilidad	Reactividad	Riesgo específico
Anhídrido acético	3	2	1	-
Acetato de metilo	2	3	0	-
Monóxido de carbono	3	4	0	-
Hidrógeno	0	4	0	-
Ácido acético	3	2	0	-
Yoduro de metilo	2	0	0	-
Yoduro de litio	2	1	1	-
Cloruro de carbonilo de rodio	1	0	0	-

### 11.5. Estudio de la reactividad química descontrolada

Para controlar y asegurar la seguridad del proceso, se ha de llevar a cabo un estudio de los peligros derivados de la reacción química y de la compatibilidad de los compuestos que participan en el proceso.

La reacción de carbonilación del acetato de metilo se caracteriza por ser exotérmica. Uno de los principales peligros cuando se trabaja con este tipo de reacciones es que ocurra un fenómeno conocido como *runaway*. Este hace referencia a reacciones descontroladas, que suceden cuando se crea una situación en la que la producción de calor es superior a la velocidad con la que se retira, lo que conlleva un aumento de temperatura en la mezcla. Este incremento de la temperatura provoca que se incremente la velocidad de reacción, lo que a su vez causa que se produzca una mayor cantidad de calor. Todos estos hechos provocarían que la temperatura en el reactor se descontrolara provocando graves consecuencias. (114)

Este tipo de situación puede deberse a múltiples factores como que se desprenda más calor debido en la reacción principal o por la descomposición térmica de las sustancias, que se acumulen reactivos o productos intermedios, que no se retire el calor de manera correcta, etc. (114)

Por esa razón, se deben analizar tres aspectos para garantizar la seguridad cuando se trabaje con reacciones exotérmicas.

En primer lugar, se debe realizar un estudio de la energía que se produce debido a la reacción química. Para llevar a cabo un diseño seguro debe asegurarse conocer con precisión la entalpía de reacción y el calor desprendido durante la operación. (114)

En segundo lugar, se debe estudiar la velocidad de la reacción en las distintas condiciones que se puedan dar en el reactor. Es fundamental comprobar cómo se comportará la velocidad si se producen condiciones fuera de lo normal durante la operación. (114)

El último aspecto se refiere al diseño de la planta y de los equipos, es decir, a los medios que se emplean para retirar el calor generado y para controlar y proteger el equipo en caso de que se produzca la acumulación de gases. (114)

En conclusión, para garantizar la seguridad en planta se han de evaluar los posibles riesgos que pueden suceder ante distintas situaciones, y se deben plantear las medidas de seguridad pertinentes para hacerles frente en los diferentes casos. Estas medidas serían preventivas, para evitar que el peligro llegue a suceder, o de protección, para disminuir las consecuencias.

Por estas razones, se ha instalado un sistema de control que permita controlar de manera eficaz la temperatura, presión y cantidad de mezcla en el reactor. Además, se han instalado alarmas y válvulas de alivio y se cuenta con un sistema eficaz de refrigeración para mantener la temperatura del equipo bajo control.

#### 11.5.1. Matriz de compatibilidad química

Una matriz de compatibilidad química muestra los posibles peligros que se pueden producir al mezclar distintas sustancias. Para obtener esta matriz se hará uso del software *Chemical Reactivity Worksheet 4.0* desarrollado por distintas organizaciones entre las que se encuentran el Centro para la Seguridad de Proceso Químicos, la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos, la Oficina de Respuesta y Restauración de la NOAA, el Instituto de Tecnología de Materiales (MTI) y *Dow Chemical Company*. (115)

El software utiliza la siguiente nomenclatura para indicar las distintas interacciones:

- **Y**: Sustancias compatibles, no se producen reacciones peligrosas
- **N**: Sustancias incompatibles, su contacto produce reacciones peligrosas.
- **C**: Precaución, pueden producirse interacciones peligrosas en determinadas situaciones.
- **SR**: Compuestos que pueden reaccionar consigo mismo, por ejemplo en reacciones de polimerización.

En la Figura 20 se muestra la matriz de compatibilidad química obtenida. En ella no se incluyen el  $\text{Rh}_2(\text{CO})_4\text{Cl}_2$  y el LiI, ya que por ser compuestos sólidos a temperatura ambiente, no están incluidos dentro del *software*. Además, por seguridad se considera oxígeno y agua en la matriz. Al tratarse de una planta con los equipos expuestos al aire libre, existiría la posibilidad de que por algún tipo de fallo las sustancias entraran en contacto con el oxígeno del aire, humedad o el propio agua de lluvia, por ello se evaluarán en la matriz.

NFPA				Planta de producción de anhídrido acético Compatibility Chart	ACETIC ACID, GLACIAL	ACETIC ANHYDRIDE	CARBON MONOXIDE	HYDROGEN	METHYL ACETATE	METHYL IODIDE	OXYGEN	WATER
Health	Flammability	Instability	Special									
3	2	0		ACETIC ACID, GLACIAL								
3	2	1		ACETIC ANHYDRIDE	C							
3	4	0		CARBON MONOXIDE	Y	Y						
0	4	0		HYDROGEN	Y	Y	Y					
2	3	0		METHYL ACETATE	Y	Y	Y	Y				
				METHYL IODIDE	Y	Y	Y	Y	Y			
3	0	0	OX	OXYGEN	N	N	N	N	N	N		
				WATER	Y	N	Y	Y	C	C	N	

Figura 20. Matriz de compatibilidad química (CRW4)

Como se muestra en la matriz, la mayoría de los compuestos químicos del propio proceso son compatibles entre sí. Sin embargo, se debe tomar precaución con el contacto entre el ácido acético y el anhídrido acético, que, a temperatura ambiente, pueden producir una reacción exotérmica intensa y explosiva.

Lo más destacable negativamente es la incompatibilidad entre el oxígeno con el resto de las sustancias. En general, la reacción entre ellas podría provocar productos explosivos, corrosivos, tóxicos o inflamables, liberación de gases, reacciones exotérmicas y una situación particularmente intensa y violenta.

Por otro lado, la interacción entre anhídrido acético y agua desencadenaría en la descomposición del anhídrido obteniéndose ácido acético mediante una reacción exotérmica. El metil acetato y el yoduro de metilo en contacto con agua no suponen una incompatibilidad al nivel del anhídrido, pero en determinadas situaciones podrían originarse productos corrosivos mediante reacciones que liberen gases y puedan causar presurización. Por eso es de suma importancia evitar cualquier mínimo contacto de las sustancias del proceso con oxígeno o agua.

Por último, indicar que el cloruro de carbonilo de rodio es compatible con el resto de las sustancias del proceso. No obstante, a pesar de que en estado sólido es estable en contacto con aire, cuando se encuentra en disolución, se descompone en un compuesto marrón insoluble. (93)

### 11.6. Distancias de seguridad

Un correcto y óptimo *layout*, es decir, la disposición de las estancias y equipos en el terreno disponible, es un aspecto fundamental en el diseño de plantas de producción. En caso de producirse una explosión se debe asegurar que haya cierta distancia entre los equipos para evitar

la propagación y empeorar la situación. Por esa razón, existen guías que proporcionan distancias mínimas entre equipos e instalaciones que permiten aumentar la seguridad y el control. (116)

En concreto, se empleará la guía GAP 2.5.2 proporcionado por GAPS (*Global Asset Protection Services*), dirigida a plantas químicas y elaborada para limitar la sobrepresión de explosión y la exposición al fuego. Sino se puede seguir esta guía serán necesarios equipos de protección secundarios como equipos de protección contra incendios. (116)

### 11.6.1. Distancia de seguridad entre áreas

La Figura 21 puede ser empleada para conocer las distancias mínimas de seguridad bajo las indicaciones de los *Global Asset Protection Services*.

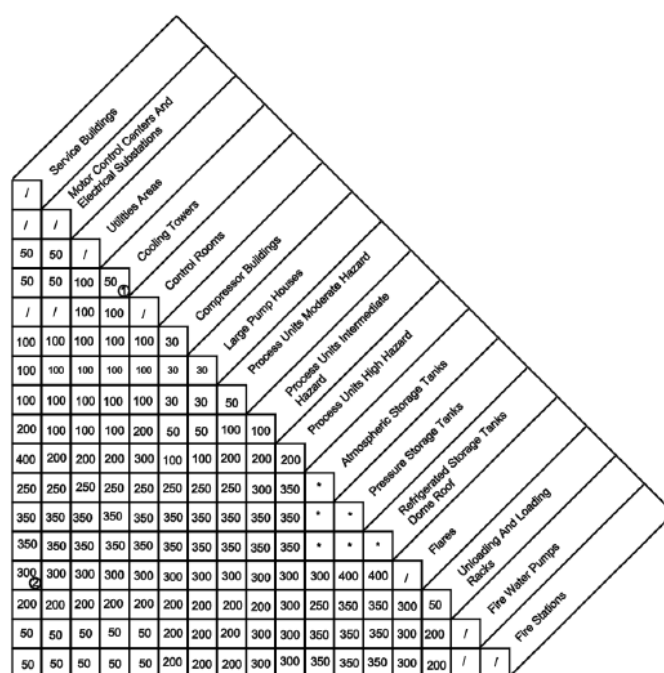


Figura 21. Distancias mínimas de seguridad entre áreas en pies (116)

Se han seleccionado en la Figura superior las estancias que estarán presentes en la planta de producción de anhídrido acético, y las distancias mínima que se aconseja dejar entre ellas se recogen en la Tabla 54 en metros.

Tabla 54. Distancias de seguridad entre área de la planta. (Elaboración propia a partir de (116))

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
<b>1 Edificios de servicio</b>	0								
<b>2 Área de utilidades</b>	15	0							
<b>3 Habitación de control</b>	0	30,5	0						
<b>4 Estaciones de bombeo</b>	31	30,5	30,5	9,15					
<b>5 Unidades de proceso peligrosas</b>	122	61	61	61	61				
<b>6 Tanques de almacenamiento</b>	76	76,25	76,25	76,25	106,75	0			
<b>7 Carga y descarga</b>	61	61	61	61	91,5	76,25	15,25		
<b>8 Bomba de agua contra incendios</b>	15	15,25	15,25	61	91,5	106,75	61	0	
<b>9 Estación de bomberos</b>	15	15,25	15,25	61	91,5	106,75	61	0	0

Como se aprecia, hay estancias como los edificios de servicio y la sala de control entre las que no es necesario dejar una distancia. Sin embargo, otras como la bomba de agua contra incendios y la zona de tanques de almacenamiento más de 100 m son necesarios.

### 11.6.2. Distancias de seguridad entre equipos

Para las distancias mínimas recomendadas entre los distintos equipos se emplea la Figura 22.

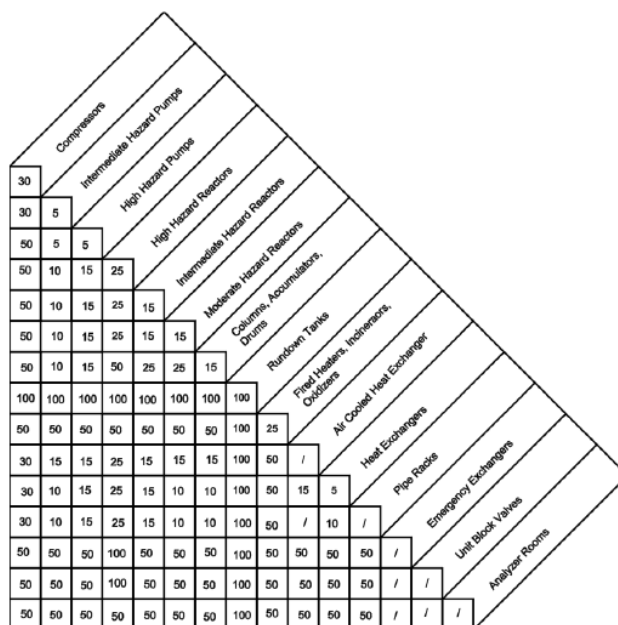


Figura 22. Distancias mínimas entre equipos en pies (116)

Para indicar las distancias mínimas que debe haber entre los distintos equipos del procesos, se ha realizado una agrupación de los que pertenezcan a la misma categoría y se le ha dado una nomenclatura propia, Tabla 55.

Tabla 55. Nomenclatura de los equipos del proceso

Nomenclatura	Equipos	Lista
C	Compresor	C-101
B	Bombas	P-101 A/B P-102 A/B P-103 A/B P-203 A/B P-204 A/B
R	Reactor	R-101
T	Columnas, separadores y tanques	TM-101 V-201 T-201 T-202
E	Intercambiadores de calor	E-101 E-102 E-201 E-202 E-207 E-208

El reactor R-101 se considera de alta peligrosidad debido a las condiciones de presión y temperatura de la operación y las sustancias con las que trabaja. Además, las bombas se considerarán dentro de la categoría de alta peligrosidad (*High Hazard Pumps*) por el principio de prevención de riesgos.

Finalmente, en la Tabla 56 se indican las distancias mínimas que deben tener los equipos en la planta.

Tabla 56. Distancias mínimas de seguridad entre equipos de la planta (Elaboración propia a partir de (116))

Distancias, m	C	B	R	T	E
C	9,15				
B	9,15	1,75			
R	9,15	3,05	7,625		
T	9,15	3,05	9,15	4,575	
E	9,15	3,05	7,625	3,05	1,525

Se observa que la mayor distancia, aproximadamente 10 metros, se debe mantener entre el compresor con respecto al resto de equipos. Pese a ello, en el siguiente apartado 11.7. *Índice DOW de fuego y explosión*, se calculará el radio de exposición en caso de explosión o incendio para el reactor R-101 y la columna de destilación T-202. Se adelanta que dicha distancia es superior a los 10 metros, por lo que se usará esta y no la mínima.

### 11.7. Índice DOW de fuego y explosión

El objetivo principal del índice DOW de fuego y explosión, abreviado como índice F&E, es servir como guía para seleccionar entre distintos métodos de protección contra incendios y permitir ordenar las diferentes unidades del proceso según su riesgo. Esto se hace mediante un valor numérico que se calcula basándose en la naturaleza del proceso y en las sustancias químicas y materiales que intervienen en el mismo. (92)

El procedimiento que hay que seguir para obtener el índice de fuego y explosión es el siguiente: (92)

- 1) Selección de las unidades del proceso que produzcan el mayor impacto en caso de un incendio o explosión.
- 2) Determinar el Factor Material (FM) de las respectivas unidades.
- 3) Determinar el Factor de Riesgos Generales del Proceso (F1) aplicando las penalidades necesarias.
- 4) Determinar el Factor de Riesgos Especiales del Proceso (F2) aplicando las penalidades necesarias.
- 5) Calcular el Factor de Riesgos de la Unidad (F3) como  $F1 \cdot F2$ .
- 6) Calcular el índice DOW de fuego y explosión como  $F3 \cdot FM$ .

- 7) Determinar el área de exposición alrededor del equipo, además del radio de exposición.
- 8) Calcular el Factor de Daño correspondiente.

#### 11.7.1. Selección de las unidades pertinentes

Para la selección de estos equipos se emplea un método lógico que considera distintos factores como la energía potencial química de las unidades, la cantidad de materiales peligrosos, el coste, la presión y temperatura del proceso, entre otros. Es decir, se considera que unidades pueden tener un mayor impacto en caso de que sucediera un incendio o explosión. (92)

En este caso se seleccionará el análisis del índice DOW en el reactor R-101, ya que es la unidad donde se concentran todos los reactivos del proceso y donde ocurre la reacción química a la temperatura y presión más elevada de la planta. Asimismo, se realizará el análisis de la torre de destilación T-202, debido a que es un equipo fundamental empleado para la purificación del anhídrido acético y es una de las unidades donde hay temperaturas más elevadas.

#### 11.7.2. Factor Material (FM)

El Factor Material es el valor de partida para calcular el índice DOW y representa la medida de la tasa intrínseca de liberación de la energía potencial, cuando se produce un incendio o explosión, debido a una reacción química.

Para obtenerlo es necesario utilizar los factores  $N_F$  y  $N_R$  para cada una de las sustancias presentes en las unidades, que se obtienen de la clasificación NFPA del apartado 11.4. *Clasificación NFPA*. Conociendo el valor de estos índices se puede obtener el factor material de cada sustancia empleando el manual técnico *Dow's and Fire & Explosion Index Hazard Classification Guide* de AIChE publicado por Instituto Americano de Ingenieros Químicos. (92)

En el Apéndice B de dicho manual se indica que para mezclas se escogerá el FM mayor de entre todas las sustancias, siempre que su concentración sea superior al 5%. En la Tabla 57 se indican los factores de materiales obtenidos para cada compuesto químico. (92)

Tabla 57. Factor de material para cada una de las sustancias (92)

Substancias	N <sub>s</sub>	N <sub>F</sub>	N <sub>R</sub>	FM
Anhídrido acético	3	2	1	14
Acetato de metilo	2	3	0	16
Monóxido de carbono	3	4	0	21
Hidrógeno	0	4	0	21
Ácido acético	3	2	0	10
Yoduro de metilo	2	0	0	1
Yoduro de litio	2	1	1	14
Cloruro de carbonilo de rodio	1	0	0	1

En el Reactor R-101 están presentes todos los compuestos listados por tanto el valor del Factor Material para la unidad será de 21 debido al monóxido de carbono, que está en la

concentración más elevada. Por otro lado, en la columna de destilación T-202 sólo están presentes con una concentración superior al 5% el ácido acético y el anhídrido acético, por lo que el mayor FM es de 14 para el  $\text{Ac}_2\text{O}$ .

### 11.7.3. Factor de Riesgos Generales del Proceso

Son factores que juegan un papel crucial en la determinación de la magnitud de las pérdidas en un incidente. Las penalizaciones a este factor vienen dadas por seis ítems, que indican posibles riesgos asociados a la mayoría de los procesos. La selección de cada índice, en el caso de que fuera necesario, se explica a continuación. (92)

- Reacciones químicas exotérmicas: En el Reactor R-101 tiene lugar una reacción exotérmica de carbonilación. Se selecciona una penalización de 0,5 ya que estas reacciones pueden ser moderadas o bajas, por lo que se escoge la más restrictiva.
- Manejo y transporte del material: Ambos equipos operan de forma continua, por tanto no incluyen operaciones de carga y descarga manuales que puedan provocar la entrada de aire al sistema. Por tanto, no hay penalización.
- Unidades de proceso encerradas o interiores: Si los equipos se disponen al aire libre no hay penalidad, como es el caso de ambos equipos.
- Acceso: El acceso a los equipos se puede realizar desde cualquier lado ya que están al aire libre, por tanto ninguno tiene penalidad.
- Drenaje y control de derrames: No se ha considerado su diseño en el presente proyecto, por tanto se seleccionará la mayor penalización, 0,5.

Finalmente se determina F1 como la suma del factor base y de las penalidades indicadas.

### 11.7.4. Factor de Riesgos Especiales del Proceso

Estos factores contribuyen a indicar la probabilidad de que ocurra un incidente y hacen referencia a condiciones específicas del proceso que suelen ser causas de incidentes de fuego y explosión. Se consideran doce ítems y la selección de la penalización en cada caso se comenta a continuación: (92)

- Materiales tóxicos: Para determinar la penalización se multiplica el factor de salud de la clasificación NFPA 704 ( $N_s$  en Tabla X) por 0,2. En el caso de una mezcla se selecciona el  $N_s$  mayor. Tanto para el reactor R-101 como para la columna T-202 se obtiene un valor final de 0,6.
- Presión subatmosférica: La presión de operación está por encima de los 500 mmHg en ambos equipos. Por tanto, no se presenta penalización para ninguno de ellos.

- Operación en o cerca del rango de inflamabilidad: En el reactor R-201 se trabaja siempre en o cerca del rango de inflamabilidad por la presencia de hidrógeno, por lo que se selecciona una penalización de 0,85. Por otro lado, para la torre se selecciona una penalización de 0,3 ya que ante algún fallo inesperado en el equipo, la operación podría trabajar en los rangos de inflamabilidad.
- Explosión de polvo: No se trabaja con polvo o sólidos, por tanto no se penaliza en ninguno de los equipos.
- Presión: Si se opera a presiones por encima de la atmosférica se aplica una penalización. La columna de destilación T-202 trabaja a una presión muy próxima a la atmosférica, por lo que no se considera ninguna penalización. En cambio, como el reactor R-201 trabaja a presiones elevadas es necesario aplicarla. Para ello, se utiliza la Figura 23 con la que se puede hallar la penalización correspondiente a la presión de operación (50 bar = 725,2 psi) y a la presión de tarado de la válvula de alivio (63,2 bar= 916,9 psi).

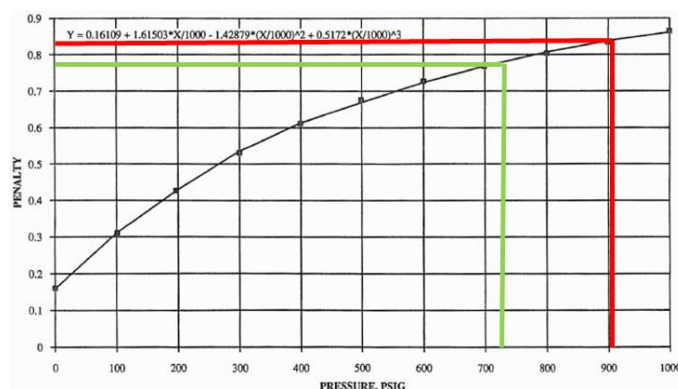


Figura 23. Penalización por trabajar a presiones elevadas (92)

Finalmente, se divide la penalización por la presión de operación (0,78) entre la penalización por la presión de alivio de la válvula (0,82), obteniendo así un factor de corrección de la presión final (0,95). Ese factor se multiplica por la penalización de presión de operación, resultando en una penalización para el reactor de 0,74.

- Temperatura baja: Este factor representa la fragilidad del acero al carbono u otros materiales si se trabaja a temperaturas por debajo de sus temperaturas de transición. No se trabaja a temperaturas bajas, por tanto no hay penalización.
- Cantidad de material inflamable/inestable: Dependiendo de la cantidad de sustancias inflamables/inestables en el interior del equipo, se deberá considerar un área adicional de exposición. Hay tres categorías distintas para esta sección, pero solo se aplica un factor de penalización dependiendo del material seleccionado como FM. Para ambos se escoge la categoría de líquido y gases en proceso. En la torre T-202 el anhídrido acético es el compuesto más peligroso en el interior del equipo, además su presencia puede afectar a la

penalización por ser un líquido inflamable con un punto flash por debajo de los 60°C. En el caso del reactor R-101 se aplica por ser el CO un gas inflamable. La penalización se obtiene gráficamente de la Figura 24 a través de la entalpía de combustión total, que se calcula como el producto entre la cantidad de la compuesto en el interior de la unidad y su calor de combustión.

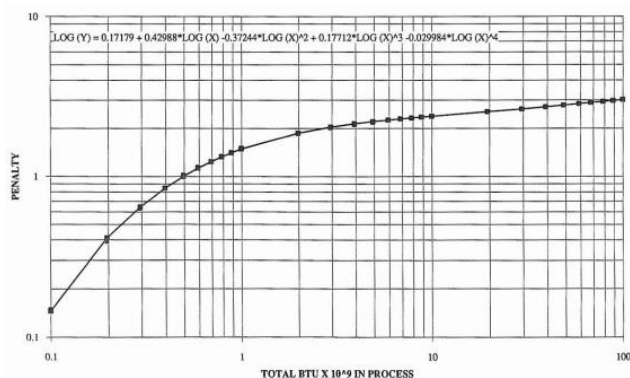


Figura 24. Penalización por cantidad de material inflamable/inestable (92)

En la Tabla 58 se indican los datos para el cálculo, así como la penalización obtenida de la Figura 24. Como se aprecia no es necesario aplicar ninguna penalización para ninguno de los equipos.

Tabla 58. Datos para la penalización por cantidad de material inflamable

Equipo	Cantidad (kg)	H <sub>c</sub> (BTU/kg)	ΔH <sub>c</sub> · 10 <sup>9</sup> (BTU)	Penalización
Columna T-202	4546,56	5802,98	2,63 · 10 <sup>-2</sup>	0
Reactor R-101	155,54	9575,99	1,49 · 10 <sup>-3</sup>	0

- Corrosión y erosión: Como se comentará en los diseños mecánicos de cada uno de los equipos, *Parte A del Anexo II*, se aplica al espesor un sobredimensionamiento de 4 mm por corrosión, ya que se trabaja con un material que no tiene una compatibilidad excelente con una de las sustancias de las unidades. Por ello, se selecciona una penalización de 0,2.
- Fugas-Juntas y empaquetaduras: Para el diseño mecánico del reactor y de la columna se aplica una eficiencia de soldadura de 100%, por lo que no deberían producirse fugas por lo que no se aplica ninguna penalización.
- Uso de equipos con llama: No se emplean equipos con llama ni en la columna ni en el reactor, por ende no se aplica penalización.
- Sistema de intercambio de calor con aceite caliente: No hay penalización por este motivo debido a no haber presencia de este tipo de sistemas en la planta.
- Equipo rotatorio: No se utilizan dispositivos de rotación, por lo que tampoco hay factor de penalización.

## 11.7.5. Formularios del Índice DOW de fuego y explosión

En la Tabla 59 y en la Tabla 60 se presentan los formularios correspondientes donde se indican los factores finales y el índice de fuego y explosión.

Tabla 59. Formulario del Índice DOW para el reactor R-101 (92)

<b>País:</b> España	<b>Ubicación:</b> Polígono Industrial de El Morell, Tarragona	<b>Fecha:</b> 27/04/2024
<b>Sitio:</b> El Morell	<b>Unidad de proceso:</b> Reactor R-101	<b>Sección:</b> 100
<b>Preparado por:</b> Tasende Reboredo, Rodrigo Torres Pérez, Jacobo	<b>Revisado por:</b> Tasende Reboredo, Rodrigo Torres Pérez, Jacobo	<b>Estado de la unidad del proceso:</b> Diseño
<b>Materiales en la unidad del proceso:</b> Acetato de metilo (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub> ), monóxido de carbono (CO), anhídrido acético (C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub> ), ácido acético (CH <sub>3</sub> COOH), yoduro de metilo (CH <sub>3</sub> I), yoduro de litio (LiI) y Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>		
<b>Material básico para el factor de material:</b> Monóxido de carbono (CO)		
<b>FACTOR DE MATERIAL</b>		<b>21</b>
<b>1. Riesgos generales del proceso</b>	<b>Rango del factor de penalidad</b>	<b>Factor de penalidad usado</b>
<b>Factor Base</b> .....	1.00	1
A. Reacciones químicas exotérmicas	0.30 - 1.25	<b>0,5</b>
B. Procesos endotérmicos	0.20 - 0.40	<b>0</b>
C. Manejo y transporte de material	0.25 - 1.05	<b>0</b>
D. Unidades de proceso encerradas o interiores	0.25 - 0.90	<b>0</b>
E. Acceso	0.20 - 0.35	<b>0</b>
F. Drenaje y control de derrames	0.25 - 0.50	<b>0,5</b>
<b>Factor de Riesgo General del Proceso (F<sub>1</sub>)</b> .....		<b>2</b>
<b>2. Riesgos Especiales del Proceso</b>		
<b>Factor Base</b> .....	1.00	<b>1</b>
A. Material(es) tóxico(s)	0.20 - 0.80	<b>0,6</b>
B. Presión subatmosférica (< 500 mm Hg)	0.50	<b>0</b>
C. Operación en o cercana al rango inflamable (x) Inertizada ( ) Sin Inertizar		
1. Líquido inflamables almacenados en tanques	0.50	<b>0</b>
2. Fallo en purga o perturbación del proceso	0.30	<b>0</b>
3. Operación regular en rango inflamable	0.80	<b>0,8</b>
D. Explosión de polvo	0.25 - 2.00	<b>0</b>
E. Presión	Presión de operación 50 bar Presión de alivio 63,2 bar	<b>0,74</b>
F. Temperatura baja	0.20 - 0.30	<b>0</b>
G. Cantidad de material inflamable/inestable:	Cantidad = 118,60 kg H <sub>C</sub> = 10103,20 kJ/kg	
1. Líquidos o gases en proceso		<b>0</b>
2. Líquidos o gases en almacenados		<b>0</b>
3. Sólidos combustibles almacenados, Polvo en proceso		<b>0</b>
H. Corrosión y Erosión	0.10 - 0.75	<b>0,2</b>
I. Fugas – Juntas y empaquetaduras	0.10 - 1.50	<b>0</b>
J. Uso de equipos con llama		<b>0</b>
K. Sistema de intercambio de calor con aceite caliente	0.15 - 1.15	<b>0</b>
L. Equipo rotatorio	0.50	<b>0</b>
<b>Factor de Riesgos Especiales del Proceso (F<sub>2</sub>)</b> .....		<b>3,34</b>
<b>Factor de Riesgos de la Unidad del Proceso (F<sub>1</sub> x F<sub>2</sub>) = F<sub>3</sub></b> .....		<b>6,68</b>
<b>Índice de Fuego y Explosión (F<sub>3</sub> x MF = F&amp;EI)</b> .....		<b>140,28</b>

Tabla 60. Formulario del Índice DOW para la columna T-201 (92)

<b>País:</b> España	<b>Ubicación:</b> Polígono Industrial de El Morell, Tarragona	<b>Fecha:</b> 27/04/2024
<b>Sitio:</b> El Morell	<b>Unidad de proceso:</b> Columna de destilación T-201	<b>Sección:</b> 200
<b>Preparado por:</b> Torres Pérez, Jacobo Tasende Reboredo, Rodrigo	<b>Revisado por:</b> Torres Pérez, Jacobo Tasende Reboredo, Rodrigo	<b>Estado de la unidad del proceso:</b> Diseño
<b>Materiales en la unidad del proceso:</b> Anhídrido acético (C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub> ) y ácido acético (CH <sub>3</sub> COOH)		
<b>Material básico para el factor de material:</b> Anhídrido acético (C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub> )		
<b>FACTOR DE MATERIAL</b>		<b>14</b>
<b>1. Riesgos generales del proceso</b>	<b>Rango del factor de penalidad</b>	<b>Factor de penalidad usado</b>
<b>Factor Base</b> .....	1.00	1
A. Reacciones químicas exotérmicas	0.30 - 1.25	0
B. Procesos endotérmicos	0.20 - 0.40	0
C. Manejo y transporte de material	0.25 - 1.05	0
D. Unidades de proceso encerradas o interiores	0.25 - 0.90	0
E. Acceso	0.20 - 0.35	0
F. Drenaje y control de derrames	0.25 - 0.50	0,5
<b>Factor de Riesgo General del Proceso (F<sub>1</sub>)</b> .....		<b>1,5</b>
<b>2. Riesgos Especiales del Proceso</b>		
<b>Factor Base</b> .....	1.00	1
A. Material(es) tóxico(s)	0.20 - 0.80	0,6
B. Presión subatmosférica (< 500 mm Hg)	0.50	0
C. Operación en o cercana al rango inflamable ( ) Inertizada (x) Sin Inertizar		
1. Líquido inflamables almacenados en tanques	0.50	0,5
2. Fallo en purga o perturbación del proceso	0.30	0
3. Operación regular en rango inflamable	0.80	0
D. Explosión de polvo	0.25 - 2.00	0
E. Presión	Presión de operación 1,15 bar Presión de alivio 4,82 bar	0
F. Temperatura baja	0.20 - 0.30	0
G. Cantidad de material inflamable/inestable:	Cantidad = 4546,56 kg H <sub>C</sub> = 6122,47 kJ/kg	
1. Líquidos o gases en proceso		0
2. Líquidos o gases en almacenados		0
3. Sólidos combustibles almacenados, Polvo en proceso		0
H. Corrosión y Erosión	0.10 - 0.75	0,2
I. Fugas – Juntas y empaquetaduras	0.10 - 1.50	0
J. Uso de equipos con llama		0
K. Sistema de intercambio de calor con aceite caliente	0.15 - 1.15	0
L. Equipo rotatorio	0.50	0
<b>Factor de Riesgos Especiales del Proceso (F<sub>2</sub>)</b> .....		<b>2,3</b>
<b>Factor de Riesgos de la Unidad del Proceso (F<sub>1</sub> x F<sub>2</sub>) = F<sub>3</sub></b> .....		<b>3</b>
<b>Índice de Fuego y Explosión (F<sub>3</sub> x MF = F&amp;EI)</b> .....		<b>42</b>

### 11.7.6. Grado de peligrosidad

Una vez determinado el índice de F&E se puede determinar el riesgo que representan las unidades. Para ello, en la Tabla 61 se muestra los rangos del índice que se corresponde con cada tipo de peligro.

Tabla 61. Grado de peligro según el índice F&E (92)

Rango del índice F&E	Grado de peligro
1-60	Suave
61-96	Moderado
97-127	Intermedio
128-158	Grave
>159	Severo

Por tanto, se concluye que el reactor R-101 al tener un índice DOW de 140 representa un grado de peligro grave para la planta. En cambio, la columna T-201 al tener un índice de 42 refleja un grado de peligro suave.

#### 11.7.7. Radio y área de exposición

El radio de exposición es un parámetro fundamental para determinar el área de exposición, es decir, el espacio alrededor del equipo que está expuesto a un incidente por fuego o explosión. Se calcula multiplicando el índice DOW de fuego y explosión por 0,84 y transformando el valor obtenido en pies a metros. Finalmente se obtiene un radio para el reactor R-101 de 35,92 m y para la columna T-202 de 10,75 m. (92)

A partir de este valor se determina el área de exposición con la *Ecuación 1*. Se obtiene un área de 4052,56 m<sup>2</sup> para el reactor y de 363,28 m<sup>2</sup> para la columna. Esta área representa el espacio afectado por la explosión, teniendo como centro la unidad especificada.

$$A = \pi \cdot r^2 \quad [1]$$

#### 11.7.8. Factor de Daño

El Factor de Daño representa el daño global por fuego y explosión causado por la liberación de energía de reacción en cada una de las unidades. Se determina empleando la Figura 25, que relaciona este factor con el Factor de Riesgos de la Unidad del Proceso ( $F_3$ ) y con el Factor Material (FM). Se obtiene que para el reactor el Factor de Daño es de 0,82 y para la columna de 0,38. (92)

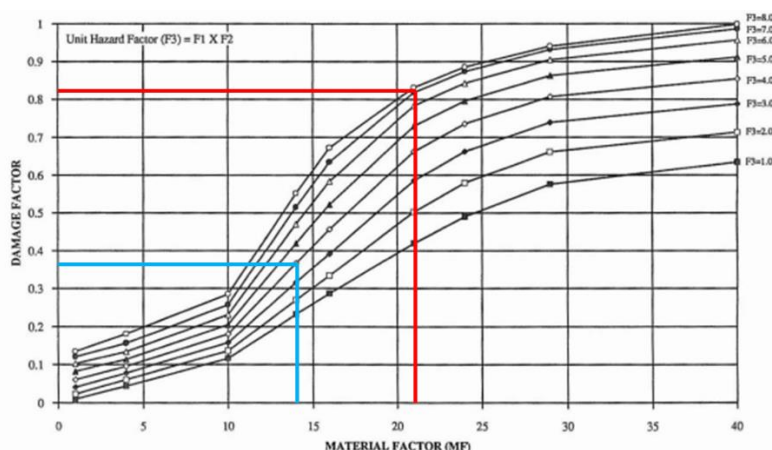


Figura 25. Factor de daño del reactor (rojo) y de la columna (azul) (92)

#### 11.8. Diseño de válvulas de alivio

Las válvulas de alivio son instrumentos destinados a actuar en caso de que llegue a suceder una sobrepresión en los equipos. El dimensionamiento de las válvulas de alivio del

reactor R-101 y de la columna de destilación T-201 se ha llevado a cabo en el *Anexo II. Cálculos Justificativos.*

### 11.9. Escenarios de fuga

En este apartado se procederá al análisis de un posible escenario de fuga que puede suceder en el reactor R-101. Se estudiará el caso de una fuga en la parte superior del tanque, que produzca la salida de gas al exterior, ya que el monóxido de carbono es la sustancia más peligrosa del sistema.

Para llevar a cabo este escenario se debe seleccionar un modelo de la fuga, que permitirá conocer la velocidad de descarga, la cantidad de sustancia descargada y el estado de la descarga. El escenario en la parte superior del tanque se modelizará como un flujo de gas a través de un orificio. (117)

La parte superior del reactor R-101 únicamente está ocupada por el gas ascendente. En este escenario se analizará que sucederá si se llega a producir una fuga en ese lugar dentro de la torre, para así analizar la magnitud del accidente que se podría producir. Con esta fuga se liberaría al exterior una corriente formada prácticamente por monóxido de carbono. En la Tabla 62 se muestra el caudal y la composición de la corriente de salida del reactor, así como las condiciones del sistema.

Tabla 62. Condiciones de la corriente en la parte final del reactor

<b>Q</b> <b>(kg/h)</b>	<b>w<sub>CO</sub></b>	<b>w<sub>H2</sub></b>	<b>P</b> <b>(bar)</b>	<b>T</b> <b>(°C)</b>
3480,28	0,99	0,01	48,59	175

En primer lugar, se debe seleccionar un diámetro del orificio de la fuga, en este caso se escoge un valor de 3 mm. Como se asume que el orificio tiene geometría circular, se determina la sección del orificio mediante la *Ecuación 2.* (117)

$$A = \frac{\pi \cdot d_{\text{orificio}}^2}{4} \quad [2]$$

A continuación, se calcula la presión crítica,  $P_{fc}$ , ya que será la presión que produzca el flujo máximo de descarga a través del orificio. Se emplea la *Ecuación 3*, donde  $\gamma$  representa el ratio  $C_p/C_v$  obtenido con el simulador *Aspen HYSYS*.

$$\frac{P_{fc}}{P} = \left( \frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad [3]$$

Si se obtiene un valor de la presión crítica por encima de la presión atmosférica, significa que se está en un flujo crítico. Como se muestra en la Tabla 63 la presión de flujo crítica obtenida es superior a 1 atm.

Tabla 63. Sección del orificio y presión de flujo crítica

$d_{\text{orificio}}$ (mm)	A (m <sup>2</sup> )	$\gamma$	$P_{fc}$ (bar)
3	$7,07 \cdot 10^{-6}$	1,394	25,72

Por tanto, se puede determinar el caudal másico de descarga por la fuga mediante la Ecuación 4.

$$Q_m = C_0 \cdot A \cdot P \cdot \sqrt{\frac{\gamma \cdot g_c \cdot M}{R \cdot T} \cdot \left(\frac{2}{\gamma + 1}\right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}}} \quad [4]$$

Donde  $C_0$  es una constante, que toma el valor de 1 si se trabaja en flujo crítico. Los valores dados para cada uno de los parámetros y los resultados obtenidos se indican en la Tabla 64.

Tabla 64. Caudal másico de descarga debido a la fuga

P (Pa)	$g_c$ (kg·m/s <sup>2</sup> ·N)	M (kg/mol)	R (J/mol·K)	T (K)	$Q_m$ (kg/s)
4859403,938	1	0,0278	8,314	448,150	0,064

A continuación, en la Figura 26 se representa la cantidad de gas que se liberaría al exterior a lo largo de una hora. Pasado una hora se habrían expulsado 231 kg de monóxido de carbono a la atmosfera, lo que supondría un gran problema para el entorno por la peligrosidad de este compuesto, ya que es un sustancia muy inflamable y nociva para la salud. Esto refuerza la idea de que debe haber un sistema de seguridad que permita detectar las fugas lo más rápido posible y actuar en consecuencia. Asimismo, se debe tener alarmas que permitan alertar para que se evacue la zona y los operarios deben contar con los equipos de protección personal necesarios para actuar con seguridad.

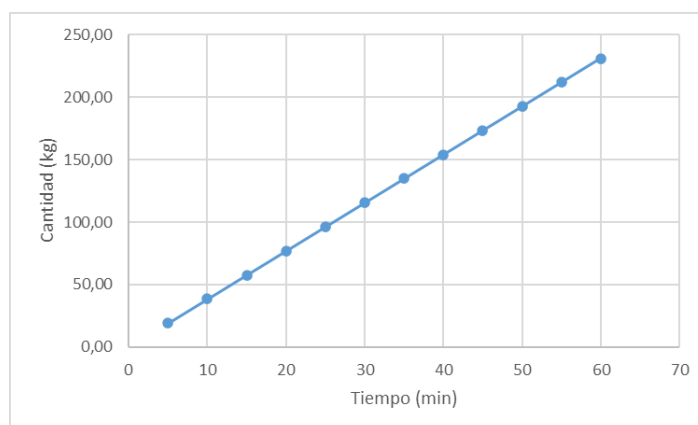


Figura 26. Cantidad de gas liberado con el tiempo

## 12. Legislación aplicable, reglamentos y códigos

### 12.1. Legislación general

- Directiva 2008/68/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de septiembre de 2008, sobre el transporte de mercancías peligrosas. Referencia: DOUE-L-2008-81911.
- Real Decreto Legislativo 2/2015, de 23 de octubre, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley del Estatuto de los Trabajadores. Referencia: BOE-A-2015-11430.
- Real Decreto 314/2006, de 17 de marzo, por el que se aprueba el Código Técnico de la Edificación. Referencia: BOE-A-2006-5515.
- Ley 27/2014, de 29 de noviembre, del Impuesto sobre Sociedades. Referencia: BOE-A-2014-12328
- Real Decreto 337/2014, de 9 de mayo, por el que se aprueban el Reglamento sobre condiciones técnicas y garantías de seguridad en instalaciones eléctricas de alta tensión y sus Instrucciones Técnicas Complementarias ITC-RAT 01 a 23. Referencia: BOE-A-2014-6084.
- Real Decreto 842/2002, de 2 de agosto, por el que se aprueba el Reglamento electrotécnico para baja tensión. Referencia: BOE-A-2002-18099.

### 12.2. Legislación ambiental

- Directiva 2010/75/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 24 de noviembre de 2010, sobre las emisiones industriales (prevención y control integrados de la contaminación). Referencia: DOUE-L-2010-82362.
- Directiva 2001/42/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 27 de junio de 2001, relativa a la evaluación de los efectos de determinados planes y programas en el medio ambiente. Referencia: DOUE-L-2001-81821.
- Directiva 2014/52/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de abril de 2014, por la que se modifica la Directiva 2011/92/UE, relativa a la evaluación de las repercusiones de determinados proyectos públicos y privados sobre el medio ambiente. Referencia: DOUE-L-2014-80824
- Directiva 2002/49/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 25 de junio de 2002, sobre evaluación y gestión del ruido ambiental. Referencia: DOUE-L-2002-81289.
- Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental. Referencia: BOE-A-2013-12913
- Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido. Referencia: BOE-A-2003-20976
- Resolución de 2 de septiembre de 2020, de la Dirección General de Calidad y Evaluación Ambiental, por la que se modifica el Anexo de la Orden TEC/351/2019, de 18 de marzo, por la que se aprueba el Índice Nacional de Calidad del Aire. Referencia: BOE-A-2020-10426

- Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire. Referencia: BOE-A-2011-1645
- Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera. Referencia: BOE-A-2007-19744

### 12.3. Legislación de seguridad e higiene

- Reglamento (CE) nº 1907/2006 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 18 de diciembre de 2006, relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de sustancias y preparados químicos (REACH), por el que se crea la Agencia Europea de Sustancias y Preparados Químicos, se modifica la Directiva 1999/45/CE y se derogan el Reglamento (CEE) nº 793/93 del Consejo y el Reglamento (CE) nº 1488/94 de la Comisión así como la Directiva 76/769/CEE del Consejo y las Directivas 91/155/CEE, 93/67/CEE, 93/105/CEE y 2000/21/CE de la Comisión. Referencia: DOUE-L-2006-82750.
- Real Decreto 840/2015, de 21 de septiembre, por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas. Referencia: BOE-A-2015-11268
- Reglamento (UE) 2016/425 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 9 de marzo de 2016, relativo a los equipos de protección individual y por el que se deroga la Directiva 89/686/CEE del Consejo. Referencia: DOUE-L-2016-80531
- Reglamento (CE) nº 1272/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 16 de diciembre de 2008, sobre clasificación, etiquetado y envasado de sustancia y mezclas, y por el que se modifican y derogan las Directivas 67/548/CEE y 1999/45/CE y se modifica el Reglamento (CE) nº 1907/2006. Referencia: DOUE-L-2008-82637.
- Directiva 2012/18/UE del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativa al control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas y por la que se modifica y ulteriormente deroga la Directiva 96/82/CE. Referencia: DOUE-L-81319.
- Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, por el que se establecen disposiciones mínimas de seguridad y de salud en las obras de construcción. Referencia: BOE-A-1997-22614.
- Real Decreto 773/1997, de 30 de mayo, sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas a la utilización por los trabajadores de equipos de protección individual. Referencia: BOE-A-1997-12735.
- Real Decreto 314/2006, de 17 de marzo, por el que se aprueba el Código Técnico de la Edificación. Referencia: BOE A-2006-5515
- Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales. Referencia: BOE-A-1995-24292.

- Real Decreto 393/2007, de 23 de marzo, por el que se aprueba la Norma Básica de Autoprotección de los centros, establecimientos y dependencias dedicados a actividades que pueden dar origen a situaciones de emergencia. Referencia: BOE-A-2007-6237
- Reglamento (UE) n° 649/2012 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativo a la exportación de productos químicos peligrosos. (PIC) Referencia: DOUE-L-2012-81341.

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

- Normas UNE
- Normas DIN
- Normas ISO
- Normativa TEMA
- Norma NFPA 704
- Estándar ISA-5.1-1984
- Estándar API RP 520
- Código ASME *Boiler and Pressure Vessel Code* (BPV)
- Guías GAP 2.5.2, para el Espaciado y *Layout* de Plantas Químicas y de Petróleo

### 13. Bibliografía

1. **COMITÉ TÉCNICO AEN/CTN 157.** *Criterios generales para la elaboración formal de los documentos que constituyen un proyecto técnico.* Madrid : ASOCIACIÓN ESPAÑOLA DE NORMALIZACIÓN Y CERTIFICACIÓN (AENOR) , 2014. UNE 15701.

2. **KNOWLEDGE SOURCING INTELLIGENCE.** Knowledge Sourcing Intelligence. [En línea] Junio de 2023. [Citado el: 13 de Febrero de 2024.] <https://www.knowledge-sourcing.com/report/acetic-anhydride-market>.

3. **KIRK, R. E. y OTHMER, D. F.** *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology.* 4ª ed. New York : John Wiley & sons, 1991. Vol. 1. ISBN 0-471-52669-X.

4. **NEXANTECA.** NexantECA. [En línea] Junio de 2004. [Citado el: 19 de Febrero de 2024.] <https://www.nexanteca.com/reports/acetic-anhydridecellulose-acetate-2004-program>.

5. **GERHARTZ, W. y ULLMANN, F.** *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry.* 5ª ed. Deerfield Beach : Advisory Board, 1985. Vol. A1. ISBN 0-89573-151-7.

6. **AGREDA, V. H.** *Acetic Acid and Its Derivatives.* 1ª ed. Boca Ratón : CRC Press, 1992. pág. 468. Vol. 49. ISBN 9780824787929.

7. *Eastman Chemical Company Acetic Anhydride Process*. **ZOELLER, J. R., y otros.** 1, Amsterdam : Elsevier Science Publishers B.V., 1992, *Catalysis Today*, Vol. 13. ISSN 09205861.
8. **CHELLAMMAI, K.** SCRIBD. *PDE Report*. [En línea] [Citado el: 13 de Junio de 2024.] <https://es.scribd.com/document/446376692/PDE-REPORT>.
9. **GERHARTZ, W. y ULLMANN, F.** *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 5ª ed. Deerfield Beach : Advisory Board, 1985. Vol. A1. ISBN 0-89573-151-7.
10. **BE ATEX.** Gas Guide: Methyl acetate. [En línea] [Citado el: 20 de Mayo de 2024.] <https://www.be-atex.com/en/gas-guide/methyl-acetate>.
11. **NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE.** PubChem: Methyl acetate (Compound). [En línea] [Citado el: 20 de Mayo de 2024.] <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/6584>.
12. **INTERNATIONAL LABOUR ORGANIZATION.** Fichas Internacionales de Seguridad Química (ICSCs). *Acetato de metilo*. [En línea] Abril de 2014. [Citado el: 9 de Junio de 2024.] [https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p\\_card\\_id=0507&p\\_version=2&p\\_language=es](https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=0507&p_version=2&p_language=es).
13. **PLAINSUR.** Ficha de datos de seguridad de 'ACETATO DE METILO'. [En línea] [Citado el: 1 de Junio de 2024.] [https://www.mercapinturas.es/fichas\\_seguridad/disolventes-diluyentes/ACETATO-DE-METILO-MERCAPINTURAS-FDS.pdf](https://www.mercapinturas.es/fichas_seguridad/disolventes-diluyentes/ACETATO-DE-METILO-MERCAPINTURAS-FDS.pdf).
14. **NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE.** PubChem: Carbon Monoxide (Compound). [En línea] [Citado el: 20 de Mayo de 2024.] <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/281>.
15. **PULIDINDI, K.** Global Market Insights. [En línea] 2023. [Citado el: 10 de Febrero de 2024.] <https://www.gminsights.com/industry-analysis/acetic-anhydride-market>.
16. **CHEMANALYST.** CHEMANALYST. [En línea] Agosto de 2023. [Citado el: 13 de Febrero de 2024.] <https://www.chemanalyst.com/industry-report/acetic-anhydride-market-757>.
17. **STATISTA.** Statista. *Tasa de crecimiento anual compuesto (CAGR) de la industria química mundial entre 2015 y 2018, por región*. [En línea] [Citado el: 24 de Febrero de 2024.] <https://es.statista.com/estadisticas/599457/tasa-de-crecimiento-anual-compuesto-de-la-industria-quimica/>.

18. **VERIFIED MARKET RESEARCH.** Verified Market Research. [En línea] Mayo de 2023. [Citado el: 11 de Febrero de 2024.] <https://www.verifiedmarketresearch.com/product/acetic-anhydride-market/>.

19. **IMARCGROUP.** Acetic Anhydride Pricing Report 2024: Price Trend, Chart, Market Analysis, News, Demand, Historical and Forecast Data. [En línea] 2024. [Citado el: 20 de Mayo de 2024.] <https://www.imarcgroup.com/acetic-anhydride-pricing-report>.

20. **MORDOR INTELLIGENCE™ INDUSTRY REPORTS.** Mordor Intelligence. [En línea] 2023. [Citado el: 11 de Febrero de 2024.] <https://www.mordorintelligence.com/es/industry-reports/acetic-anhydride-market>.

21. **POLARIS MARKET RESEARCH.** Polaris Market Research. [En línea] Junio de 2022. [Citado el: 13 de Febrero de 2024.] <https://www.polarismarketresearch.com/industry-analysis/cellulose-acetate-market#:~:text=Report%20Outlook,industries%20as%20it%20is%20biodegradable..>

22. **CHITRANSHI, J.** Market Research Future. [En línea] Febrero de 2024. [Citado el: 10 de Febrero de 2024.] <https://www.marketresearchfuture.com/reports/acetic-anhydride-market-5674>.

23. **OBSERVATORIO DE COMPLEJIDAD ECONÓMICA.** Observatorio de Complejidad Económica. [En línea] 2022. [Citado el: 13 de Febrero de 2024.] <https://oec.world/es/profile/hs/acetic-anhydride?redirect=true&cumulativeMarketShareSelected=value>.

24. **CHEMANALYST.** Acetic Anhydride Price Trend and Forecast. [En línea] 2022. [Citado el: 21 de Mayo de 2024.] <https://www.chemanalyst.com/Pricing-data/acetic-anhydride-1157#:~:text=European%20Acetic%20Anhydride%20market%20stayed,brought%20about%20such%20cost%20pattern>.

25. **BUSINESS ANALYTIQ.** Acetic Anhydride price index. [En línea] 2024. [Citado el: 21 de Mayo de 2024.] <https://businessanalytiq.com/procurementanalytics/index/acetic-anhydride-price-index/>.

26. **INDEXBOX.** Acetic Anhydride Price in Spain - 2023 . [En línea] 2023. [Citado el: 21 de Mayo de 2024.] <https://www.indexbox.io/search/acetic-anhydride-price-spain/>.

27. —. Acetic Anhydride Price in Spain Increases 2% to \$1,013 per Ton . [En línea] 17 de Junio de 2023. [Citado el: 21 de Mayo de 2024.] <https://www.indexbox.io/blog/spain-acetic-anhydride-price-in-march-2023/>.

28. **PRISMANE CONSULTING.** Acetic Anhydride Market Analysis By Demand, By Region, By Applications and Forecast Report Till 2032. [En línea] [Citado el: 21 de Mayo de 2024.] <https://prismaneconsulting.com/report-details/acetic-anhydride-market-analysis-and-forecast-report-2032>.

29. **MIDDLE EAST BUSINESS INTELLIGENCE (MEED).** Sipchem licenses Eastman technology. [En línea] 7 de Agosto de 2024. [Citado el: 20 de Mayo de 2024.] <https://www.meed.com/sipchem-licenses-eastman-technology/>.

30. **MARKET RESEARCH.** Global Acetic Anhydride Market Analysis: Plant Capacity, Production, Operating Efficiency, Demand & Supply, End-User Industries, Sales Channel, Regional Demand, Company. [En línea] 2024. [Citado el: 21 de Mayo de 2024.] <https://www.marketresearch.com/ChemAnalyst-v4204/Global-Acetic-Anhydride-Plant-Capacity-35294987/>.

31. **EXPERT MARKET RESEARCH.** Expert Market Research. [En línea] [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://www.expertmarketresearch.com/reports/methyl-acetate-market>.

32. **IMARC GROUP.** Imarc Methyl Acetate Market. [En línea] [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://www.imarcgroup.com/methyl-acetate-market>.

33. **ACUMEN RESEARCH AND CONSULTING.** Acumen Research and Consulting. [En línea] Marzo de 2023. [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://www.acumenresearchandconsulting.com/methyl-acetate-market>.

34. **VALUE MARKET RESEARCH.** Value Market Research. [En línea] Noviembre de 2023. [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://www.valuemarketresearch.com/report/methyl-acetate-market>.

35. **METOREE.** Metoree. *Search manufacturers and Suppliers.* [En línea] [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://us.metoree.com/categories/6758/>.

36. **ANHUI WANWAI GROUP CO., LTD.** Anhui Wanwei Group Co., Ltd. [En línea] [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://www.wwgf.com.cn/en/ChemicalProducts/info.aspx?itemid=12256>.

37. **QINGDAO SINCERE CHEMICAL CO., LTD.** Made in China. [En línea] [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] [https://es.made-in-china.com/co\\_sincerechemical01/product\\_Factory-Direct-Methyl-Acetate-Best-Price-High-Quality-CAS-79-20-9\\_ysossoury.html](https://es.made-in-china.com/co_sincerechemical01/product_Factory-Direct-Methyl-Acetate-Best-Price-High-Quality-CAS-79-20-9_ysossoury.html).

38. **HENAN BRILLIANT BIOTECH CO., LTD.** Made in China. [En línea] [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] [https://es.made-in-china.com/co\\_brilliantchemi/product\\_CAS-No-79-20-9-Dum-Packing-Acetic-Acid-Methyl-Ester-Purity-99-95-Methyl-Acetate\\_uoesnrehsy.html](https://es.made-in-china.com/co_brilliantchemi/product_CAS-No-79-20-9-Dum-Packing-Acetic-Acid-Methyl-Ester-Purity-99-95-Methyl-Acetate_uoesnrehsy.html).

39. **HARMSSEN, J. y VERKERK, M.** *Process Intensification: Breakthrough in Design, Industrial Innovation Practices, and Education*. Berlín, Boston : De Gruyter, 2020. ISBN 978-3110657340.

40. **ECHEMI.** Echemi.com. [En línea] [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] [https://www.echemi.com/productsInformation/pid\\_Rock15083-methylacetate.html](https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Rock15083-methylacetate.html).

41. **Shandong Mingyuan Chemical Co., Ltd.** Echemi.com. [En línea] [Citado el: 5 de Junio de 2024.] <https://www.echemi.com/produce/pr2311081493-methyl-ortho-acetate-cas-no79-20-9-999-purity-industrial-grade-mingyuan.html>.

42. **FORTUNE BUSINESS INSIGHTS.** Fortune Business Insights. [En línea] Julio de 2023. [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://www.fortunebusinessinsights.com/carbon-monoxide-market-105343>.

43. **ALLIED MARKET RESEARCH.** PR Newswire. [En línea] 24 de Enero de 2024. [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://www.prnewswire.com/news-releases/carbon-monoxide-market-to-reach-8-2-billion-globally-by-2032-at-4-1-cagr-allied-market-research-302043143.html>.

44. **CARBUROS METÁLICOS GRUPO AIR PRODUCTS.** Carbueros metálicos. [En línea] 3 de Octubre de 2022. [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://www.carbueros.com/company/news-center/2022/03/0310-carbueros-metalicos-abrira-la-primera-hidrogena-publica-de-tarragona>.

45. *The economic outlook for converting CO<sub>2</sub> and electrons to molecules.* **HUANG, Z., y otros.** 7, 2021, Energy and Environmental Science, Vol. 14. ISSN 17545706.

46. **ENCICLOPÈDIA.CAT.** Enciclopèdia.cat. [En línea] [Citado el: 4 de Marzo de 2024.] <https://www.enciclopedia.cat/gran-enciclopedia-catalana/el-tarragones>.

47. **GENERALITAT DE CATALUNYA.** gencat. sipae. [En línea] 7 de Febrero de 2023. [Citado el: 5 de Marzo de 2024.] [https://empresa.gencat.cat/ca/treb\\_ambits\\_actuacio/industria/inversio-industrial/sipae/sipae/](https://empresa.gencat.cat/ca/treb_ambits_actuacio/industria/inversio-industrial/sipae/sipae/).

48. **GOOGLE EARTH.** Polígono industrial de El Morell. [En línea] [Citado el: 13 de Marzo de 2024.] <https://earth.google.com/web/search/EL+MORELL/@41.19766373,1.224781,79.61812082a,17>

09.2392962d,35y,77.72226856h,60.00007077t,360r/data=CigiJgokCRZuIQvz00RAEUcF3o-  
\_ukRAGd13MjwDyQVAIZYSPaUrZQFAOgMKATA.

49. **FRANKLIN CONSULTORES INMOBILIARIOS.** Franklin Consultores Inmobiliarios. [En línea] [Citado el: 5 de Marzo de 2024.] <https://franklin.cat/en-venta/solar-en-el-morell-de-102129m2/>.

50. **EASTMAN CHEMICAL COMPANY.** Eastman. [En línea] 2014. [Citado el: 13 de Marzo de 2024.] [https://www.eastman.com/Literature\\_Center/T/TT24.pdf](https://www.eastman.com/Literature_Center/T/TT24.pdf).

51. **WACKER.** Wacker. [En línea] [Citado el: 13 de Marzo de 2024.] <https://www.wacker.com/h/en-es/solvents/methyl-acetate-metac-995/p/000000210>.

52. **CELANESE ACETYL INTERMEDIATES.** *Product Description and Handling Guide Methyl Acetate.* 2011.

53. **CARBUROS METÁLICOS GRUPO AIR PRODUCTS.** Carburos metálicos. [En línea] [Citado el: 6 de Marzo de 2024.] <https://www.carburos.com/applications/carbonylation>.

54. **GOOGLE MAPS.** Carburos metálicos SA. [En línea] [Citado el: 2024 de Marzo de 2024.] <https://www.google.es/maps/search/carburos+met%C3%A1licos+SA/@41.2915497,-4.1793083,6z?entry=ttu>.

55. **CARBUROS METÁLICOS GRUPO AIR PRODUCTS.** Carburos Metálicos Grupo Air Products. [En línea] 2024. [Citado el: 13 de Marzo de 2024.] <https://shop.airproducts.com/emea/es/es-ES/products/62242/?b=gas&c=hydrogen>.

56. —. Carburos Metálicos Grupo Air Products. [En línea] 2022. [Citado el: 13 de Marzo de 2024.] <https://www.carburos.com/gases/hydrogen>.

57. **SIGMA-ALDRICH.** Merck. *Di- $\mu$ -chloro-tetracarbonyldirhodium(I)*. [En línea] [Citado el: 8 de Junio de 2024.] <https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/product/aldrich/209031>.

58. **ALFA CHEMICAL.** Catalizadores metálicos. *Cloruro de carbonilo de rodio* Número CAS: 14523-22-9. [En línea] [Citado el: 8 de Junio de 2024.] <https://www.alfachemsp.com/metal-catalysts/rhodium-carbonyl-chloride-cas-no-14523-22-9.html>.

59. **BLDPHARM.** BLDpharm. *Di- $\mu$ -chloro-tetracarbonyldirhodium(I)*, 98%. [En línea] [Citado el: 30 de Mayo de 2024.] <https://www.bldpharm.com/products/14523-22-9.html>.

60. **ALTICHEM.** Altichem. [En línea] [Citado el: 16 de Marzo de 2024.] <https://www.altichem.es/produit/73/29/proveedor-compra-ioduro-de-litio-lii>.

61. **SIGMA-ALDRICH**. Merck. *Lithium iodide*. [En línea] [Citado el: 16 de Marzo de 2024.] <https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/product/aldrich/450952>.

62. **ALTICHEM**. Yoduro de metilo. [En línea] [Citado el: 20 de Junio de 2024.] <https://www.altichem.es/produit/73/153/proveedor-compra-yoduro-de-metilo-ch3i>.

63. **SIGMA-ALDRICH**. Iodomethane. [En línea] [Citado el: 20 de Junio de 2024.] [https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/product/sial/67692?utm\\_source=google&utm\\_medium=pc&utm\\_campaign=20849242482&utm\\_content=160363527047&gclid=Cj0KCQjwhtWvBhD9ARIsAOP0GojO-yUsBaykIw6wEocRGosqmVom3FDLu19s9Mi4V4AVbVHyvfCS6q4aAmMzEALw\\_wcB#product-documentati](https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/product/sial/67692?utm_source=google&utm_medium=pc&utm_campaign=20849242482&utm_content=160363527047&gclid=Cj0KCQjwhtWvBhD9ARIsAOP0GojO-yUsBaykIw6wEocRGosqmVom3FDLu19s9Mi4V4AVbVHyvfCS6q4aAmMzEALw_wcB#product-documentati).

64. **EMPRESITE ELECONOMISTA**. Empresite elEconomista. [En línea] [Citado el: 13 de Marzo de 2024.] <https://empresite.eleconomista.es/Actividad/ACIDO-ACETICO/>.

65. **BARCELONESA**. Barcelonesa. [En línea] [Citado el: 13 de Marzo de 2024.] <https://www.barcelonesa.com/es/logistica-distribucion/>.

66. **EMPRESITE**. Empresite. [En línea] [Citado el: 28 de Febrero de 2024.] <https://empresite.eleconomista.es/Actividad/ACETATO-DE-CELULOSA/>.

67. **FARMAINDUSTRIA**. Farmaindustria. [En línea] 14 de Septiembre de 2022. [Citado el: 27 de Febrero de 2024.] <https://www.farmaindustria.es/web/prensa/notas-de-prensa/2022/09/14/la-industria-farmaceutica-supera-ya-las-100-plantas-de-produccion-de-medicamentos-de-uso-humano-en-espana/>.

68. —. Farmaindustria: Memoria 2022. [En línea] 7 de Julio de 2023. [Citado el: 27 de Febrero de 2024.] <https://www.farmaindustria.es/web/documentos/memorias/>.

69. **GOOGLE MAPS**. Plantas de producción de productos farmacéuticos en España. [En línea] [Citado el: 13 de Marzo de 2024.] <https://www.google.com/maps/d/u/0/viewer?hl=es&ll=40.19322952887476%2C-2.0023915421049043&z=6&mid=1z9qD2yVDK4erfoaX60R9Ocb7c5I>.

70. **INSTITUTO DE ESTADÍSTICA DE CATALUÑA**. Idescat. [En línea] [Citado el: 28 de Marzo de 2024.] <https://www.idescat.cat/?lang=es>.

71. **UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI**. Universitat Rovira i Virgili. [En línea] [Citado el: 29 de Febrero de 2024.] <https://www.cursosformacionprofesional.com/centros/fp-tarragona-2700>.

72. **FORMACIÓN OFICIAL ABIERTA.** Fponline. [En línea] [Citado el: 1 de Marzo de 2024.] <https://www.cursosformacionprofesional.com/centros/fp-tarragona-2700>.

73. **MINISTERIO DE TRANSPORTES Y MOVILIDAD SOSTENIBLE.** Ministerio de Transportes y Movilidad Sostenible. [En línea] 2024. [Citado el: 3 de Marzo de 2024.] <https://www.transportes.gob.es/carreteras/usuarios/mapa-oficial-de-carreteras>.

74. **MIRANO RUIZ, F. J.** Tráfico en los puertos españoles en 2021. *Transporte XXI*. Edición especial 2022, 2022.

75. **PORT TARRAGONA.** *Memoria Anual 2022*. Tarragona : Port Tarragona, 2022.

76. **ADIF.** *Declaración sobre la red*. 2019.

77. **PORT TARRAGONA.** Port Tarragona. [En línea] [Citado el: 3 de Marzo de 2024.] <https://www.porttarragona.cat/es/servicio-negocio/negocio/intermodalidad#mas-conectados-con-europa>.

78. **OBSERVATORIO DEL TRANSPORTE Y LOGÍSTICA EN ESPAÑA (OTLE).** Transporte de mercancías en aeropuertos españoles (kilogramos) por tipo de tráfico y aeropuerto. [En línea] [Citado el: 15 de Mayo de 2024.] <https://apps.fomento.gob.es/BDOTLE/visorBDpop.aspx?i=479>.

79. **LOGISBER.** Logisber. [En línea] [Citado el: 2 de Marzo de 2024.] <https://logisber.com/transitario-aereo-en-barcelona>.

80. **COCA, M. T.** El transporte de mercancías, una asignatura pendiente para el Aeropuerto del Prat. *El Nacional*. 21 de Febrero de 2024.

81. **HORIZONTE EUROPA.** Horizonte Europa. [En línea] [Citado el: 7 de Marzo de 2024.] <https://www.horizonteeuropa.es/que-es>.

82. **GENERALITAT DE CATALUNYA.** Gencat. [En línea] 2 de 3 de 2023. [Citado el: 7 de Marzo de 2024.] [https://empresa.gencat.cat/ca/treb\\_ambits\\_actuacio/industria/inversio-industrial/financament-per-a-empreses-industrials-i-serveis-relacionats/index.html#googtrans\(ca|es\)](https://empresa.gencat.cat/ca/treb_ambits_actuacio/industria/inversio-industrial/financament-per-a-empreses-industrials-i-serveis-relacionats/index.html#googtrans(ca|es)).

83. —. Gencat. *Sequía*. [En línea] [Citado el: 13 de Marzo de 2024.] <https://web.gencat.cat/es/temes/mediambient/sequera/index.html>.

84. **WEATHER SPARK.** Weather Spark. [En línea] [Citado el: 3 de Marzo de 2024.] <https://es.weatherspark.com/y/45958/Clima-promedio-en-Tarragona-Espa%C3%B1a-durante-todo-el-a%C3%B1o>.

85. **INSTITUTO GEOGRÁFICO NACIONAL.** IGN. *Centro Nacional de Información Geográfica.* [En línea] [Citado el: 3 de Marzo de 2024.] <https://www.ign.es/web/mapas-sismicidad>.

86. **MAPCARTA.** Mapcarta. *Parc Químic de Seguret.* [En línea] [Citado el: 20 de Junio de 2024.] <https://mapcarta.com/es/W137399263>.

87. **DOCTORALIA.** Doctoralia. *Medicina de urgencias, Tarragona.* [En línea] [Citado el: 20 de Junio de 2024.] [https://www.doctoralia.es/buscar?q=Medicina%20De%20Urgencias&loc=Tarragona%2C%20Tarragona&filters%5Bspecializations%5D%5B%5D=30&filters%5Bentity\\_type%5D%5B%5D=facility](https://www.doctoralia.es/buscar?q=Medicina%20De%20Urgencias&loc=Tarragona%2C%20Tarragona&filters%5Bspecializations%5D%5B%5D=30&filters%5Bentity_type%5D%5B%5D=facility).

88. **METOREE.** 4 Fabricantes de Anhídrido Acético en 2024. [En línea] 2024. [Citado el: 20 de Junio de 2024.] <https://es.metoree.com/categories/6667/>.

89. **RIISAGER, A. y FEHRMANN, R.** *Proceso de carbonilación continua por catálisis iónica soportada en fase líquida.* 2 332 816 Europa, 12 de Febrero de 2010.

90. **ALIMARKET.** Repsol arranca una nueva columna de destilación en Tarragona. [En línea] 24 de Febrero de 2017. [Citado el: 24 de Junio de 2024.] <https://www.alimarket.es/envase/noticia/234986/repsol-arranca-una-nueva-columna-de-destilacion-en-tarragona>.

91. **Boletín Oficial del Estado.** *Real Decreto 840/2015, de 21 de septiembre, por el que se aprueban medidas de control de los riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas.* Ministerio de la Presidencia. 2015. Referencia: BOE-A-2015-11268.

92. **AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS.** *DOW'S FIRE & EXPLOSION INDEX HAZARD CLASSIFICATION GUIDE.* New York : s.n., 1994. AIChE technical manual. ISBN 0-8169-0623-8.

93. **CRAMER, R., MCCLEVERTY, J. A. y BRAY, J.** *Inorganic Syntheses.* Wilmington : McGraw-Hill, 1974. Vol. 15. ISBN 0-07-048521-6.

94. **NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE.** PubChem: Iodomethane (Compound). [En línea] [Citado el: 8 de Junio de 2024.] <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/6328>.

95. **SIGMA-ALDRICH.** Merck. *Iodomethane.* [En línea] [Citado el: 8 de Junio de 2028.] <https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/product/sial/67692>.

96. **NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY (NIST).** Methane, iodo-. [En línea] [Citado el: 8 de Junio de 2024.] <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C74884&Mask=FFF>.
97. **TESTBOOK EDU SOLUTIONS PVT. LTD.** Testbook. *Lithium Iodide Formula: Explained With Structure, Properties and Uses*. [En línea] 10 de Agosto de 2023. [Citado el: 8 de Junio de 2024.] <https://testbook.com/chemistry-formulas/lithium-iodide-formula>.
98. **YUJIANG CHEMICAL (SHANDONG) CO., LTD.** Made in China. [En línea] [Citado el: 25 de Mayo de 2024.] <https://yujianghuagong.en.made-in-china.com/product/dngURoeAYCVE/China-Factory-Best-Price-Lil-Lithium-Iodide-Anhydrous-99-9-CAS-10377-51-2.html>.
99. **DC Fine Chemicals.** DC Fine Chemicals. *Acetic Acid*. [En línea] 14 de Mayo de 2022. [Citado el: 8 de Junio de 2024.] <https://www.dcfinechemicals.com/en/blog/acetic-acid/>.
100. **CHEMANALYST.** Acetic Acid Price Trend and Forecast. [En línea] 2024. [Citado el: 25 de Mayo de 2024.] <https://www.chemanalyst.com/Pricing-data/acetic-acid-9>.
101. **NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE.** PubChem: Acetic Acid (Compound). [En línea] [Citado el: 8 de Junio de 2024.] <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acetic-Acid>.
102. **RODRÍGUEZ, H.** National Geographic España. *Propiedades del hidrógeno (H)*. [En línea] 15 de Enero de 2024. [Citado el: 9 de Junio de 2024.] [https://www.nationalgeographic.com.es/ciencia/propiedades-hidrogeno-h\\_18653](https://www.nationalgeographic.com.es/ciencia/propiedades-hidrogeno-h_18653).
103. **CNH2.** Centro Nacional del Hidrógeno . *¿Qué es el hidrógeno?* [En línea] [Citado el: 9 de Junio de 2024.] <https://www.cnh2.es/el-hidrogeno/>.
104. **CARBUROS METÁLICOS GRUPO AIR PRODUCTS.** Carburos Metálicos. [En línea] [Citado el: 14 de Junio de 2024.] <https://www.carburos.com/supply-modes/gen-gas-on-site>.
105. **FERNÁNDEZ CAMACHO, E. y OLLERO DE CASTRO, P.** *Control e instrumentación de procesos químicos*. s.l. : Sintesis, Editorial S.A., 2006. ISBN 978-84-7738-517-2.
106. **SVRCEK, W. Y., MAHONEY, D. P. y YOUNG, B. R.** *A Real-Time Approach to Process Control*. 3ª ed. Chichester : John Wiley & Sons Ltd, 2014. ISBN 978-1-119-99387-2.

107. **THE INSTRUMENTATION, SYSTEMS AND AUTOMATION SOCIETY (ISA)**. *ISA-5.1-1984 (R1992), Instrumentation Symbols and Identification*. North Carolina : s.n., 1992. ISBN 0-87664-844-8.

108. **SINNOTT, R. K. y TOWLER, G.** *Diseño en Ingeniería Química*. 5ª ed. Barcelona : Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.

109. **STORCH DE GRACIA, J. M. y GARCÍA MARTÍN, T.** *Seguridad Industrial en Plantas Químicas y Energéticas*. 2ª ed. España : Díaz de Santos, 2008. ISBN 978-84-7978-864-3.

110. **MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO**. [En línea] [Citado el: 6 de Abril de 2024.] <https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/productos-quimicos/reglamento-clp.html#texto-del-reglamento-clp>.

111. **EUROPEAN CHEMICALS AGENCY (ECHA)**. [En línea] [Citado el: 6 de Abril de 2024.] <https://echa.europa.eu/es/legislation>.

112. **ASOCIACIÓN NACIONAL DE PROTECCIÓN CONTRA INCENDIOS (NFPA)**. NFPA. [En línea] 2024. [Citado el: 7 de Abril de 2024.] <https://www.nfpa.org/es>.

113. **VIVE CONTROLA EL RIESGO**. Vive controla el riesgo. [En línea] 2024. [Citado el: 6 de Junio de 2024.] <https://www.vivecer.com.mx/noticias/que-es-el-rombo-de-seguridad-o-rombo-nfpa-704>.

114. **CALVET MÁRQUEZ, S.** Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo (INSST). *Reacciones químicas exotérmicas (I)*. [En línea] 1999. [Citado el: 11 de Mayo de 2024.] [https://www.insst.es/documents/94886/326853/ntp\\_527.pdf/4d32ceae-c81f-44c2-97c0-a7a6c736ddbc?version=1.0&t=1614698532952](https://www.insst.es/documents/94886/326853/ntp_527.pdf/4d32ceae-c81f-44c2-97c0-a7a6c736ddbc?version=1.0&t=1614698532952).

115. **CCPS**. Center for Chemical Process Safety. *Chemical Reactivity Worksheet*. [En línea] 12 de Julio de 2019. [Citado el: 11 de Mayo de 2024.] <https://www.aiche.org/ccps/resources/chemical-reactivity-worksheet>.

116. *GAP 2.5.2 Oil and Chemical Plant Layout and Spacing*. **GLOBAL ASSET PROTECTION SERVICES LLC**. 2015, GAPS Guidelines.

117. **CROWL, D. A. y LOUVAR, J. F.** *Chemical Process Safety Fundamentals with Applications*. 2ª ed. New Jersey : Prentice Hall, Inc, 2002. ISBN 0-13-018176-5.

---

# ANEXO I:

## Balances de materia y energía

---

## Índice

1.	Balances de materia.....	1
1.1.	Balance de materia global.....	1
1.2.	Balances de materia por equipos .....	4
1.2.1.	Tanque de mezcla TM-101 .....	4
1.2.2.	Reactor R-101.....	4
1.2.3.	Separador flash V-201 .....	6
1.2.4.	Torre de destilación T-201 .....	7
1.2.5.	Torre de destilación T-202.....	7
1.2.6.	Recirculaciones y uniones de corrientes.....	8
2.	Balances de energía .....	9
2.1.	Bombas .....	10
2.2.	Tanque de mezcla TM-101 .....	12
2.3.	Intercambiador de calor E-101 y E-102.....	12
2.4.	Unión de las corrientes 8 y 12 .....	13
2.5.	Reactor R-101 .....	13
2.6.	Compresor C-101.....	13
2.7.	Válvula VLV-201 .....	15
2.8.	Evaporador parcial E-201 .....	16
2.9.	Válvula VLV-202 y VLV-203 .....	17
2.10.	Condensador E-202 .....	17
2.11.	Columna de destilación T-201 .....	18
2.12.	Columna de destilación T-202 .....	19
2.13.	Intercambiador de calor E-207 y E-208.....	19
3.	Bibliografía.....	20

## 1. Balances de materia

Los balances de materia son en lo que se fundamenta el diseño de procesos, ya que estos se utilizan para determinar las cantidades de materias primas necesarias para producir el producto deseado. Asimismo, los balances individuales a los distintos equipos del proceso son necesarios para determinar los caudales y las composiciones de todas las corrientes del sistema, lo que permite llevar a cabo el diseño y dimensionamiento de esas unidades. (1)

Los balances de materia se basan en el Principio de Conservación de la Materia, que establece que en un sistema la masa no se crea ni se destruye, solo se transforma. Por tanto, el balance de materia en el proceso y en los equipos se basa en la *Ecuación 1*.

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

El proceso opera en estado estacionario, por lo que no hay acumulación, y se puede eliminar el término de la ecuación. Además, en la mayor parte de las unidades no ocurre una reacción química, de modo que la generación también puede ser suprimida de la ecuación. Finalmente, se obtiene que para el balance de materia de la mayoría de los equipos de la planta se utiliza la *Ecuación 2*.

$$\text{Entrada} = \text{Salida} \quad [2]$$

El reactor es el único equipo del proceso en el que hay una reacción química, lo que implica que el término de la generación no puede ser anulado. En este caso, se utiliza la *Ecuación 3*, ya que hay reactivos que se están transformando en productos.

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

En el apartado siguiente se llevará a cabo el balance de materia global del sistema, teniendo en cuenta las distintas entradas y salidas del proceso. Posteriormente, se realizarán los balances de materia para los distintos equipos del proceso. En ambos casos se pretende demostrar que se cumple el Principio de Conservación de la Materia. Cabe señalar que no se procederá con el balance de materia de aquellas unidades donde no haya cambios en los caudales y composiciones de los compuestos, es decir, en las bombas, compresores, válvulas e intercambiadores de calor.

### 1.1. Balance de materia global

Para llevar a cabo el balance de materia global se han de conocer las corrientes de entrada y de salida al sistema y se debe cumplir que el flujo másico de las corrientes de entrada al proceso sea igual al de las corrientes de salida. En la Tabla 1 se indican estas corrientes.

Tabla 1. Corrientes de entrada y a salida al proceso

	Corriente	Descripción
<b>Entradas</b>	Corriente 1	Entrada de acetato de metilo
	Corriente 2	Entrada de ácido acético
	Corriente 8	Entrada de monóxido de carbono
<b>Salida</b>	Corriente 28	Salida de anhídrido acético

El metil acetato entra al sistema con una composición del 99,9 % en peso, mientras que el 0,1% restante es ácido acético. Por otro lado, el ácido acético y el monóxido de carbono se adquieren con una pureza del 99,99 % en peso. Por tanto, se desestimarán las impurezas que puedan traer al sistema y se considerará que en sus respectivas corrientes están puros.

Se pretende producir 100.000 t/año de anhídrido acético al 99,7 % en peso y, sabiendo que la planta opera 330 días al año, se puede determinar la cantidad de materias primas que se necesita para alcanzar dicha producción. Por consiguiente, se determina el flujo másico en kilogramos hora de la corriente 28 de la siguiente manera.

$$1 \cdot 10^8 \frac{\text{kg } (Ac)_2O}{\text{año}} \cdot \frac{1 \text{ año}}{330 \text{ días}} \cdot \frac{1 \text{ día}}{24 \text{ horas}} = 12626,26 \text{ kg producto} \rightarrow$$

$$\rightarrow 12626,26 \text{ kg producto} \cdot \frac{0,997 \text{ kg } (Ac)_2O}{1 \text{ kg producto}} = 12589,02 \text{ kg de } (Ac)_2O$$

Se comienza el balance de materia calculando la cantidad de reactivos necesarios mediante un balance a los componentes, Ecuaciones 4-6, para el acetato de metilo, el monóxido de carbono y el anhídrido, respectivamente. Este balance se realiza asumiendo que no hay recirculaciones ni purgas y se lleva a cabo en caudales molares, ya que se incluye el término de generación por la reacción. Asimismo, se utilizará la estequiometría de la reacción principal.



$$F_{e_{MeOAc}} - F_{e_{MeOAc}} \cdot x_{MeOAc} = F_{s_{MeOAc}} \quad [4]$$

$$F_{e_{CO}} - F_{e_{MeOAc}} \cdot x_{MeOAc} = F_{s_{CO}} \quad [5]$$

$$F_{e_{MeOAc}} \cdot x_{MeOAc} = F_{s_{(Ac)_2O}} \quad [6]$$

En estas ecuaciones  $F_e$  hace referencia al caudal molar de entrada (kmol/h) de las respectivas sustancias,  $F_s$  al caudal molar de salida (kmol/h) y  $x_{MeOAc}$  a la conversión con respecto al metil acetato.

La conversión escogida, 75 %, se indica en el Anexo II. Cálculos Justificativos de la Parte B: Reactor R-101 y se considera que los reactivos entran al sistema con una proporción 1:1,5 (molar), es decir, el monóxido de carbono entra en un 50% en exceso.

Posteriormente, en ese mismo anexo se indicarán las otras sustancias que están dentro del proceso, pero al ser parte del sistema catalítico y no reaccionar en el sistema, estarán

recirculándose continuamente. Por lo que no será necesario que sean añadidos al proceso, a menos que haya pérdidas. Esas sustancias serán el yoduro de litio, el hidrógeno, el yoduro de metilo, el ácido acético y el compuesto de rodio.

Posteriormente se lleva a cabo la recirculación de los reactivos no reaccionados. Esta recirculación se ha llevado a cabo mediante el simulador *Aspen HYSYS* ya que es necesario un proceso iterativo porque parte del anhídrido acético ha sido recirculado debido a la necesidad de recircular el catalizador en fase líquida (el  $\text{Rh}_2(\text{CO})_4\text{Cl}_2$  y el LiI) en el separador flash V-201, indicado en el *Plano N° 3. Diagrama de flujo del Documento II*. Tras la iteración final se llega a una producción final de la planta de 100.000,9 toneladas/año de  $\text{Ac}_2\text{O}$  al 99,7 %.

Por otro lado, como se comentó, la corriente 28 de anhídrido acético sale del sistema con un porcentaje de ácido acético. Por tanto, ese  $\text{AcOH}$  perdido debe ser introducido de nuevo al proceso.

Finalmente se muestran los valores obtenidos para los caudales másicos de las corrientes de entrada y salida en la Tabla 2. Asimismo, se indica la suma total de las corrientes de entrada para comprobar la *Ecuación 2*, corroborando así la igualdad con el flujo de salida.

Tabla 2. Balance de materia global en flujo másico

Corrientes	Entradas			Salidas
	C. 1	Flujo másico (kg/h)		Flujo másico (kg/h)
		C. 2	C. 8	C. 28
MeOAc	9135,05	-	-	-
AcOH	9,14	28,07	-	12589,16
$\text{Ac}_2\text{O}$	-	-	-	37,22
MeI	-	-	-	-
LiI	-	-	-	-
$\text{Rh}_2(\text{CO})_4\text{Cl}_2$	-	-	-	-
CO	-	-	3454,12	-
$\text{H}_2$	-	-	-	-
<b>Total</b>	9144,19	28,07	3454,12	12626,38
<b>Comprobación balance</b>		12626,38		12626,38

Por otro lado en la Tabla 3 se indica lo mismo en flujos molares.

Tabla 3. Balance de materia global en flujo molar

Corrientes	Entradas			Salidas
	C. 1	Flujo molar (kmol/h)		Flujo molar (kmol/h)
		C. 2	C. 8	C. 28
MeOAc	123,31	-	-	-
AcOH	0,16	0,47	-	0,62
$\text{Ac}_2\text{O}$	-	-	-	123,31
MeI	-	-	-	-
LiI	-	-	-	-
$\text{Rh}_2(\text{CO})_4\text{Cl}_2$	-	-	-	-
CO	-	-	123,31	-
$\text{H}_2$	-	-	-	-
<b>Total</b>	123,47	0,47	123,31	123,93

## 1.2. Balances de materia por equipos

### 1.2.1. Tanque de mezcla TM-101

Al tanque llegan las corrientes 4, 25, 26 y 27 que se corresponde con la alimentación de metil acetato y ácido acético y las recirculaciones, respectivamente.

En este equipo no hay generación, por tanto el balance de materia queda reflejado en la *Ecuación 7*. El balance de materia para cada uno de los componentes se refleja en la *Ecuación 8*. Siendo  $m$  el flujo másico en kg/h.

$$m_4 + m_{25} + m_{26} + m_{27} = m_5 \quad [7]$$

$$m_{4_i} + m_{25_i} + m_{26_i} + m_{27_i} = m_{5_i} \quad [8]$$

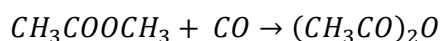
Finalmente, en la Tabla 4 se muestra el balance de materia y la comprobación de su cumplimiento.

Tabla 4. Balance de materia al tanque de mezcla TM-101

Corrientes	Entradas				Salida
	C. 4 (kg/h)	C. 25 (kg/h)	C. 26 (kg/h)	C. 27 (kg/h)	C. 5 (kg/h)
MeOAc	9135,05	70,55	2974,46	-	12180,06
AcOH	37,22	316,88	7,92	3023,23	3385,24
Ac <sub>2</sub> O	-	2480,59	-	919,66	3400,26
MeI	-	157,04	8677,85	-	8834,89
LiI	-	565,90	-	-	565,90
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	-	9,13	-	-	9,13
CO	-	-	-	-	-
H <sub>2</sub>	-	-	-	-	-
<b>Total</b>	9172,26	3600,10	11660,23	3942,89	28375,48
<b>Comprobación balance</b>	28375,48				28375,48

### 1.2.2. Reactor R-101

Como se comentó, el reactor se caracteriza por ser el lugar donde sucede la reacción química en el sistema. La reacción que se lleva a cabo es la siguiente.



La alimentación líquida al reactor, corriente 7, viene del tanque de mezcla TM-101 y, posteriormente, es acondicionada para llegar al reactor de burbujeo a las condiciones de operación. En cambio, la alimentación del gas, corriente 10, viene de la unión de la corriente 12, compuesta por monóxido e hidrógeno recirculado, y de la corriente 8, compuesta por el CO de entrada, y entra por la parte inferior al reactor.

Por otro lado, el reactor tiene dos corrientes de salida, la corriente líquida, corriente 13, y la corriente de gas, corriente 11. La primera de ellas sale por la parte inferior del reactor y la segunda por la parte superior.

La conversión del metil acetato a anhídrido acético es de un 75 % y la selectividad es del 100 %, es decir, no hay reacciones secundarias. Estos parámetros asociados a la reacción serán explicados con más detalle en el *Anexo II. Cálculos Justificativos* del reactor R-101.

Para llevar a cabo el balance de materia de los componentes en el reactor se ha de utilizar la *Ecuación 2*, para aquellos que no reaccionen, y la *Ecuación 3*, para aquellos que estén participando en la reacción química. Para el primer caso se trabajará con caudales másicos, *Ecuaciones 12-15*. En cambio, en el segundo caso, se debe trabajar con caudales molares, ya que interviene una reacción, y posteriormente obtener los caudales másicos con las respectivas masas molares, *Ecuaciones 9-11*. Las ecuaciones que definen el sistema son las siguientes.

$$F_{7\text{MeOAc}} - F_{7\text{MeOAc}} \cdot x_{\text{MeOAc}} = F_{13\text{MeOAc}} \quad [9]$$

$$F_{10\text{CO}} - F_{7\text{MeOAc}} \cdot x_{\text{MeOAc}} = F_{11\text{CO}} \quad [10]$$

$$F_{7(\text{Ac})_2\text{O}} + F_{7\text{MeOAc}} \cdot x_{\text{MeOAc}} = F_{13(\text{Ac})_2\text{O}} \quad [11]$$

$$m_{7\text{CH}_3\text{I}} = m_{13\text{CH}_3\text{I}} \quad [12]$$

$$m_{7\text{LiI}} = m_{13\text{LiI}} \quad [13]$$

$$m_{7\text{Rh}_2(\text{CO})_4\text{Cl}_2} = m_{13\text{Rh}_2(\text{CO})_4\text{Cl}_2} \quad [14]$$

$$m_{10\text{H}_2} = m_{11\text{H}_2} \quad [15]$$

Finalmente, se debe cumplir el balance de materia total al equipo, *Ecuación 16*.

$$m_7 + m_{10} = m_{11} + m_{13} \quad [16]$$

En la Tabla 5 se indican los flujos másicos de las corrientes de entrada y de salida del reactor y la comprobación del cumplimiento del balance de materia. Además en la Tabla 6 también se presenta los valores de los caudales pero en flujo molar.

Tabla 5. Balance de materia en flujo másico al reactor R-101

Corrientes	Entradas		Salidas	
	Flujo másico (kg/h)		Flujo másico (kg/h)	
	C. 7 (líquido)	C. 10 (gas)	C. 13 (líquido)	C. 11 (gas)
MeOAc	12180,06	-	3045,02	-
AcOH	3385,24	-	3385,24	-
Ac <sub>2</sub> O	3400,26	-	15989,42	-
MeI	8834,89	-	8834,89	-
LiI	565,90	-	565,90	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	9,13	-	9,13	-
CO	-	6908,23	-	3454,12
H <sub>2</sub>	-	26,17	-	26,17
<b>Total</b>	<b>28375,48</b>	<b>6934,40</b>	<b>31829,60</b>	<b>3480,28</b>
<b>Comprobación del balance</b>	<b>35309,88</b>		<b>35309,88</b>	

Tabla 6. Balance de materia en flujo molar del reactor R-101

	Entradas		Salidas	
	Flujo molar (kmol/h)		Flujo molar (kmol/h)	
Corrientes	C. 7 (líquido)	C. 10 (gas)	C. 13 (líquido)	C. 11 (gas)
MeOAc	164,42	-	41,10	-
AcOH	56,37	-	56,37	-
Ac <sub>2</sub> O	33,31	-	156,63	-
MeI	62,24	-	62,24	-
LiI	4,23	-	4,23	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	0,02	-	0,02	-
CO	-	246,63	-	123,31
H <sub>2</sub>	-	12,98	-	12,98
<b>Total</b>	<b>320,59</b>	<b>259,61</b>	<b>320,59</b>	<b>136,29</b>

### 1.2.3. Separador flash V-201

El separador tiene como objetivo separar la totalidad del Rh<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> y del LiI de la mezcla, para que puedan ser recirculados al reactor R-101. Según bibliografía, esto se consigue separando entre un 10 y un 20 % de la mezcla de entrada al separador. En este caso se ha separado un 11,19%.

En este equipo no hay generación, por tanto el balance de materia total al equipo queda reflejado en *Ecuación 17* y el balance de materia para cada componente en la *Ecuación 18*.

$$m_{15} = m_{16} + m_{17} \quad [17]$$

$$m_{15_i} = m_{16_i} + m_{17_i} \quad [18]$$

La operación en este equipo se ha determinado mediante la utilización del simulador *Aspen HYSYS*, donde se ha utilizado el paquete termodinámico *NRTL*. Los caudales másicos de cada una de las sustancias, así como el caudal total de cada corriente y la comprobación del balance de materia se presentan en la Tabla 7.

Tabla 7. Balance de materia al separador flash V-201

Corrientes	Entrada	Salidas	
	C. 15 (kg/h)	C. 16 (kg/h)	C. 17 (kg/h)
MeOAc	3045,02	70,55	2974,46
AcOH	3385,24	316,88	3068,38
Ac <sub>2</sub> O	15989,42	2480,59	13508,83
MeI	8834,89	157,04	8677,85
LiI	565,90	565,90	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	9,13	9,13	-
CO	-	-	-
H <sub>2</sub>	-	-	-
<b>Total</b>	<b>31829,60</b>	<b>3600,10</b>	<b>28229,50</b>
<b>Comprobación balance</b>	<b>31829,60</b>	<b>31829,60</b>	

#### 1.2.4. Torre de destilación T-201

La primera columna de destilación se utiliza para separar el metil acetato no reaccionado y el yoduro de metilo. Ambos compuestos se separan por la corriente 20 de destilado y se consiguen composiciones máxicas del 74% y del 26% para el MeI y el MeOAc, respectivamente. Por la corriente de colas, corriente 21, abandona el equipo prácticamente en su totalidad el ácido acético y el anhídrido acético.

En este equipo no hay generación, por tanto el balance de materia total al equipo queda reflejado en la *Ecuación 19*. El balance de materia para cada uno de los componentes se refleja en la *Ecuación 20*.

$$m_{19} = m_{20} + m_{21} \quad [19]$$

$$m_{19_i} = m_{20_i} + m_{21_i} \quad [20]$$

Se ha simulado esta torre utilizando el simulador *Aspen HYSYS*, utilizando el mismo paquete termodinámico mencionado anteriormente. En la Tabla 8 se muestran los caudales máxicos para cada una de las sustancias y la justificación del cumplimiento del balance de materia.

Tabla 8. Balance de materia a la torre de destilación T-201

Corrientes	Entrada	Salidas	
	C. 19 (kg/h)	C. 20 (kg/h)	C. 21 (kg/h)
MeOAc	2974,46	2974,46	$1,28 \cdot 10^{-5}$
AcOH	3068,36	7,92	3060,44
Ac <sub>2</sub> O	13508,83	$3,27 \cdot 10^{-3}$	13508,82
MeI	8677,85	8677,85	$7,63 \cdot 10^{-7}$
LiI	-	-	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	-	-	-
CO	-	-	-
H <sub>2</sub>	-	-	-
<b>Total</b>	28229,50	11660,23	16569,27
<b>Comprobación balance</b>	28229,50	28229,50	

#### 1.2.5. Torre de destilación T-202

El objetivo que se busca en la columna de destilación T-202 es la de separar anhídrido acético, es decir, el producto del proceso, de una mezcla con ácido acético y una pequeña cantidad de compuestos volátiles, corriente 21. A su vez, esta corresponde con la corriente de salida por colas de la torre T-201. Concretamente se pretende alcanzar una corriente de colas, corriente 23, con una pureza del 99,7% en peso de anhídrido acético. El ácido acético junto a las impurezas abandonan el equipo por la corriente de 22.

Al igual que en la columna T-201, no hay generación por lo que las ecuaciones que se aplican son:

$$m_{21} = m_{22} + m_{23} \quad [21]$$

$$m_{21i} = m_{22i} + m_{23i} \quad [22]$$

En la *Parte C: Columna de destilación T-202 del Anexo II: Cálculos justificativos*, se presentan con más detalle los aspectos que conciernen a esta columna. Sin embargo, a continuación, en la Tabla 9, se presenta el balance de materia global del equipo.

Tabla 9. Balance de materia a la torre de destilación T-202

Corrientes	Entrada		Salidas	
	C. 21 (kg/h)	C. 22 (kg/h)	C. 22 (kg/h)	C. 23 (kg/h)
MeOAc	1,28·10 <sup>-5</sup>	1,28·10 <sup>-5</sup>	1,28·10 <sup>-5</sup>	0,00
AcOH	3060,44	3023,23	3023,23	37,22
Ac <sub>2</sub> O	13508,82	919,66	919,66	12589,16
MeI	7,63·10 <sup>-7</sup>	7,63·10 <sup>-7</sup>	7,63·10 <sup>-7</sup>	0,00
LiI	-	-	-	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	-	-	-	-
CO	-	-	-	-
H <sub>2</sub>	-	-	-	-
<b>Total</b>	16569,27	3942,89	3942,89	12626,38
<b>Comprobación balance</b>	16569,27	16569,27		

#### 1.2.6. Recirculaciones y uniones de corrientes

Tanto las uniones de las corriente como en las recirculaciones no hay generación, por lo que el flujo de entrada debe ser igual al flujo de salida.

Al principio del proceso se produce la unión de la alimentación de metil acetato, corriente 1, con la de ácido acético, corriente 2. Para este punto de unión el balance de materia total queda reflejado en la *Ecuación 23* y el balance de materia para cada uno de los componentes se lleva a cabo mediante la *Ecuación 24*.

$$m_1 + m_2 = m_3 \quad [23]$$

$$m_{1i} + m_{2i} = m_{3i} \quad [24]$$

En la Tabla 10 se muestra el balance de materia y la comprobación de su cumplimiento.

Tabla 10. Balance de materia a la unión de las alimentaciones de los líquidos

Corrientes	Entrada		Salida
	C. 1 (kg/h)	C. 2 (kg/h)	C. 3 (kg/h)
MeOAc	9135,05	-	9135,05
AcOH	9,14	28,07	37,22
Ac <sub>2</sub> O	-	-	-
MeI	-	-	-
LiI	-	-	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	-	-	-
CO	-	-	-
H <sub>2</sub>	-	-	-
<b>Total</b>	9144,19	28,07	9172,26
<b>Comprobación balance</b>	9172,26		9172,26

Por otro lado, la corriente de gas que sale del reactor, corriente 12, se une con la corriente de monóxido de carbono alimentado, corriente 8. Para este punto de unión el balance de materia total queda reflejado en la *Ecuación 25* y el balance de materia para cada uno de los componentes se lleva a cabo mediante la *Ecuación 26*.

$$m_{12} + m_8 = m_9 \quad [25]$$

$$m_{12_i} + m_{8_i} = m_{9_i} \quad [26]$$

Finalmente, en la Tabla 10 se muestra el balance de materia y la comprobación de su cumplimiento.

Tabla 11. Balance de materia a la unión de las corrientes gaseosas

Corrientes	Entrada		Salida
	C. 12 (kg/h)	C. 8 (kg/h)	C. 9 (kg/h)
MeOAc	-	-	-
AcOH	-	-	-
Ac <sub>2</sub> O	-	-	-
MeI	-	-	-
LiI	-	-	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	-	-	-
CO	3454,12	3454,12	6908,23
H <sub>2</sub>	26,17	-	26,17
<b>Total</b>	<b>3480,28</b>	<b>3454,12</b>	<b>6934,40</b>
<b>Comprobación balance</b>	<b>6934,40</b>		<b>6934,40</b>

## 2. Balances de energía

Los balances de energía también se basan en el Principio de Conservación de la Energía. Sin embargo, se diferencian de los balances de materia en que la energía si puede ser generada o consumida en otros equipos que no sean el reactor. Asimismo, la energía se puede manifestar en el proceso de manera mecánica, térmica o eléctrica, dependiendo del tipo de equipo con el que se esté trabajando. Al llevar a cabo los balances de energía se pueden determinar los requerimientos energéticos del sistema, es decir, la cantidad de calor que se ha de suministrar o retirar o la potencia que se ha de proporcionar. (1)

El balance de energía a un sistema en estado estacionario se representa mediante la *Ecuación 27*, que incluye todos los términos referidos a la energía.

$$U_1 + P_1 \cdot v_1 + \frac{u_1^2}{2} + z_1 \cdot g + Q = U_2 + P_2 \cdot v_2 + \frac{u_2^2}{2} + z_2 \cdot g + W \quad [27]$$

Donde 1 y 2 representan los puntos de entrada y salida al sistema; Q es el calor liberado o introducido al sistema (positivo si entra y negativo si sale) en J/kg; W es el trabajo realizado por el sistema (positivo si sale y negativo si entra) en J/kg; U es la energía interna en J/kg; P es la presión de la corriente en N/m<sup>2</sup>; v es el volumen por unidad de masa en m<sup>3</sup>/kg, u<sup>2</sup>/2 es el término de la energía cinética en J/kg y z · g es el término de la energía potencial en J/kg. (1)

Normalmente, en procesos químicos el término de la energía cinética y de la energía potencial son despreciables frente al resto de los términos. Además, para simplificar aún más la *Ecuación 27* se define la entalpía de la corriente, que se representa con la *Ecuación 28*.

$$H = U + P_v \quad [28]$$

Este parámetro H tiene unidades de J·kg, pero normalmente se prefiere, al trabajar en procesos continuos, con el valor de la entalpía de la corriente en kJ/h. Para calcular el valor de la entalpía de una corriente en esas unidades se utiliza la *Ecuación 29*.

$$h_i = m_i \cdot C_{pi} \cdot (T_i - T_r) \quad [29]$$

Donde  $m_i$  hace referencia al flujo másico de la corriente  $i$  (kg/h)  $C_{pi}$  al calor específico de la corriente  $i$  (kJ/(kg·°C)),  $T_i$  a la temperatura de la corriente  $i$  (°C) y  $T_r$  a la temperatura de referencia (°C), la cual se toma como 0 °C.

Por otro lado, para el caso de las corriente en fase vapor es necesario tener en cuenta el calor de vaporización,  $\lambda$ . Para ello se utiliza la *Ecuación 30*.

$$H_i = m_i \cdot (C_{pi} \cdot (T_i - T_r) + \lambda_i) \quad [30]$$

A continuación se llevarán a cabo los balance de materia en aquellos equipos en los que hay cambios en la temperatura y en los que se aporte o retire calor o se realice un trabajo. Por último, los calores específicos propios de cada una de las corrientes han sido determinados empleando el simulador *Aspen HYSYS* con el paquete termodinámico *NRTL*.

## 2.1. Bombas

Para las bombas se realiza un balance de energía mecánica basado en la *Ecuación de Bernoulli*, *Ecuación 31*. Donde se tiene en cuenta el término de la variación de la energía cinética, potencial, la energía del flujo de la corriente, el trabajo aportado al sistema y las pérdidas por fricción. (2)

$$\left( \frac{u_1^2}{2 \cdot \alpha_1} - \frac{u_2^2}{2 \cdot \alpha_2} \right) - g \cdot (z_1 - z_2) + \frac{P_1 - P_2}{\rho} + W - \sum F = 0 \quad [31]$$

Para la bomba, se lleva a cabo el balance entre su entrada y su salida, por lo que se pueden despreciar varios términos. Por un lado, la variación de la energía cinética es nula, ya que las conducciones de entrada y de salida son iguales, y la variación de la energía potencial también, ya que la bomba es un equipo muy pequeño y no hay una diferencia significativa de altura entre los extremos. Asimismo, el término de la fricción puede ser anulado ya que para la propia bomba esas pérdidas ya están incluidas en la eficiencia de la misma.

En conclusión, la *Ecuación 31* puede ser simplificada a la *Ecuación 32* para así obtener el trabajo que se ha de suministrar al sistema para conseguir la presión deseada. (2)

$$W = \frac{P_2 - P_1}{\rho} \quad [32]$$

Este trabajo obtenido es el que se ha de suministrar al fluido, pero, en la realidad, las bombas no tienen una eficiencia del 100%, por lo que se ha de trabajar con bombas que suministren una potencia mayor a la requerida. La eficiencia de las bombas seleccionadas se ha determinado mediante sus curvas características en la *Parte D: Dimensionamiento básico de los equipos del Anexo II. Cálculos justificativos*. Por tanto, el trabajo real que ha de aportar la bomba se calcula con la *Ecuación 33*.

$$\eta = \frac{W}{W_{real}} \quad [33]$$

Por último, se calcula la potencia de la bomba en kW mediante la *Ecuación 34*.

$$P = m_i \cdot W_{real} \quad [34]$$

Los resultados obtenidos para las bombas P-101 A/B, P-102 A/B, P-203 A/B y P-204 A/B se muestran en la Tabla 12.

Tabla 12. Trabajos y potencias suministradas por las bombas

	P <sub>1</sub> (kPa)	P <sub>2</sub> (kPa)	ρ (kg/m <sup>3</sup> )	W (kJ/kg)	η (%)	W <sub>real</sub> (kJ/kg)	m (kg/s)	P (kW)
<b>P-101 A/B</b>	101,33	289,41	929,64	0,20	54	0,37	2,55	0,95
<b>P-102 A/B</b>	124,62	5059,00	1131,32	4,36	62	7,03	7,88	55,45
<b>P-203 A/B</b>	101,33	357,85	1603,79	0,16	51	0,31	3,24	1,01
<b>P-204 A/B</b>	101,33	433,61	936,47	0,35	47	0,75	1,10	0,83

A posteriori, se calcula el incremento de temperatura que se ha producido en la corriente de salida, para ello se realiza un balance de energía empleando la *Ecuación 35* para P-101 A/B, *Ecuación 36* para P-102 A/B, *Ecuación 37* para P-203 A/B y *Ecuación 38* para P-204 A/B

$$m_3 \cdot C_{p_3} \cdot (T_3 - T_r) + W \cdot m_3 = m_4 \cdot C_{p_4} \cdot (T_4 - T_r) \quad [35]$$

$$m_5 \cdot C_{p_5} \cdot (T_5 - T_r) + W \cdot m_5 = m_6 \cdot C_{p_6} \cdot (T_6 - T_r) \quad [36]$$

$$m_{20} \cdot C_{p_{20}} \cdot (T_{20} - T_r) + W \cdot m_{20} = m_{26} \cdot C_{p_{26}} \cdot (T_{26} - T_r) \quad [37]$$

$$m_{22} \cdot C_{p_{22}} \cdot (T_{22} - T_r) + W \cdot m_{22} = m_{27} \cdot C_{p_{27}} \cdot (T_{27} - T_r) \quad [38]$$

Los datos empleados así como el resultado obtenido se muestra en la Tabla 13.

Tabla 13. Balance de energía a las bombas P-101 A/B, P-102 A/B, P-103 A/B y P-104 A/B

	Corriente	m (kg/h)	C <sub>p</sub> (kJ/(kg·°C))	T (°C)
<b>Bomba P-101 A/B</b>	3	9172,26	1,80	20,00
	4	9172,26	1,80	20,11
<b>Bomba P-102 A/B</b>	5	28375,48	1,47	63,09
	6	28375,48	1,48	65,64
<b>Bomba P-203 A/B</b>	20	11660,23	0,94	46,37
	26	11660,23	0,94	46,54
<b>Bomba P-204 A/B</b>	22	3942,89	1,89	126,04
	27	3942,89	1,89	126,22

## 2.2. Tanque de mezcla TM-101

Al tanque de mezcla TM-101 entran las corrientes 4, 25, 26 y 27, todas ellas a distintas temperaturas, y del tanque sale la corriente 5. Es necesario llevar a cabo el balance de energía al equipo para determinar la temperatura de salida de la corriente. Como no se aporta o retira calor ni se suministra trabajo, la temperatura de salida se determina empleando la *Ecuación 39*. Siendo  $i$  las corrientes de entrada al tanque.

$$\sum m_i \cdot C_{pi} \cdot (T_i - T_r) = m_5 \cdot C_{p5} \cdot (T_5 - T_r) \quad [39]$$

En la Tabla 14 se presentan el caudal másico de las corrientes, sus calores específicos, y sus temperaturas de entrada. Asimismo, se muestra la temperatura de la mezcla de salida.

Tabla 14. Balance de energía al tanque de mezcla TM-101

Corriente	m (kg/h)	C <sub>p</sub> (kJ/(kg·°C))	T (°C)
4	9172,26	1,80	20,11
25	3600,10	2,02	117,00
26	11660,23	0,94	46,54
27	3942,89	1,89	126,22
5	28375,48	1,47	63,09

## 2.3. Intercambiador de calor E-101 y E-102

El intercambiador E-101 y E-102 se utilizan para llevar la corriente líquida y de gas que entran al reactor a las condiciones de operación del mismo. Por tanto, se utilizan para que las corrientes 6 y 9 alcancen una temperatura de 175 °C. En este caso, el calor que se debe aportar al sistema se calcula mediante la *Ecuación 40* para el intercambiador E-101 y mediante la *Ecuación 41* para el intercambiador E-102.

$$Q = m_6 \cdot \overline{C_p} \cdot (T_7 - T_6) \quad [40]$$

$$Q = m_9 \cdot \overline{C_p} \cdot (T_{10} - T_9) \quad [41]$$

En la Tabla 15 se presentan los valores propios de las corrientes, así como el calor que es necesario aportar a cada equipo.

Tabla 15. Balance de energía al intercambiador E-101 y E-102

	m (kg/h)	C <sub>p</sub> (kJ/kg·°C)	T <sub>6</sub> (°C)	T <sub>7</sub> (°C)	T <sub>9</sub> (°C)	T <sub>10</sub> (°C)	Q (kJ/h)
<b>E-101</b>	28375,48	1,70	65,64	175,00	-	-	5,27·10 <sup>6</sup>
<b>E-102</b>	6934,40	1,10	-	-	108,53	175,00	5,07·10 <sup>5</sup>

Una vez conocido el calor que se ha de aportar, se determina la cantidad del vapor de media presión necesario, así como el descenso de temperatura que sufre durante la operación. Se

realiza un balance de energía al fluido de servicio, *Ecuación 42*. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 16.

$$Q = m_{mps} \cdot C_{pmps} \cdot (T_{entrada} - T_{salida}) \quad [42]$$

Tabla 16. Caudal de fluido calefactor del intercambiador E-101 y E-102

	$C_{pmps}$ (kJ/kg·°C)	$T_{entrada}$ (°C)	$T_{salida}$ (°C)	$m_{mps}$ (kg/h)	$m_{mps}$ (kg/s)
<b>E-101</b>	3,02	185,00	162,00	75793,58	21,05
<b>E-102</b>	3,02	185,00	162,00	18633,73	5,18

## 2.4. Unión de las corrientes 8 y 12

La corriente 12 que sale del reactor se une a la corriente 8 para volver a entrar al reactor R-101. Ambas corrientes están a distintas temperaturas, por tanto la corriente de salida tendrá una temperatura distinta, ya que se producirá un intercambio de calor.

El balance de energía se desarrolla de manera análoga al del tanque de mezcla TM-101 y se utiliza la *Ecuación 43* para obtener la temperatura de la corriente 9. Los datos empleados y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 17.

$$m_{12} \cdot C_{p_{12}} \cdot (T_{12} - T_r) + m_8 \cdot C_{p_8} \cdot (T_8 - T_r) = m_9 \cdot C_{p_9} \cdot (T_9 - T_r) \quad [43]$$

Tabla 17 Balance de energía a la unión de corrientes 12 y 8

Corriente	$m$ (kg/h)	$C_p$ (kJ/(kg·°C))	$T$ (°C)
12	3480,28	1,16	186,96
8	3454,12	1,08	20,00
9	6934,40	1,10	108,53

## 2.5. Reactor R-101

El balance de energía al reactor se realiza de manera detallada en el *Anexo II. Cálculos Justificativos*, en concreto en el apartado 9. *Balance de energía*. Se determinó que se trabaja con una reacción exotérmica y se requiere que el reactor opere en condiciones isotermas, por ello es necesario la retirada de calor del sistema. En la Tabla 18 se muestra el calor de reacción y el calor liberado durante la operación.

Tabla 18. Calor liberado en la reacción del Reactor R-101

$\Delta H_r$ (kJ/mol)	$Q_{generado}$ (kJ/h)	$Q_{generado}$ (kW)
-68,51	$8,45 \cdot 10^6$	$2,35 \cdot 10^3$

## 2.6. Compresor C-101

El compresor C-101 es necesario para compensar la pérdida de presión que se produce en el reactor y permitir la recirculación de la corriente 11 a la entrada del reactor. La corriente de

gas sale del reactor a 48,59 bar y se ha de aumentar la presión a 51,06 bar para que entre al reactor a 50 bar.

Según heurísticas cuando la relación de aumento de presión es inferior a 4 solo es necesario emplear una etapa de compresión. (1)

A continuación, se calculará la potencia que ha de suministrar para conseguir la presión deseada así como el aumento de temperatura que se produce.

En compresores, el trabajo mínimo que se emplea para comprimir el gas es el trabajo isoentrópico, cuando no hay cambios en la entropía entre los puntos de entrada y salida. Este trabajo  $W_s$  se puede calcular mediante la *Ecuación 44*. (3)

$$W_s = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \cdot R \cdot T_1 \cdot \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right] \quad [44]$$

Donde  $W_s$  es el trabajo isoentrópico (kJ/kmol),  $R$  es la constante de los gases ideales (8,314 kJ/(kmol·K)),  $\gamma$  es el ratio  $C_p/C_v$  obtenido de *Aspen HYSYS*,  $T_1$  es la temperatura a la entrada del compresor (K),  $P_2$  es la presión a la salida (kPa o bar) y  $P_1$  a la entrada (kPa o bar).

Posteriormente, se puede obtener el trabajo real que ha de suministrar el compresor a partir de la eficiencia del mismo, *Ecuación 45*. Este valor se ha obtenido para el compresor de pistón en la *Parte D: Dimensionamiento básico de los equipos del Anexo II. Cálculos justificativos*.

$$\eta = \frac{W_s}{W_{real}} \quad [45]$$

Por último se calcula la potencia de la bomba en kW mediante la *Ecuación 46*.

$$P = F_{11} \cdot W_{real} \quad [46]$$

Como se comentó, al comprimir la corriente gaseosa se produce un aumento de temperatura. Si se considera que no hay cambio en la entropía del sistema se puede calcular la temperatura isoentrópica de salida del compresor,  $T_2'$ , con la *Ecuación 47* y, posteriormente, se calcula la temperatura real en el punto de salida con la *Ecuación 48*. (3)

$$T_2' = T_1 \cdot \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \quad ; \quad T_2 = T_1 + \frac{T_2' - T_1}{\eta} \quad [47, 48]$$

Los resultados obtenidos para los cálculos anteriores se muestran en la Tabla 19.

Tabla 19. Balance de energía al compresor C-101

$\gamma$	$P_1$ (bar)	$P_2$ (bar)	$T_1$ (°C)	$W_s$ (kJ/kmol)	$\eta$ (%)	$W_{real}$ (kJ/kmol)	$F_{11}$ (kmol/s)	$P$ (kW)	$T_2'$ (°C)	$T_2$ (°C)
1,39	48,13	51,06	175,00	222,84	63	353,72	$3,79 \cdot 10^{-2}$	13,39	182,53	186,96

## 2.7. Válvula VLV-201

Esta válvula se emplea para reducir la presión de la corriente 13 que sale del reactor a la presión a la cual se introducirá la corriente en el separador flash. Pero, este cambio de presión produce un cambio en la fase y temperatura de la corriente de salida, por ello es necesario llevar a cabo el balance de energía.

Las válvulas se caracterizan por ser procesos adiabáticos (equipos de pequeño tamaño que no dan tiempo a que se intercambie calor), donde la variación de energía potencial es despreciable y la variación de la energía cinética suele ser también despreciable, a pesar de que haya cambios importantes en la velocidad. Por esa razón, la operación de una válvula se considera un proceso isoentálpico.

En concreto para la válvula VLV-201, se lleva a cabo el balance de energía para determinar la disminución en la temperatura de salida de la válvula, debido a que parte de la corriente sufre un cambio de fase. Para ello se divide el proceso en dos etapas, ya que la entalpía es una variable de estado. En la primera etapa se produce una expansión a presión constante del estado A ( $P_1$  y  $T_1$ ) al B ( $P_1$  y  $T_2$ ) y en la segunda etapa hay un cambio isoterma de B a C ( $P_2$  y  $T_2$ ). La suma de las entalpías de estas etapas debe cumplir la *Ecuación 49*. (4)

$$\Delta H_{AB} + \Delta H_{BC} = 0 \quad [49]$$

La entalpía del estado A al estado B se determina mediante la *Ecuación 50*, que incluye el descenso de temperatura del sistema y el cambio de fase.

$$\Delta H_{AB} = \overline{C}_{pL} \cdot (T_2 - T_1) + \psi_v \cdot \lambda \quad [50]$$

Donde  $\overline{C}_{pL}$  es el calor específico medio del líquido (kJ/(kg·K)),  $\psi_v$  representa la fracción másica del vapor formado y  $\lambda$  el calor de vaporización (kJ/kg).

Por otro lado, para la etapa de B a C se emplea la *Ecuación 51*.

$$\Delta H_{BC} = (P_2 - P_1) \cdot \overline{V}_L \quad [51]$$

Donde  $\overline{V}_L$  es el volumen específico medio del líquido de la mezcla. (m<sup>3</sup>/kg).

Los valores de los parámetros empleados se obtuvieron del simulador *Aspen HYSYS*. Estos valores y la temperatura de salida de la válvula VLV-201 que cumple el balance de energía se indican en la Tabla 20.

Tabla 20. Balance de energía a la válvula VLV-201

$\overline{V}_L$ (m <sup>3</sup> /kg)	$P_1$ (kPa)	$P_2$ (kPa)	$\Delta H_{BC}$ (kJ/kg)	$\overline{C}_{pL}$ (kJ/(kg·K))	$T_2$ (°C)	$T_1$ (°C)	$\psi$	$\lambda$ (kJ/kg)	$\Delta H_{AB}$ (kJ/kg)
$1,03 \cdot 10^{-3}$	5138,65	301,00	-4,99	1,90	134,95	175,00	0,27	301,34	4,99

## 2.8. Evaporador parcial E-201

Este intercambiador se utiliza para evaporar parte de la corriente líquida que sale del reactor, para que posteriormente pueda ser separada en el separador flash V-201. En concreto, se utiliza para que la corriente 14 alcance una temperatura de 154,80 °C.

Como la corriente de entrada al intercambiador tiene cierto porcentaje de vapor, el calor necesario para evaporar parte de esta corriente puede ser determinado en tres fases.

En primer lugar, se determina el calor necesario para subir de temperatura el vapor que entra al intercambiador. Para ello se emplea la *Ecuación 52*.

$$Q_I = m_{14} \cdot \psi_{v_{14}} \cdot \overline{C_{p,v}} \cdot (T_{15} - T_{14}) \quad [52]$$

Donde  $\psi_{v_{14}}$  es la fracción másica de vapor en la corriente 14 y  $\overline{C_{p,v}}$  el calor específico medio del vapor (kJ/(kg·K)).

En segundo lugar, se cuantifica el calor utilizado en aumentar de temperatura y evaporar el porcentaje de líquido deseado, *Ecuación 53*.

$$Q_{II} = m_{14} \cdot (1 - \psi_{v_{14}} - \psi_{l_{15}}) \cdot (\overline{C_{p,l}} \cdot (T_{15} - T_{14}) + \lambda) \quad [53]$$

Donde  $\psi_{l_{15}}$  representa la fracción de líquido en la corriente 15 y  $\overline{C_{p,l}}$  el calor específico medio del líquido (kJ/(kg·K)).

En último lugar, se calcula el calor empleado en aumentar la temperatura del líquido que no ha cambiado de fase, *Ecuación 54*.

$$Q_{III} = m_{14} \cdot \overline{C_{p,l}} \cdot \psi_{l_{15}} \cdot (T_{15} - T_{14}) \quad [54]$$

Finalmente, el calor total necesario para alcanzar las condiciones de salida requeridas se calcula como la suma de los calores individuales, *Ecuación 55*.

$$Q = Q_I + Q_{II} + Q_{III} \quad [55]$$

Los calores específicos del vapor y del líquido y el calor de vaporización,  $\lambda$ , de la mezcla se determinan utilizando el simulador *Aspen HYSYS*.

En la Tabla 21 se presentan los valores propios de las corrientes, así como el calor que es necesario aportar al equipo.

Tabla 21. Balance de energía al intercambiador E-201

$m_{14}$ (kg/h)	$\overline{C_{p,l}}$ (kJ/kg·°C)	$\overline{C_{p,v}}$ (kJ/kg·°C)	$T_{14}$ (°C)	$T_{15}$ (°C)	$\psi_{v_{14}}$	$\psi_{l_{15}}$	$Q_I$ (kJ/h)	$Q_{II}$ (kJ/h)	$Q_{III}$ (kJ/h)	$Q$ (kJ/h)
31829,60	2,03	0,92	134,95	154,80	0,27	0,11	$1,57 \cdot 10^5$	$8,32 \cdot 10^6$	$1,45 \cdot 10^5$	$8,62 \cdot 10^6$

Una vez conocido el calor que se ha de aportar, se determina la cantidad del vapor de media presión necesario, así como el descenso de temperatura que sufre durante la operación. Se utiliza la *Ecuación 42* y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 22.

Tabla 22. Caudal de fluido calefactor del evaporador parcial E-201

$C_{pmps}$ (kJ/kg·°C)	$T_{entrada}$ (°C)	$T_{salida}$ (°C)	$\dot{m}_{mps}$ (kg/h)	$\dot{m}_{mps}$ (kg/s)
3,02	185,00	162,00	123934,39	34,43

## 2.9. Válvula VLV-202 y VLV-203

La válvula VLV-202 se utiliza para disminuir la presión de la corriente gas que sale del tanque V-201, corriente 17, de 2,65 bar a 1,42 bar, para que llegue a columna de destilación T-201 a 1,06 bar, presión a la que opera.

Por otro lado, la válvula VLV-203 disminuye la presión de la corriente 24 que sale del intercambiador E-207 y que se dirige al tanque de mezcla TM-101 de 2,52 bar a 1,26 bar.

Como se explicó, en el balance de energía se desprecian los términos de la energía cinética y potencial y no se aplica ningún trabajo ni calor en la válvula. Por tanto es un proceso isoentálpico donde se cumple la *Ecuación 56* para VLV-202 y la *Ecuación 57* para VLV-203.

$$H_{17} = H_{18} \quad ; \quad h_{24} = h_{25} \quad [56, 57]$$

Al contrario que en la válvula VLV-201, en estos equipos no hay cambio de fase, por tanto al realizar el balance se comprueba que la temperatura de entrada es igual a la temperatura de salida. Los valores de las entalpías de cada corriente se muestran en la Tabla 23.

Tabla 23. Balance de energía a la válvula VLV-202

Corrientes	$\dot{m}$ (kg/h)	$C_p$ (kJ/kg·°C)	$T$ (°C)	$H$ (kJ/h)	$h$ (kJ/h)
17	28229,50	1,07	154,80	$4,66 \cdot 10^6$	-
18	28229,50	1,07	154,80	$4,66 \cdot 10^6$	-
24	3600,10	1,07	117,00	-	$8,50 \cdot 10^5$
25	3600,10	1,07	117,00	-	$8,50 \cdot 10^5$

## 2.10. Condensador E-202

Este intercambiador se utiliza para condensar totalmente la corriente gaseosa que sale del flash, corriente 18, que necesita ser condensada para entrar a la columna de destilación T-201 en su temperatura de saturación. En concreto, se utiliza para que la corriente 19 alcance una temperatura de 78,47 °C. En este caso, el calor que se debe retirar del sistema se calcula mediante la *Ecuación 58*.

$$Q = \dot{m}_{18} \cdot (\overline{C}_{p,v} \cdot (T_{18} - T_{ebullición}) + \lambda) \quad [58]$$

La temperatura de ebullición,  $T_{\text{ebullición}}$ , y el calor de vaporización,  $\lambda$ , de la mezcla se determina utilizando el simulador *Aspen HYSYS*.

En la Tabla 24 se presentan los valores propios de las corrientes, así como el calor que es necesario retirar en el equipo.

Tabla 24. Balance de energía al condensador E-202

<b>m</b> <b>(kg/h)</b>	<b>Cp</b> <b>(kJ/kg·°C)</b>	<b>T<sub>18</sub></b> <b>(°C)</b>	<b>T<sub>ebullición</sub></b> <b>(°C)</b>	<b>λ</b> <b>(kJ/kg)</b>	<b>Q</b> <b>(kJ/h)</b>
28229,50	0,81	154,80	78,47	407,50	$1,32 \cdot 10^7$

Una vez conocido el calor que se ha de retirar, se determina la cantidad del agua de refrigeración necesaria, así como el aumento de temperatura que sufre durante la operación. Se utiliza la *Ecuación 59* y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 25.

$$Q = m_{cw} \cdot C_{p_{cw}} \cdot (T_{\text{salida}} - T_{\text{entrada}}) \quad [59]$$

Tabla 25. Caudal del fluido refrigerante del condensador E-202

<b>C<sub>p<sub>cw</sub></sub></b> <b>(kJ/kg·°C)</b>	<b>T<sub>entrada</sub></b> <b>(°C)</b>	<b>T<sub>salida</sub></b> <b>(°C)</b>	<b>m<sub>cw</sub></b> <b>(kg/h)</b>	<b>m<sub>cw</sub></b> <b>(kg/s)</b>
4,18	26,00	45,00	166685,91	46,30

### 2.11. Columna de destilación T-201

Esta columna de destilación cuenta con una caldera y un condensador. Por tanto, el balance de energía global al equipo se define mediante la *Ecuación 60*.

$$F_{19} \cdot h_{19} + Q_{\text{caldera}} = F_{20} \cdot h_{20} + F_{21} \cdot h_{21} + Q_{\text{condensador}} \quad [60]$$

En concreto el condensador es total, es decir, toda la corriente de vapor ( $V_1$ ) que abandona la torre por la cabeza es condensada en las corrientes  $L_0$  y  $D$  (Corriente 20). Por lo que, el calor retirado en el condensador se calcula mediante la *Ecuación 61*, que puede ser simplificada a la *Ecuación 62*.

$$Q_{\text{condensador}} = V_1 \cdot H_{V_1} - L_0 \cdot h_{L_1} - D \cdot h_D \quad [61]$$

$$Q_{\text{condensador}} = V_1 \cdot (C_p \cdot (T_{V_1} - T_{20}) + \lambda_{\text{vap}}) \quad [62]$$

Para conocer el valor de los caudales molares de  $V_1$  y  $L_0$  es necesario conocer la relación de reflujo  $R$  de la columna, por lo que mediante una simulación en *Aspen HYSYS* se estima un valor de 3,00. De igual manera, los valores de  $C_p$  y  $\lambda$  se obtienen de la simulación y las entalpías se calculan con las *Ecuaciones 29* y *30*. El balance de materia del condensador se refleja en la *Ecuación 63*.

$$V_1 = D + L_0 \rightarrow L_0 = R \cdot D \rightarrow V_1 = (R + 1)D \quad [63]$$

Los parámetros relacionados con el balance de energía de la columna de destilación T-201 se reflejan en la Tabla 26.

Tabla 26. Parámetros necesarios para el balance de energía a la torre T-201

Corriente	F (kmol/h)	Temperatura (°C)	C <sub>p</sub> (kJ/(kmol·°C))	λ (kJ/kmol)	h (kJ/kmol)	H (kJ/kmol)
19	284,71	78,47	139,93	39918,13	10980,31	-
20	101,42	46,37	117,84	29366,01	5464,24	-
21	183,29	136,05	219,57	36330,41	29872,5	-
L <sub>0</sub>	304,27	49,05	107,54	29366,01	5274,84	-
V <sub>1</sub>	405,69	46,37	61,59	29366,01	-	29366,01

Conocidos los datos de la Tabla superior ya es posible aplicar las Ecuaciones 60 y 62. Los resultados del calor aportado a la caldera y del calor retirado en el condensador se muestran en la Tabla 27. Finalmente se determina la cantidad de agua de refrigeración necesaria en el condensador con la Ecuación 59 y la cantidad de vapor de media presión en la caldera con la Ecuación 42.

Tabla 27. Calor retirado del condensador y calor aportado a la caldera de la columna T-201

Q <sub>condensador</sub> (kJ/h)	m <sub>mps</sub> (kg/s)	Q <sub>caldera</sub> (kJ/h)	m <sub>cw</sub> (kg/s)
1,20·10 <sup>7</sup>	41,99	1,49·10 <sup>7</sup>	59,51

## 2.12. Columna de destilación T-202

La manera de resolver el balance de energía para la columna T-202 se realiza de manera análoga a la T-201, ya que de nuevo es otra torre con condensador total.

Como este equipo se diseña rigurosamente en el presente proyecto, concretamente en el Anexo II: Cálculo justificativos, en el apartado actual solo se recogerán los datos de interés tabulados a continuación:

Tabla 28. Calor retirado del condensador y calor aportado a la caldera de la columna T-202

Q <sub>condensador</sub> (kJ/h)	m <sub>mps</sub> (kg/s)	Q <sub>caldera</sub> (kJ/h)	m <sub>cw</sub> (kg/s)
9,09·10 <sup>6</sup>	31,78	9,03·10 <sup>6</sup>	36,06

## 2.13. Intercambiador de calor E-207 y E-208

El intercambiador E-207 se utiliza para reducir la temperatura de la corriente 16, que sale líquida del separador V-201. Por tanto, se utiliza para que la corriente 16 disminuya su temperatura de 154,8 °C a 117,0 °C. En este caso, el calor que se debe retirar del sistema se determina mediante la Ecuación 64.

$$Q = m_{16} \cdot \overline{C_p} \cdot (T_{16} - T_{24}) \quad [64]$$

Por otro lado, el intercambiador E-208 se emplea para reducir la temperatura de la corriente 23 de 143,02 °C a 27 °C. El calor que debe ser retirado se determina mediante la *Ecuación 65*.

$$Q = m_{23} \cdot \overline{C_p} \cdot (T_{23} - T_{28}) \quad [65]$$

En la Tabla 29 se presentan los valores propios de las corrientes, así como el calor que es necesario retirar del equipo.

Tabla 29. Balance de energía al intercambiador E-207 y E-208

	m (kg/h)	$\overline{C_p}$ (kJ/kg·°C)	T <sub>17</sub> (°C)	T <sub>18</sub> (°C)	T <sub>23</sub> (°C)	T <sub>28</sub> (°C)	Q (kJ/h)
E-207	3600,10	2,09	154,80	117,00	-	-	2,84·10 <sup>5</sup>
E-208	12626,38	2,09	-	-	143,02	27,00	3,06·10 <sup>6</sup>

Una vez conocido el calor que se ha de retirar, se determina la cantidad del agua de refrigeración necesaria, así como el aumento de temperatura que sufre durante la operación. Se utiliza de nuevo la *Ecuación 59*. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 30.

Tabla 30. Caudal de fluido refrigerante del intercambiador E-207 y E-208

	C <sub>p,cw</sub> (kJ/kg·°C)	T <sub>entrada</sub> (°C)	T <sub>salida</sub> (°C)	m <sub>cw</sub> (kg/h)	m <sub>cw</sub> (kg/s)
E-207	4,18	26,00	45,00	3579,35	0,99
E-208	4,18	26,00	45,00	38492,51	10,69

### 3. Bibliografía

1. SINNOTT, R. K. y TOWLER, G. *Diseño en Ingeniería Química*. 5ª ed. Barcelona : Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
2. MOTT, R. L. y UNTENER, J. A. *Mecánica de fluidos*. 7ª ed. s.l. : Pearson Education, Inc., 2015. ISBN 978-607-32-3288-3.
3. SMITH, J. M., VAN NESS, H. C. y ABBOTT, M. M. *Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química*. 7ª ed. Ciudad de México : McGraw-Hill/Interamericana Editores, 2007. ISBN 978-970-10-6147-3.
4. HLAVINKA, M. W. Temperature Increases across JT Valves and Adiabatic Flashes. [En línea] [Citado el: 9 de Mayo de 2024.] <https://www.bre.com/PDF/Temperature-Increases-across-JT-Valves-and-Adiabatic-Flashes.pdf>.
5. GREEN, D. W. y SOUTHARD, M. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 9ª ed. New York : McGraw-Hill Education, 2019. ISBN 978-0-07-183409-4.

---

# ANEXO II:

## Cálculos justificativos

---

---

PARTE A:

Diseño mecánico

---

## Índice

1.	Introducción.....	1
2.	Selección del material.....	1
3.	Diseño mecánico .....	4
3.1.	Presión de diseño .....	4
3.2.	Temperatura de diseño .....	4
3.3.	Espesor de la carcasa .....	4
3.4.	Tipos de cabezales .....	6
3.5.	Análisis de cargas .....	7
3.5.1.	Cargas por peso .....	7
3.5.2.	Cargas por viento.....	8
3.5.3.	Otras cargas .....	9
3.5.4.	Análisis de tensiones .....	9
3.6.	Selección del soporte .....	11
3.7.	Tubuladuras, conexiones y compensación de aperturas .....	13
4.	Bibliografía.....	15

## 1. Introducción

En esta parte del *Anexo II. Cálculos justificativos* se seleccionará el material más adecuado tanto para el reactor R-101 como para la columna de destilación T-202. Asimismo, se explicarán los aspectos relacionados con el diseño mecánico para ambos equipos. Destacar que, tanto el reactor como la columna, serán diseñados bajo el código de diseño *ASME Boiler and Pressure Vessel Code*, Sección VIII, División 1, por ser equipos que operan a una presión mayor que la atmosférica.

## 2. Selección del material

A la hora de seleccionar el material de construcción del reactor R-101 y de la columna de destilación T-202, primero se deben conocer las distintas familias de materiales, para más tarde escoger el que mejor se adapte a las condiciones de operación.

Se utilizará la metodología Ashby para la selección del material. Para ello y en primer lugar, se debe indicar cuales son los requerimientos del equipo, tal y como se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Requerimientos de diseño para recipientes a presión (1)

<b>Función</b>	Contener la presión en el recipiente de manera segura
<b>Restricciones</b>	Diámetro interno del recipiente y razones económicas
<b>Objetivo</b>	Maximizar la seguridad empleando el criterio verter antes de ruptura
<b>Variables libres</b>	Selección del material

Como se plantea en los requerimientos, uno de los parámetros más relevantes a tener en cuenta cuando se diseñan recipientes a presión es la seguridad. Se distinguen dos criterios dependiendo del tamaño de los recipientes:

- Deformación antes de ruptura (“*yield before break*”): Más enfocado a tanques de pequeño tamaño, que se diseñan para permitir una deformación antes de que se llegue a producir una rotura que pueda expandirse. (1)
- Vertido antes de ruptura (“*leak before break*”): Criterio mayormente usado con tanques de gran tamaño, donde se busca asegurar que se produzca una rotura que se pueda propagar y tenga una longitud mayor que el espesor de la pared. (1)

Como se trabaja con recipientes de gran volumen y altura, se utilizará para ambos equipos el criterio de “*leak before break*”, en el cual se busca maximizar el índice del material indicado en la *Ecuación 1*, que relaciona la tenacidad a la fractura con el límite elástico.

$$M_1 = \frac{K_{1C}^2}{\sigma_f} \quad [1]$$

A partir de esta ecuación se puede crear una recta en escala logarítmica (*Ecuación 2*) que permite observar qué materiales maximizan el índice  $M_1$  en la Figura 1.

$$\log K_{1C} = \frac{1}{2} \cdot \log \sigma_f + \frac{1}{2} \cdot \log M \quad [2]$$

Asimismo, se plantea un índice material para encontrar aquellos materiales que proporcionen espesores menores, ya que al trabajar a presiones elevadas los espesores tendrán un tamaño considerable. Además, si el recipiente es lo más delgado posible se usará menos material de construcción, lo que se traduce en un menor coste. Por tanto, se obtiene un nuevo índice de material que se refleja en la *Ecuación 3*. Como se busca maximizar este índice, se preferirá la utilización de materiales con un límite elástico elevado. Se representa en la Figura 1 como una línea vertical.

$$M_2 = \sigma_f \quad [3]$$

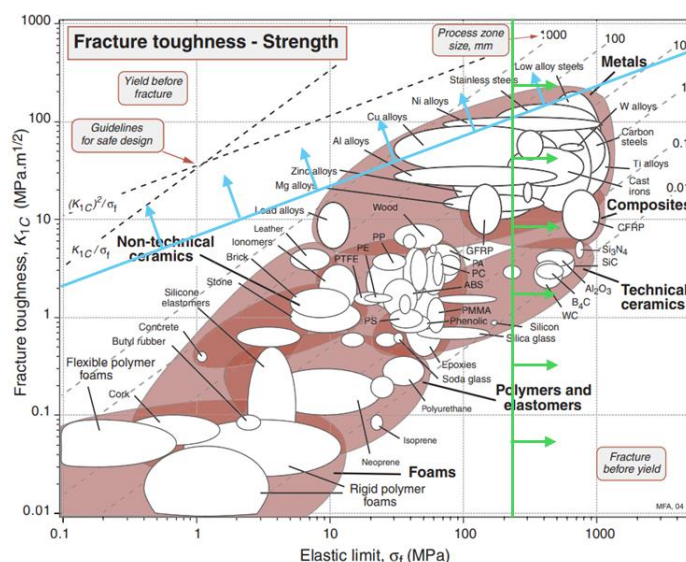


Figura 1. Diagrama de rigidez a la fractura contra límite elástico (1)

Como se plantea en la Figura 1, los materiales más adecuados son los que pertenecen a la familia de los metales, en concreto las aleaciones de cobre, níquel, los aceros inoxidables y los aceros de baja aleación. Siendo preferibles estos últimos, ya que son los que permiten un menor espesor de carcasa.

Otro parámetro fundamental que se debe tener en cuenta a la hora de la selección del material es su costo. En la Figura 2 se muestra la comparación de los costes de los distintos materiales, aunque cabe señalar que esto es una aproximación, ya que los precios varían con el paso de los años y del fabricante.

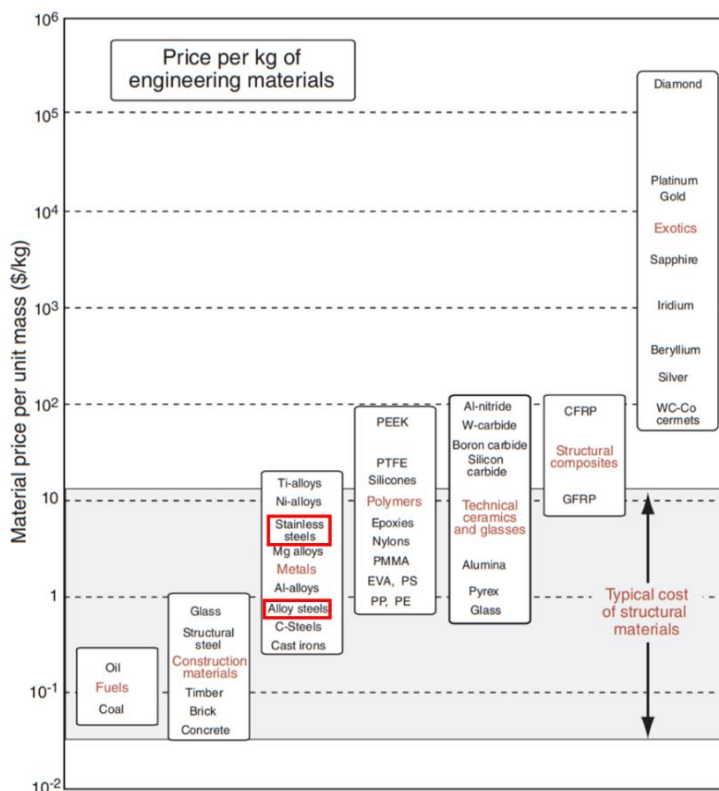


Figura 2. Diagrama de coste por unidad de masa de distintos materiales (1)

Tal y como se muestra en la Figura 2, la familia de los metales se encuentra prácticamente en su totalidad dentro del rango de costes típicos de materiales. Las aleaciones de acero y los aceros inoxidable fueron los materiales de preferencia según la Figura 1, y en la Figura 2 se ve que entran dentro del rango típico. Pero, antes de decidir el material seleccionado, es necesario estudiar la compatibilidad química entre las sustancias presentes en el proceso con los posibles materiales de construcción del reactor y de la columna de destilación. En la Tabla 2 se muestra la compatibilidad química de los compuestos del sistema con las aleaciones más utilizadas en la industria. En esta tabla, A indica excelente compatibilidad; B, buena compatibilidad; C, baja compatibilidad y D, no recomendable.

Tabla 2. Compatibilidad química de las sustancias con distintos materiales (2) (3) (4)

Substancias químicas	Acero al carbono	Acero inoxidable 304	Acero inoxidable 316	Latón	Monel
Acetato de metilo	B	A	A	A	A
Ácido acético	C	C	A	C	A
Anhídrido acético	D	D	B	D	A
Yoduro de metilo	-	A	A	-	-
Monóxido de carbono	A	A	A	A	A
Hidrógeno	A	A	A	A	A

En conclusión, los materiales con una mejor compatibilidad son el monel y el acero inoxidable austenítico 316. Se escogerá el acero inoxidable AISI 316, ya que a pesar de estar etiquetado bajo la categoría de buena y no excelente compatibilidad con el anhídrido acético, tiene

un precio mucho menor en comparación con el monel, por lo que se justifica esta elección. Estos precios se listan en la Tabla 3.

Tabla 3. Precio de los materiales (5)

	Acero inoxidable 316	Monel 400
€/kg	5,0	18,7

### 3. Diseño mecánico

Como se mencionó, el reactor R-101 y la columna de destilación T-202 trabajan a presiones superiores a la atmosférica, por tanto su diseño mecánico se llevará a cabo siguiendo el código *ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII, Division 1* que se abrevia como *ASME BPV Sec. VIII D.1* y que es utilizado para tanques a presión por debajo de los 20 MPa.

En esta parte del Anexo se indicarán los cálculos que deben ser llevados a cabo para el diseño mecánico de ambos equipos. Sin embargo, los resultados correspondientes a cada una de las unidades serán detallados en las *Partes B y C del Anexo II. Cálculos justificativos*.

#### 3.1. Presión de diseño

A la hora de diseñar un recipiente se debe asegurar que sea capaz de soportar la presión máxima a la que está sometido durante la operación. Existen dos criterios para determinar la presión de diseño ( $P_d$ ) de los recipientes: incrementar en un 10% la presión manométrica máxima de operación ( $P_{op}$ ), o bien añadiendo a la presión manométrica máxima 25 psi (1,72 bar). De entre estos dos valores, obtenidos con las *Ecuaciones 4 y 5*, se toma aquel que proporcione una presión de diseño superior. (5)

$$P_d(\text{bar}) = 1,72 + P_{op,m\acute{a}x} \quad [4]$$

$$P_d(\text{bar}) = 1,1 \cdot P_{op,m\acute{a}x} \quad [5]$$

#### 3.2. Temperatura de diseño

Al igual que para la presión, se debe diseñar los equipos para que sean capaces de soportar la temperatura máxima del sistema. Siguiendo el código *ASME BPV Sec. VIII, D. 1*, la temperatura de diseño se calcula aumentando la temperatura de operación máxima en 50 °F, tal y como se indica en la *Ecuación 6*.

$$T_d(^{\circ}\text{F}) = T_{op,max} + 50 \quad [6]$$

#### 3.3. Espesor de la carcasa

El código *ASME BPV Sec. VIII, D.1* establece que cualquier equipo debe tener un espesor mínimo de 1,5 mm, ya que se debe asegurar que el recipiente sea capaz de soportar su propio peso, así como cualquier carga a la que se vea sometido. Además a este espesor se le debe añadir

un factor de corrosión, que en caso de condiciones suaves se considera de 2 mm y en condiciones severas de 4 mm. (5)

A continuación, en la Tabla 4 se incluye una guía dada por el código que indica que para unos determinados diámetros de recipiente, se establece el espesor mínimo recomendado. Además, este incluye un sobredimensionamiento por corrosión.

Tabla 4. Espesores mínimos recomendados para cada diámetro del recipiente (5)

Diámetro del recipiente (m)	Espesor mínimo con 2mm por corrosión (mm)	Espesor mínimo con 4mm por corrosión (mm)
1	5	7
1-2	7	9
2-2,5	9	11
2,5-3	10	12
3-3,5	12	14

En recipientes cilíndricos se ha de calcular el espesor radial y longitudinal mínimo que permita soportar la presión de diseño. El primero se determina empleando la Ecuación 7 y el segundo mediante la Ecuación 8. Entre ambos se selecciona el espesor mayor, puesto que el diseño se hace en base al caso más desfavorable.

$$t_{radial} = \frac{P_d \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 1,2 \cdot P_d} \quad [7]$$

$$t_{longitudinal} = \frac{P_d \cdot D_i}{4 \cdot S \cdot E - 0,8 \cdot P_d} \quad [8]$$

Donde t hace referencia al espesor del recipiente (m),  $P_d$  a la presión de diseño (bar),  $D_i$  al diámetro interno (m), S al máximo esfuerzo permisible (bar) y E a la eficacia de la unión de soldadura.

Los valores del esfuerzo máximo permisible de algunos materiales aparecen tabulados en el código ASME BPV Sec. VIII D.1. Estos datos vienen dados para acero inoxidable 316 a distintas temperaturas en la Figura 3.

Material	Grado	Resistencia a la tracción min. (ksi)	Resistencia a la fluencia min. (ksi)	Temperatura máxima (°F)	Esfuerzo máximo permisible a la temperatura (ksi = 1000 psi)				
					100	300	500	700	900
Acero al carbono	A285 Gr A	45	24	900	12,9	12,9	12,9	11,5	5,9
Acero al carbono apagado	A515 Gr 60	60	32	1000	17,1	17,1	17,1	14,3	5,9
Acero de baja aleación 1/4Cr, 1/2Mo, Si	A387 Gr22	60	30	1200	17,1	16,6	16,6	16,6	13,6
Acero inoxidable 13 Cr	410	65	30	1200	18,6	17,8	17,2	16,2	12,3
Acero inoxidable 18 Cr, 8 Ni	304	75	30	1500	20,0	15,0	12,9	11,7	10,8
Acero inoxidable 18 Cr, 10 Ni, Cb	347	75	30	1500	20,0	17,1	15,0	13,8	13,4
Acero inoxidable 18 Cr, 10 Ni, Ti	321	75	30	1500	20,0	16,5	14,3	13,0	12,3
Acero inoxidable 16 Cr, 12 Ni, 2 Mo	316	75	30	1500	20,0	15,6	13,3	12,1	11,5

Figura 3. Esfuerzo máximo permisible a distintas temperaturas (5)

Por otro lado, la eficiencia de soldadura depende de la unión seleccionada y del examen radiográfico que se realice según se indica en el código de diseño. Existen diferentes tipo de unión soldadas, sin embargo la bibliografía indica que los exámenes radiográficos completos solo se permiten en soldaduras a tope. En la Tabla 5 se muestran los valores de la eficiencia de soldadura dependiendo del grado del examen radiográfico y del tipo de unión. (5)

Tabla 5. Eficacias de la soldadura (5)

Tipo de unión	Grado de examen radiográfico		
	Completo	Medio	Ninguno
Unión con soldadura doble a tope	1,0	0,85	0,7
Unión con soldadura simple a tope	0,9	0,8	0,65

Por último, se selecciona el factor de corrección por corrosión que se aplicará al espesor mínimo. En concreto tanto para el reactor R-101 como para la columna de destilación T-202, se añadirán 4 mm al espesor de la carcasa, ya que se ha considerado que como se trabaja con un material que no tiene una compatibilidad excelente con el anhídrido acético, se aplica el principio de prevención y se selecciona el caso más restrictivo.

### 3.4. Tipos de cabezales

Existen distintos tipos de cabezales y cierres para cubrir la parte superior e inferior de los recipientes. Los más utilizados, junto a algunas de sus características, se listan a continuación y se muestran en la Figura 4:

- **Cabezal plano:** Cabezal con el menor coste de construcción y solo recomendables para equipos de presiones bajas y de diámetro pequeño. (5)
- **Cabezal hemisférico:** Utilizados en recipientes con presiones de operación elevadas. Tiene un mayor volumen interno y su espesor es la mitad que el de la carcasa, pero su coste de construcción es elevado en comparación con los demás. (5)
- **Cabezal elíptico:** Es más económico que el hemisférico, tiene menor volumen interno y es el más utilizado a presiones mayores a 15 bar. Su espesor es igual al de la carcasa (5)
- **Cabezal torisférico:** Los más habituales en condiciones de operación de hasta 15 bar. Se pueden utilizar para mayores presiones, pero su precio debe ser comparado con uno elíptico equivalente. (5)

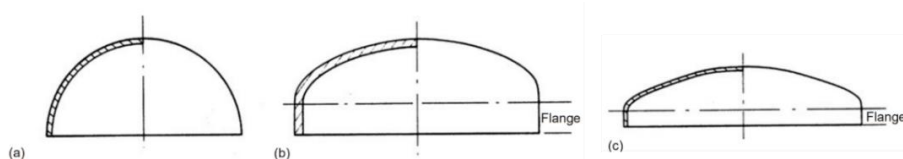


Figura 4. Cabezales hemisférico (a), elíptico (b) y torisférico (c).

Se determina el espesor del cabezal plano mediante la *Ecuación 9*. Aunque este tipo de cabezal no será seleccionado ya que son preferiblemente empleados para cubrir vías de acceso o en canales de intercambiadores de calor. (5)

$$t = D_i \sqrt{\frac{C \cdot P_d}{S \cdot E}} \quad [9]$$

Donde C es una constante que depende de la unión entre el cabezal y la carcasa, y su valor varía entre 0,1 y 0,3. Para estimar el espesor se seleccionará 0,3.

Por otro lado, se calcularán los espesores para los tres cabezales abombados y se comparan los resultados obtenidos. Para el cabezal hemisférico se utilizará la *Ecuación 10*, para el elíptico la *Ecuación 11* y para el torisférico la *Ecuación 12*. En esta última ecuación  $R_c$  se corresponde con el radio de la corona que se asume que es igual al diámetro interno de la columna.

$$t = \frac{P_d \cdot D_i}{4 \cdot S \cdot E - 0,4 \cdot P_d} \quad [10]$$

$$t = \frac{P_d \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P_d} \quad [11]$$

$$t = \frac{0,885 \cdot P_d \cdot R_c}{S \cdot E - 0,1 \cdot P_d} \quad [12]$$

### 3.5. Análisis de cargas

Además de la carga a la que están sometidos los equipos por parte de la propia presión de operación, existen otras cargas que afectan al recipiente. Por lo que se ha de realizar el diseño para que sea capaz de soportar la combinación de todas estas sin que llegue a colapsar.

#### 3.5.1. Cargas por peso

Una de las cargas principales que afecta de forma directa al equipo es la carga debida al peso máximo del propio recipiente, en condiciones de operación y en condiciones de prueba hidráulica. Estas cargas son distintas para los dos equipos que son objeto de estudio.

Una de las cargas comunes para ambas unidades es el peso del recipiente cilíndrico con cabezales abombados que se calcula mediante la *Ecuación 13*.

$$W_v = C_w \cdot \pi \cdot \rho_m \cdot D_m \cdot g \cdot (H_v + 0,8 \cdot D_m) \cdot t \quad [13]$$

Siendo:

- $W_v$ : Peso total de la carcasa vacía (N).
- $C_w$ : Coeficiente que tiene en cuenta el número de accesorios internos. Para el reactor al haber pocos se toma un valor de 1,08, en cambio para la columna se selecciona un valor de 1,15.

- $\rho_m$ : Densidad del material ( $\text{kg/m}^3$ ).
- $D_m$ : Diámetro medio del recipiente calculado como  $D_i + t$  (m).
- $t$ : Espesor del recipiente (m).
- $H_v$ : Longitud de la sección cilíndrica (m).
- $g$ : Aceleración de la gravedad ( $\text{m/s}^2$ ).

El resto de las cargas debidas al peso son distintas para cada uno de los equipos, dependiendo de los internos, los fluidos de su interior o del sistema de refrigeración. En la Tabla 6 se indican las cargas específicas que serán determinadas para cada uno de los equipos en sus respectivas Partes en el *Anexo II. Cálculos justificativos*.

Tabla 6. Peso del recipiente vacío

Cargas	Reactor R-101	Columna T-202
Carga por prueba hidráulica	-	x
Peso de los fluidos	x	-
Peso de los internos	x	x
Peso de la camisa	x	-
Peso del aislante	x	x

En conclusión, la carga total a la que están sometido los equipos en las condiciones de operación se corresponde con la suma de todas las cargas descritas anteriormente. Se utiliza la *Ecuación 14*.

$$W_{total} = \sum W_i \quad [14]$$

### 3.5.2. Cargas por viento

Los equipos a diseñar tienen alturas elevadas, y, como están situados al aire libre, se ve necesario tener en cuenta las cargas por viento, pues estas afectan de manera directa a la estructura. (5)

En primer lugar es necesario calcular la presión ejercida por el viento, es decir, la carga a la que está sometida por unidad de área. Para ello se utiliza la *Ecuación 15*. (5)

$$P_w = 0,05 \cdot u_w^2 \quad [15]$$

Siendo  $P_w$  la presión del viento en  $\text{N/m}^2$  y  $u_w$  la velocidad del viento en  $\text{km/h}$ .

En el código *ASME BPV Sec. VIII D.1* se indica que se debe tomar un valor para la velocidad del viento de  $140 \text{ km/h}$ , pero como se trabaja en una zona con poca presencia de viento no se utilizará un valor tan elevado. En el apartado *6.1. Climatología del Impacto ambiental del Documento III. Estudios con entidad propia* se explica que la velocidad media en la zona es de unos  $40 \text{ km/h}$  y que no se superan nunca a lo largo del año los  $60 \text{ km/h}$ . Para ponerse en el peor de los casos se tomará un valor de la velocidad de  $100 \text{ km/h}$ .

Seguidamente, se calcula la carga de viento por unidad de longitud,  $W$ , con la *Ecuación 16*. Para ello será necesario determinar primero el diámetro efectivo,  $D_{eff}$ . Este diámetro varía dependiendo del equipo. Para el Reactor R-101 se determina empleando la *Ecuación 17* y para la columna de destilación T-202 se emplea la *Ecuación 18*.

$$W = P_w \cdot D_{eff} \quad [16]$$

$$D_{eff} = D_i + 2 \cdot t + d_{camisa_{interno}} + 2 \cdot t_{camisa} + 2 \cdot t_{aislante} \quad [17]$$

$$D_{eff} = D_i + 2 \cdot t + 2 \cdot t_{aislante} \quad [18]$$

Finalmente, se calcula el momento flector al que se está sometido la torre con la *Ecuación 19*. Para ello se asume que se comporta como una viga en voladizo.

$$M_x = \frac{W \cdot x^2}{2} \quad [19]$$

Donde  $x$  se corresponde con la altura del equipo desde el suelo, es decir, contando con el soporte (m), y  $M$  al momento flector (N·m).

### 3.5.3. Otras cargas

No se tendrán en cuenta la acción de otras cargas, como por ejemplo la carga por sismicidad, ya que como se comentó en el apartado 6.2. *Sismología del Impacto ambiental del Documento III. Estudios con entidad propia*, la sismicidad de la zona no es significativa.

### 3.5.4. Análisis de tensiones

En este apartado se tratarán los esfuerzos principales que afectan a los recipientes cilíndricos por las cargas debidas al peso y viento, mencionadas en el apartado anterior.

#### 3.5.4.1. Esfuerzos primarios

Los esfuerzos radiales y longitudinales ejercidos por la presión interna se calculan mediante la *Ecuación 20* y la *Ecuación 21*, respectivamente. (5)

$$\sigma_r = \frac{P_i \cdot D_i}{2 \cdot t} \quad ; \quad \sigma_l = \frac{P_i \cdot D_i}{4 \cdot t} \quad [20, 21]$$

Donde  $P_i$  es la presión de diseño del recipiente (N/m<sup>2</sup>),  $D_i$  el diámetro interno del recipiente (m),  $t$  el espesor del recipiente (m),  $\sigma_r$  el esfuerzo radial (N/m<sup>2</sup>) y  $\sigma_l$  el esfuerzo longitudinal (N/m<sup>2</sup>).

Posteriormente se calculará el esfuerzo directo,  $\sigma_w$ , provocado por el peso total del recipiente. Tendrá un valor positivo si se trata de un esfuerzo de expansión y negativo si es de compresión; en esta caso será de compresión. Se utiliza la *Ecuación 22*. (5)

$$\sigma_w = \frac{W_{total}}{\pi \cdot (D_i + t) \cdot t} \quad [22]$$

Por último, se determinan los esfuerzos de flexión,  $\sigma_b$ , que afectan al recipiente y están provocados por las cargas de viento debido a la elevada altura de los mismos. Estos pueden ser extensivos o compresivos y se calculan con la *Ecuación 23*.

$$\sigma_b = \pm \frac{M_x}{I_v} \cdot \left(\frac{D_i}{2} + t\right) \quad [23]$$

Siendo  $I_v$  el segundo momento del área del recipiente sobre el plano de flexión ( $m^4$ ). Dado por la *Ecuación 24*.

$$I_v = \frac{\pi}{64} \cdot ((D_i + 2 \cdot t)^4 - D_i^4) \quad [24]$$

#### 3.5.4.2. Esfuerzos principales

Para el cálculo de los esfuerzos principales se aplican las Ecuaciones 26, 27 y 28. Estos se calculan en función del valor del esfuerzo longitudinal total, *Ecuación 25*, y del valor de la tensión radial. Los esfuerzos de flexión pueden ser positivos o negativos, por tanto, se calcularán dos esfuerzos longitudinales totales dependiendo de este factor.

$$\sigma_z = \sigma_L + \sigma_w \pm \sigma_b \quad [25]$$

Una vez conocido ya se pueden determinar los esfuerzos principales. Cabe destacar que el esfuerzo de torsión no suele ser significativo, por lo que se despreciará del cálculo. Además, el tercer esfuerzo principal es compresivo. (5)

$$\sigma_1 = \frac{1}{2} \cdot \left[ \sigma_r + \sigma_z + \sqrt{(\sigma_r - \sigma_z)^2 + 4 \cdot \tau^2} \right] \quad [26]$$

$$\sigma_2 = \frac{1}{2} \cdot \left[ \sigma_r + \sigma_z - \sqrt{(\sigma_r - \sigma_z)^2 + 4 \cdot \tau^2} \right] \quad [27]$$

$$\sigma_3 = 0,5 \cdot P_i \quad [28]$$

#### 3.5.4.3. Intensidad de esfuerzo permisibles

La intensidad de esfuerzo máxima en cualquier punto de los equipos se obtiene como el valor máximo resultante entre las *Ecuaciones 29, 30 o 31*.

$$\sigma_1 - \sigma_2 \quad [29]$$

$$\sigma_1 - \sigma_3 \quad [30]$$

$$\sigma_2 - \sigma_3 \quad [31]$$

Una vez calculados, se debe verificar que el esfuerzo máximo permisible sea superior a esta intensidad máxima. Si este hecho se cumple se puede confirmar que el espesor seleccionado para el reactor es adecuado para soportar las tensiones.

#### 3.5.4.4. Esfuerzos compresivos y estabilidad elástica

Cuando el esfuerzo axial resultante,  $\sigma_z$ , es compresivo, puede producirse una inestabilidad elástica dando lugar a que se produzca pandeo. Por tanto, es indispensable comprobar que es el esfuerzo máximo de compresión en la carcasa del equipo no sea mayor al esfuerzo crítico de compresión, es decir, se debe cumplir la *Ecuación 32*.

$$\sigma_w + \sigma_b < \sigma_c \quad [32]$$

El esfuerzo de pandeo crítico se puede determinar empleando la *Ecuación 33*, que implementa un factor de seguridad de 12.

$$\sigma_c = 2 \cdot 10^4 \cdot \left(\frac{t}{D_o}\right) \quad [33]$$

### 3.6. Selección del soporte

La elección del tipo de soporte para el recipiente dependerá de diversos factores como su tamaño, forma, peso, temperatura o presión de diseño, entre otros. Es de vital importancia que los soportes resistan las cargas a las que está sometido el equipo, que a su vez provocarán cargas localizadas en la pared del soporte, por ende se debe verificar que la tensión originada sea menor a la máxima permisible. (5)

Un factor fundamental a la hora de seleccionar el soporte es la orientación del recipiente. En ambos casos, los equipos tendrán orientación vertical, ya que según heurísticas es lo recomendado si se superan los 38 m<sup>3</sup> de volumen. (6)

Para recipientes con esta orientación se utilizan principalmente soportes de falda o soportes de abrazaderas. Los primeros se utilizan para columnas altas sometidas a cargas por viento, y su gran ventaja es que no generan cargas concentradas en la carcasa del equipo, cosa que no cumple el segundo soporte nombrado. Por tanto, el tipo falda será el tipo de soporte seleccionado, ya que las ventajas que presenta son óptimas para el reactor y la columna de destilación que se han de diseñar. Existen dos diseños de falda como se ve en la Figura 6. (5)

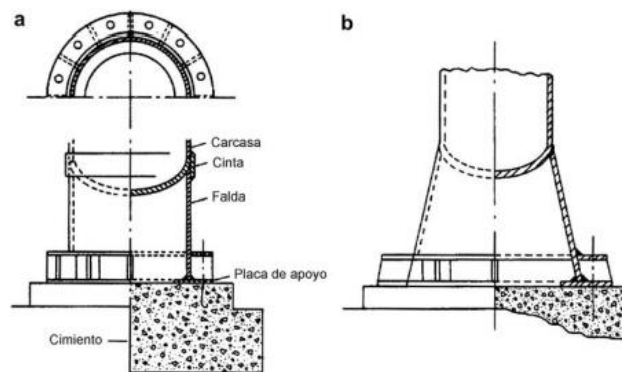


Figura 5. Soporte de tipo falda recto (a) y cónica (b) (5)

Se seleccionará una falda recta y el material utilizado será el mismo que para el del recipiente, acero inoxidable 316. Además, la altura habitual para este tipo de soportes está entre 3 y 5 metros sobre el nivel de los cimientos (6). Esto se debe a que, por seguridad, se precisa de un espacio mínimo para que los operarios pueden acceder a la parte baja del equipo. Asimismo, es necesario un espacio para las conducciones que abandonan las torres por esa misma zona.

Por otro lado, los tipos de soldadura falda-carcasa más habituales se observan en la Figura 7. Se escogerá la soldadura a ras por ser la más utilizada en el diseño de este tipo de faldas.

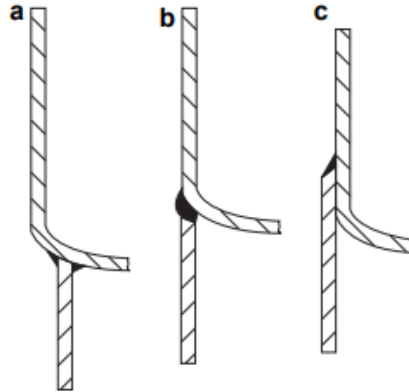


Figura 6. Soldaduras: a) de cabezal inferior b) a ras de la carcasa c) al exterior de la carcasa (5)

Como ya se comentó, es necesario asegurar que el espesor de la falda sea capaz de aguantar las tensiones que hay sobre la misma. Los esfuerzos de flexión se calculan con la Ecuación 35 y los producidos por el peso sobre la falda con la Ecuación 36.

$$\sigma_{bs} = \frac{4 \cdot M_s}{\pi \cdot (D_s + t_{sk}) \cdot t_{sk} \cdot D_s} \quad [35]$$

Siendo  $\sigma_{sb}$  el esfuerzo de flexión en la falda ( $\text{N/m}^2$ ),  $M_s$  el momento flector en la base del soporte ( $\text{N}\cdot\text{m}$ ),  $D_s$  el diámetro interno de la falda, que es igual al diámetro externo del equipo (m), y  $t_{sk}$  el espesor del soporte (m), que según bibliografía (7) no debe ser menor a 6 mm.

$$\sigma_{ws} = \frac{W_{total}}{\pi \cdot (D_s + t_{sk}) \cdot t_{sk}} \quad [36]$$

Donde  $\sigma_{ws}$  es el esfuerzo de compresión en la falda en  $\text{N/m}^2$ .

A continuación se determinan los esfuerzos resultantes utilizando la Ecuación 37 y 38.

$$\sigma_{tensión} = \sigma_{bs} - \sigma_{ws} \quad [37]$$

$$\sigma_{compresión} = \sigma_{bs} + \sigma_{ws} \quad [38]$$

Para obtener el espesor de la carcasa se deberá suponer un valor inicial y recalculer hasta que se cumplan las condiciones especificadas en la Ecuación 39 y en la Ecuación 40. Por el principio de prevención de riesgos se decide seleccionar un examen radiográfico total, por lo que E tendrá un valor de 1.

$$\sigma_{tensión} < S \cdot E \cdot \text{sen}\theta \quad [39]$$

$$\sigma_{compresión} < 0,125 \cdot E_Y \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) \cdot \text{sen}\theta \quad [40]$$

Siendo S el esfuerzo máximo permisible (N/m<sup>2</sup>) y E<sub>Y</sub> el módulo de Young del material del soporte (N/m<sup>2</sup>), que para el acero inoxidable tiene un valor de 1,93·10<sup>11</sup> Pa. (8) Por último,  $\theta$  es el ángulo de la base de la falda, normalmente entre 80° (falda cónica) y 90° (falda recta).

Por último, las cargas que afecten al recipiente podrían hacerlo volcar por lo que la selección del anillo base es crucial. En la Figura 8 se muestran los tres más comunes. Se decide seleccionar el anillo doble fijado con fuelle por ser el recomendado para columnas grandes. (5)

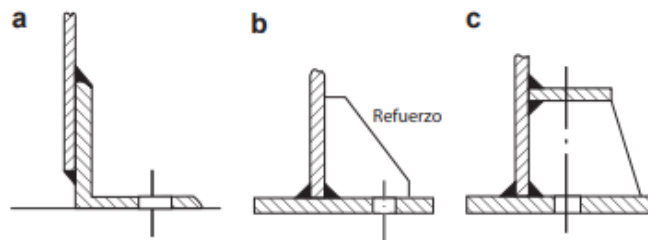


Figura 7. a) Anillo de ángulo enrollado b) Anillo de placa única con refuerzo c) Anillo de placa doble con refuerzo (5)

### 3.7. Tubuladuras, conexiones y compensación de aperturas

Todo equipo industrial cuenta con una serie de aberturas que se emplean para conectar las corrientes de entrada y salida de los mismos, para las bocas de hombre que permiten acceder a los operarios al interior del recipiente o para permitir instalar los instrumentos de control.

En los bordes de estos agujeros el efecto de las tensiones es mucho mayor que en el resto del recipiente. Para compensar el efecto se requiere de un refuerzo que puede ser de distintos tipos como se muestra en la Figura 9.

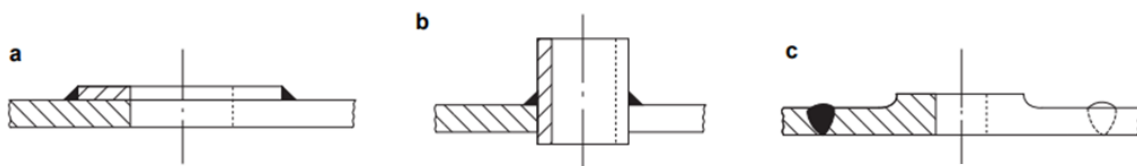


Figura 8. Tipo de compensación para aberturas: a) Asiento soldado b) Boquilla interior c) Anillo con bridas (5)

Seleccionar un tipo de abertura u otro dependerá de sus ventajas y desventajas. La de asiento soldado es la más simple y económica pero en algunas circunstancias puede sufrir un estrés térmico elevado. La interior cuenta con una zona que sobresale, lo que es muy beneficioso para las conexiones pero suele acumular mucha suciedad que podría desencadenar en corrosión. Por último estaría el anillo con bridas, que es el más efectivo pero el más caro. (5)

Considerando los pros y contras de las tres opciones, se decide que tanto para el reactor como la columna de destilación irán instalados con las aberturas de asiento soldado.

El ‘método de áreas iguales’ se emplea para calcular la cantidad de refuerzo requerida. Para la abertura de asiento soldado se sigue lo indicado en la Figura 10. (9)

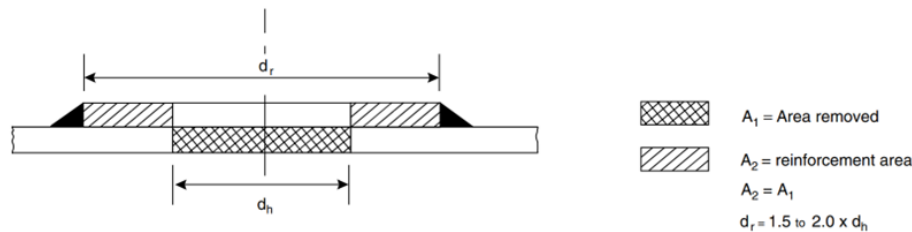


Figura 9. Método de áreas iguales para la abertura de asiento soldado (9)

Por último, mencionar la importancia de las bridas, que son el dispositivo de unión entre las tuberías y las aberturas. En la Figura 11 se muestran cuatro ejemplos de ellas.

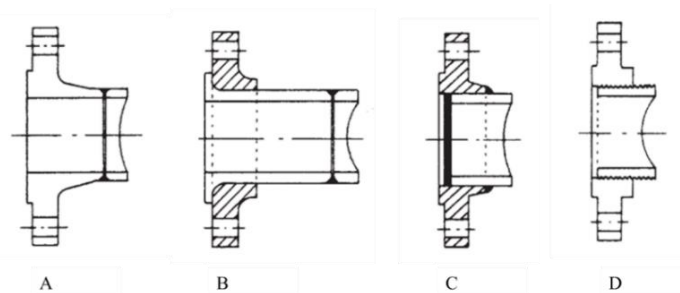


Figura 10. Tipos de bridas: A) Cuello para soldar, B) Deslizamiento, C) Con solapa y D) Roscada (9)

Al igual que las aberturas, cada tipo presenta una serie de ventajas y desventajas y seleccionar un tipo u otro dependerá de las condiciones de operación, factores económicos e intereses del proceso. A efectos del presente proyecto no serán diseñadas, pero a continuación se presenta una breve descripción de cada una de ellas: (9)

- Cuello para soldar: Reducen esfuerzos y son ideales para condiciones extremas de temperatura o vibración.
- Deslizamiento: Son económicas y fáciles de instalar pero la resistencia a carga y vibración no es buena.
- Con solapa: También económicas y fáciles de instalar. Generalmente su uso se extiende para ensamblado con tuberías de acero inoxidable.
- Roscadas: Se usan para conectar elementos que con rosca que no se pueden soldar.

Existe otro tipo de brida, llamada brida ciega, que consta de una placa plana que se usa para las bocas de hombre, que son agujeros por los que se tiene acceso al interior de los equipos para inspecciones o requerimientos varios. (7)

## 4. Bibliografía

1. **ASHBY, M. F.** *Materials Selection in Mechanical Design*. Oxford : Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. ISBN 0 7506 6168 2.
2. **VYC INDUSTRIAL.** vycindustrial. [En línea] 2018. [Citado el: 3 de Abril de 2024.] <https://vycindustrial.com/tabla-compatibilidad-materiales-fluidos/?idioma=es>.
3. **VERSA-MATIC.** Chem Guide. *Materials Compatibility Guide*. [En línea] [Citado el: 3 de Abril de 2024.] <https://www.hallmach.co.nz/wp-content/uploads/2021/04/Chemical-Compatibility-Chart.pdf>.
4. **GRACO.** Chemical Compatibility Guide. [En línea] 7 de Febrero de 2013. [Citado el: 18 de Mayo de 2024.] [https://www.graco.com/content/dam/graco/ipd/literature/misc/chemical-compatibility-guide/Graco\\_ChemCompGuideEN-B.pdf](https://www.graco.com/content/dam/graco/ipd/literature/misc/chemical-compatibility-guide/Graco_ChemCompGuideEN-B.pdf).
5. **SINNOTT, R. K. y TOWLER, G.** *Diseño en Ingeniería Química*. 5ª ed. Barcelona : Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
6. **TURTON, R., y otros.** *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 3ª ed. Boston : Pearson Education, Inc., 2009. ISBN 978-0-13-512966-1.
7. **COULSON, J. M., SINNOTT, R. T. y RICHARDSON, J. F.** *Chemical Engineering*. Oxford : Pergamon Press, 1983. Vol. 6. ISBN 0-08-022969-7.
8. **GNEE GARDEN.** china-stainless-steels.com. [En línea] [Citado el: 11 de Junio de 2024.] <https://es.china-stainless-steels.com/stainless-steel-plate/aisi-316-grade-stainless-steel-uns-s31600.html>.
9. **COULSON, J. M., SINNOTT, R. K. y RICHARDSON, J. F.** *Chemical Engineering Desing*. 4ª ed. 2005. Vol. 6. ISBN 0-7506-6538-6.

---

**PARTE B:**

**Reactor R-101**

---

## Índice

1.	Introducción.....	1
2.	Química del proceso.....	1
3.	Modelo cinético.....	3
4.	Condiciones de operación y sistema catalítico.....	4
5.	Consideraciones previas al diseño.....	6
6.	Tipos de reactores Gas-Líquido.....	6
6.1.	Determinación de la etapa limitante de la reacción.....	7
6.2.	Selección del tipo de reactor.....	8
6.3.	Reactor de burbujeo.....	9
7.	Cálculos previos.....	10
7.1.	Viscosidad.....	10
7.2.	Difusividad.....	11
7.3.	Densidad.....	12
7.4.	Tensión superficial.....	12
7.5.	Calor específico.....	13
7.6.	Conductividad térmica.....	13
8.	Balance de materia.....	14
8.1.	Determinación del volumen del líquido en el reactor.....	15
9.	Balance de energía.....	16
9.1.	Cálculo de la entalpía de reacción.....	16
9.2.	Cálculo del calor de reacción.....	18
10.	Dimensionamiento del reactor.....	19
10.1.	Volumen del gas.....	19
10.1.	Volumen total.....	19
11.	Hidrodinámica del proceso.....	21
11.1.	Regímenes de flujo.....	21
11.2.	Diámetro de la burbuja.....	22
11.3.	Área interfacial y coeficiente de transferencia de materia.....	22

11.4.	Velocidades de subida de la burbuja.....	23
12.	Distribuidor de gas .....	24
12.1.	Tipos y selección de distribuidor .....	24
12.2.	Diseño del distribuidor.....	25
13.	Caída de presión.....	25
13.1.	Caída de presión en la columna .....	25
13.2.	Caída de presión en el distribuidor y en la malla.....	26
14.	Sistema de refrigeración.....	26
14.1.	Selección de la camisa .....	27
14.2.	Dimensiones de la camisa.....	29
14.3.	Estimación del caudal de refrigerante.....	30
14.4.	Comprobación del coeficiente global de transferencia de calor .....	32
14.5.	Caída de presión en la camisa.....	34
15.	Aislante .....	34
16.	Selección del material .....	37
16.1.	Reactor R-101 .....	37
16.2.	Camisa .....	38
17.	Diseño mecánico del reactor .....	38
17.1.	Presión y temperatura de diseño .....	38
17.2.	Espesor de la columna de burbujeo .....	39
17.3.	Espesor de la camisa de refrigeración.....	41
17.4.	Selección y dimensionado de los cabezales.....	41
17.5.	Análisis de cargas .....	42
17.5.1.	Cargas por peso.....	42
17.5.2.	Cargas por viento .....	44
17.5.3.	Análisis de tensiones .....	44
17.6.	Selección del soporte .....	46
17.7.	Tubuladuras conexiones y compensación de aperturas .....	47
18.	Válvula de alivio .....	47

18.1.	Dimensionamiento de la válvula.....	48
19.	Hoja de especificaciones .....	50
20.	Bibliografía .....	50

## 1. Introducción

El reactor es la parte clave del proceso ya que es donde se lleva a cabo la conversión de las materias primas para obtener el producto deseado. En este Anexo se procede al diseño del reactor R-101.

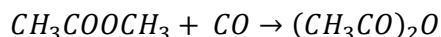
A continuación en la Tabla 1 se muestran una serie de abreviaturas para las sustancias químicas que intervienen en el proceso.

Tabla 1. Abreviatura de sustancias químicas

Sustancia	Abreviatura
Acetato de metilo	MeOAc
Monóxido de carbono	CO
Anhídrido acético	(Ac) <sub>2</sub> O
Ácido acético	AcOH
Yoduro de metilo	MeI o CH <sub>3</sub> I
Yoduro de litio	LiI
Hidrógeno	H <sub>2</sub>
Cloruro de carbonilo de rodio	Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>
poli(4-vinilpiridina)	PVP

## 2. Química del proceso

La reacción de carbonilación del acetato de metilo para dar anhídrido acético se corresponde con la siguiente reacción química.



Sin embargo, esta reacción sucede en presencia de un catalizador líquido que, en concreto en este sistema, se corresponde con un complejo organometálico. Estos complejos solubles pueden ser de distintos metales de transición y en este proceso catalítico se emplea rodio. El rodio proviene del cloruro de carbonilo de rodio, Rh<sub>2</sub>(CO)<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub>, que en la disolución catalítica forma enlaces con carbonos dando lugar al complejo organometálico, que en este caso es el [Rh(CO)<sub>2</sub>I<sub>2</sub>]<sup>-</sup>. (1)

Por tanto, este será un mecanismo de reacción complejo y será un ciclo catalítico, ya que una característica principal de los catalizadores es que son regenerables, es decir, no se consumen. En la Figura 1 está representado el ciclo completo. Como se puede ver, además del catalizador y los reactivos, en el mecanismo intervienen otros promotores de la reacción, como son el yoduro de metilo y el yoduro de litio.

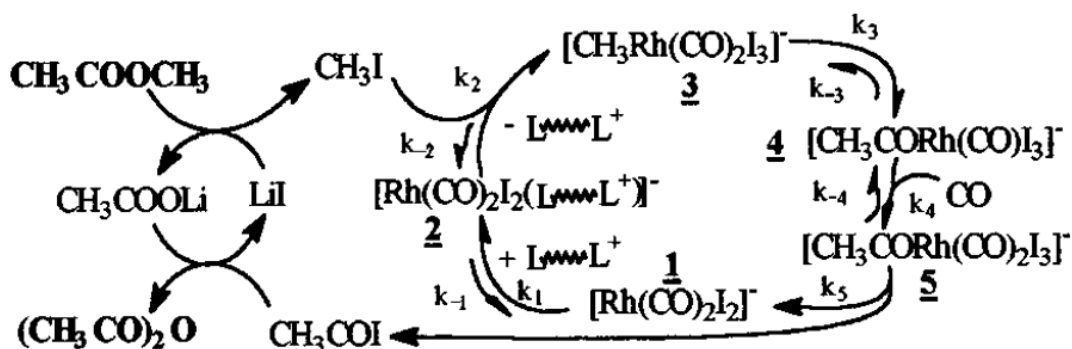
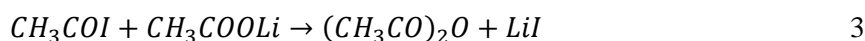
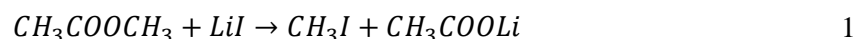


Figura 1. Ciclo catalítico de la carbonilación (2)

En este proceso, en primer lugar, el acetato de metilo es convertido a yoduro de metilo por una reacción estequiométrica con el yoduro de litio. A continuación, el MeI reaccionará con el monóxido de carbono dando lugar al  $\text{CH}_3\text{COI}$  que en presencia del  $\text{CH}_3\text{COOLi}$ , formado en la primera reacción, dará lugar al anhídrido acético, regenerando el LiI. (1)



Pero como se mostró en la Figura 1 la reacción 2 no ocurre de manera directa, sino que se lleva a cabo a través de los ligandos del complejo metálico. Este ciclo del catalizador tiene varios pasos que se explican a continuación:

- 1-2: Adición de un ligando, en este caso de poli(4-vinilpiridina) que da estabilidad al complejo catalítico  $[\text{Rh}(\text{CO})_2\text{I}_2]^-$ , aumentando su tiempo de vida.
- 2-3: Adición oxidante donde se rompe el enlace sigma del MeI y se añade al complejo metálico  $[\text{Rh}(\text{CO})_2\text{I}_2(\text{L}^+)]^-$  que pierde el ligando de PVP.
- 3-4: Inserción de grupo carbonilo entre un enlace de metilo y rodio formándose el compuesto  $[\text{CH}_3\text{CORh}(\text{CO})\text{I}_3]^-$ .
- 4-5: Coordinación de una molécula de carbonilo para dar lugar al compuesto metálico  $[\text{CH}_3\text{CORh}(\text{CO})_2\text{I}_3]^-$ .
- 5-1: Eliminación reductora, donde se elimina del complejo un acetilo y un yodo, que se unen formando el yoduro de acetilo y se vuelve a formar el complejo organometálico inicial, comenzando el ciclo de nuevo.

Además de los compuestos citados anteriormente, que como se ha explicado intervienen de forma directa en la reacción, es necesario la utilización de una sustancia química que influye directamente en la actividad del catalizador: el hidrógeno.

La presencia del hidrógeno es necesaria para generar y mantener la forma activa del catalizador. Si el H<sub>2</sub> no estuviera presente aparecería una forma del compuesto metálico de rodio que no interviene en las reacciones de carbonilación, el [Rh(CO)<sub>2</sub>I<sub>4</sub>]. Se recomienda que la concentración a la entrada de la alimentación en fase gas sea mayor que el 2% y menor del 7%, ya que un volumen mayor no tiene efectos significativos sobre la actividad del catalizador y fomentaría la aparición de reacciones secundarias. Habitualmente se emplea un 5%. (3) (4)

### 3. Modelo cinético

Según bibliografía la reacción es de primer orden respecto a la concentración de rodio y a la del promotor MeI. Por tanto, la reacción viene definida por la expresión cinética de la *Ecuación 1*. (2)

$$r_1 = k \cdot C_{Rh} \cdot C_{CH_3I} \quad [1]$$

Donde  $r_1$  es la velocidad de la reacción en kmol/(m<sup>3</sup>·s),  $k$  es la constante de velocidad de la reacción en m<sup>3</sup>/(kmol·s),  $C_{Rh}$  representa la concentración del rodio en el medio de reacción en kmol/m<sup>3</sup> y  $C_{CH_3I}$  es la concentración de yoduro de metilo en kmol/m<sup>3</sup>.

Cabe destacar que la constante  $k$  es una combinación de las constantes de las reacciones que intervienen en el mecanismo mostrado en la Figura 1 y que su expresión definida por la constantes de cada una de las reacciones individuales del mecanismo se muestran en la *Ecuación 2*.

$$k = \frac{k_1 \cdot k_2 \cdot k_3}{(k_{-1} + k_2) \cdot k_{-2}} \quad [2]$$

Donde cada una de las constantes señaladas se corresponde con las reacciones indicadas en la Figura 1.

Por tanto, la cinética de la reacción es de orden cero respecto al acetato de metilo y al monóxido de carbono. Esto solo sucede según bibliografía en el caso de trabajar con presiones superiores a los 15 bar, sino la cinética también dependería de la presión parcial del CO,  $P_{CO}$ , expresada en la *Ecuación 3*. (2)

$$r_1 = k^* \cdot C_{Rh} \cdot C_{CH_3I} \cdot P_{CO} \quad [3]$$

Este no será el caso de estudio, ya que la presión de operación del proceso será más elevada, como se indicará posteriormente en el apartado 4. *Condiciones de operación y sistema catalítico*. Por tanto, la cinética vendrá dada por la *Ecuación 1* y la constante de velocidad podrá ser deducida utilizando la Ley de Arrhenius como se indica en la *Ecuación 4*.

$$k = k_0 \cdot e^{\left(\frac{-E_a}{R \cdot T}\right)} \quad [4]$$

Donde:

- $k_0$ : Factor preexponencial ( $\text{m}^3/(\text{kmol}\cdot\text{s})$ ).
- $E_a$ : Energía de activación ( $\text{J/mol}$ ).
- $R$ : Constante de los gases ideales. Su valor es de  $8,314 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$ .
- $T$ : Temperatura de operación ( $\text{K}$ ).

Los parámetros propios de la reacción necesarios para la ecuación anterior se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2. Parámetros cinéticos (2)

$k_0$ ( $\text{m}^3/(\text{kmol}\cdot\text{s})$ )	$E_a$ ( $\text{kJ/mol}$ )
$2,8\cdot 10^6$	61,4

## 4. Condiciones de operación y sistema catalítico

Según bibliografía la temperatura de operación oscila entre los  $150 \text{ }^\circ\text{C}$  y los  $200 \text{ }^\circ\text{C}$  y se recomienda no pasar de esta temperatura ya que el catalizador tendería a reducirse hacia su metal, lo que provocaría una disminución de su actividad. La temperatura de operación más habitual en la industria es de  $175 \text{ }^\circ\text{C}$ , ya que a esta temperatura se alcanzan conversiones de hasta el 75% en acetato de metilo y se evita la formación de productos secundarios. Asimismo, una temperatura más elevada podría causar una evaporación parcial de la mezcla, perdiendo parte de las materias primas y del producto, que se irán por la parte superior del reactor en compañía del monóxido de carbono. Seleccionando esta temperatura se evita que ocurra ya que la temperatura de ebullición de la mezcla a las condiciones de operación según el simulador *Aspen HYSYS* con el paquete termodinámico *NRTL* es de  $252,1 \text{ }^\circ\text{C}$ . En conclusión, por las razones anteriores se ha optado por trabajar con un reactor isoterma a  $175 \text{ }^\circ\text{C}$ . (3) (5) (6)

Con respecto a la presión, como se comentó en el apartado anterior, según bibliografía el monóxido de carbono deja de afectar a la cinética a partir de presiones por encima de 15 bar, por lo que se recomienda trabajar a presiones superiores. Se han encontrado otras bibliografías donde se dice que la influencia del CO sigue siendo apreciable en la cinética hasta los 30 bar. Por tanto, y considerando que existen estudios del efecto de la presión desde los 10 a los 100 bar, se escogerá la presión de operación propia de la mayoría de los procesos industriales que será de 50 bar. Esta presión se considera adecuada, ya que a pesar de implicar un mayor coste en la construcción y operación del equipo, se evitan los posibles efectos del CO en la cinética y, además, se favorece la solubilidad del CO en el medio de reacción. (2) (3) (5)

En conclusión las condiciones del sistema se resumen en la Tabla 3.

Tabla 3. Condiciones de operación del reactor

<b>T</b>	<b>P</b>
(°C)	(bar)
175	50

Con respecto al sistema catalítico, se pueden emplear distintos metales que formen los complejos organometálicos. Los más habituales son el rodio y el níquel, aunque actualmente también se están llevando a cabo investigaciones con cobre. Se ha seleccionado el rodio, ya que es el más utilizado en la industria, porque proporciona cinéticas diez veces superiores a las del catalizador de níquel. (7)

Por otro lado, como la cinética de la reacción es de orden uno respecto al rodio y al yoduro de metilo, la cantidad de estas sustancias en el reactor será lo que determine la velocidad. Estos compuestos tienen precios muy elevados, por lo que será necesario encontrar un equilibrio entre el coste y la velocidad deseada. En este caso se utilizarán proporciones indicadas por bibliografía para conocer la cantidad adecuada de cada uno de los compuestos del sistema catalítico. En la Tabla 4 se indican los moles introducidos de cada sustancia por mol de acetato de metilo que se introduce en el reactor.

Tabla 4. Proporciones del sistema catalítico por cada mol de MeOAc (2)

	<b>Rh</b>	<b>LiI</b>	<b>CH<sub>3</sub>I</b>	<b>AcOH</b>
<b>Proporción respecto al MeOAc</b>	$\frac{0,002}{7}$	$\frac{0,18}{7}$	$\frac{2,65}{7}$	$\frac{2,4}{7}$

Además, como se ha comentado, el catalizador no se consume, por lo que las concentraciones de rodio y de yoduro de metilo permanecen prácticamente constantes en el reactor. Esto lleva a simplificar la Ecuación 1 en la Ecuación 5.

$$r_1 = k \cdot C_{Rh} \cdot C_{CH_3I} = k' \quad [5]$$

Finalmente, conociendo la temperatura del sistema, ya se puede calcular la constante cinética mediante la Ley de Arrhenius y, sabiendo las concentraciones del rodio y del MeI, se puede calcular la constante cinética simplificada. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 5.

Tabla 5. Constantes cinéticas

<b>k</b>	<b>C<sub>Rh</sub></b>	<b>C<sub>CH<sub>3</sub>I</sub></b>	<b>k'</b>
(m <sup>3</sup> /(kmol·s))	(kmol/ m <sup>3</sup> )	(kmol/ m <sup>3</sup> )	(kmol/ (m <sup>3</sup> ·s))
0,195	1,524·10 <sup>-3</sup>	2,019	6,003·10 <sup>-4</sup>

## 5. Consideraciones previas al diseño

Antes de comenzar con el diseño del equipo se explicarán una serie de consideraciones a tener en cuenta:

- Formación de alquitranes: Puede producirse debido a las altas temperaturas, que provocan la descomposición térmica del anhídrido acético. Según bibliografía el porcentaje de estos compuestos representa el 0,1% del anhídrido formado en el reactor, por lo que se producen en muy poca cantidad. Se ha decidido no tener en cuenta la aparición de estas sustancias, ya que afectan a la actividad del catalizador y, asimismo, la presencia del hidrógeno disminuye su aparición de manera drástica. (3) (4)
- Disolvente del catalizador: Se utiliza un disolvente para introducir el sistema catalítico, en este caso se selecciona el ácido acético, ya que favorece a la yodólisis del metil acetato. (8)
- Resistencia a la transferencia en fase gas: Se considera despreciable, ya que en los reactores que se van a mencionar la difusividad de los gases es varios órdenes de magnitud superior a la de los líquidos. Por esta razón, si la reacción es lenta, es posible despreciarla. (9)

## 6. Tipos de reactores Gas-Líquido

En el reactor R-101, la reacción de obtención de anhídrido acético a partir de metil acetato se corresponde con una reacción gas-líquido con un catalizador en fase líquida. La fase líquida está formada por el acetato de metilo, el anhídrido acético y el ácido acético recirculado, el catalizador y sus promotores; mientras que la fase gas está formada por una mezcla de 95% monóxido de carbono y 5% de hidrógeno.

En la industria existen distintos tipos de reactores gas-líquido dependiendo del contacto necesario entre las fases o de la etapa limitante de la reacción, ya sea la cinética o la transferencia de materia. Entre los más utilizados se encuentran los siguientes:

- Torre de relleno: Se utiliza un relleno para favorecer el contacto entre las fases. Son adecuadas para reacciones rápidas y con sustancias corrosivas, pero no son recomendables para caudales grandes de gas. (9)
- Torre de lluvia: En este caso el líquido es la fase dispersa, siendo introducida con boquillas desde la parte superior, y el gas es la fase continua. Es recomendable cuando la corriente gaseosa contiene sólidos. (9)

- Torre de platos: Se caracterizan por dividir la columna en varias etapas mediante platos. Recomendables para caudales de líquidos altos y para reacciones lentas que necesitan tiempos de contacto considerables. (9)
- Torre de burbujeo: Se caracterizan por estar completamente llenas de líquido, mientras el gas es dispersado mediante un plato perforado. Normalmente tienen relaciones altura/diámetro mayores a tres y son adecuadas para reacciones lentas, limitadas por la cinética, donde el componente clave se encuentra en estado líquido. (9)
- Tanque agitado: Se caracteriza por la utilización de agitadores mecánicos y por tener elevadas áreas interfaciales para el contacto gas-líquido. Asimismo, son adecuados para reacciones lentas. (9)

### 6.1. Determinación de la etapa limitante de la reacción

Para poder elegir entre los reactores previamente descritos se necesita saber la etapa limitante de la reacción. Para ello se utiliza el módulo de Hatta que es una relación entre la máxima conversión posible en la película con respecto a la máxima velocidad de transferencia del gas en el líquido en la película. Para una reacción de orden cero con respecto a ambos reactivos se determina mediante la *Ecuación 6*. (10)

$$Ha = \frac{1}{k_L} \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot k' \cdot D_{CO-L}}{C_{CO}^*}} \quad [6]$$

Donde  $k_L$  se corresponde con el coeficiente de transferencia de materia en la fase líquida,  $k'$  es la constante cinética de la *Ecuación 5* y  $C_{CO}^*$  es la concentración del monóxido en la interfase. Por último, el  $D_{CO-L}$  es la difusividad del monóxido de carbono en la mezcla líquida, que tiene un valor de  $2,08 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ , y cuyo cálculo se desarrolla en profundidad en el apartado *7. Cálculos Previos*.

La concentración del monóxido en la interfase se determina mediante la Ley de Henry, *Ecuación 7*, que relaciona dicha concentración con la presión parcial del CO,  $P_{CO}$ , a través de una constante. Esta constante, que se ha obtenido para las condiciones del medio, así como la concentración de CO resultante se muestran en la Tabla 6.

$$P_{CO} = H \cdot C_{CO}^* \quad [7]$$

Tabla 6. Concentración de CO obtenida mediante la Ley de Henry (11)

$P_{CO}$ (bar)	$P_{CO}$ (Pa)	H (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$C_{CO}^*$ (kmol/ m <sup>3</sup> )
47,5	4750000,0	9434,0	0,5

Como en un principio no se tiene determinado el valor del coeficiente de transferencia de materia en la fase líquida, se tomarán distintos valores bibliográficos para cada reactor y se analizarán los resultados obtenidos, que se muestran en la Tabla 7.

Tabla 7. Módulos de Hatta obtenidos para cada reactor (9)

	Valores mínimos		Valores máximos	
	$k_L$ (m/s)	Ha	$k_L$ (m/s)	Ha
Torre de lluvia	$0,7 \cdot 10^{-4}$	0,1	$1,5 \cdot 10^{-4}$	0,05
Torre de relleno	$0,4 \cdot 10^{-4}$	0,18	$2,0 \cdot 10^{-4}$	0,04
Torre de platos	$1,0 \cdot 10^{-4}$	0,07	$20,0 \cdot 10^{-4}$	$3,52 \cdot 10^{-3}$
Torre de burbujeo	$1,0 \cdot 10^{-4}$	0,07	$4,0 \cdot 10^{-4}$	0,02
Tanque agitado	$0,3 \cdot 10^{-4}$	0,23	$4,0 \cdot 10^{-4}$	0,02

Dependiendo del valor del módulo de Hatta obtenido se distinguen tres tipos de reacciones:

- Reacciones lentas: Si Ha es menor a 0,3 la reacción ocurre completamente o casi en su totalidad en el seno de la fase líquida. Por tanto, se recomienda trabajar con reactores con grandes volúmenes de líquido, como el reactor de burbujeo o el de tanque agitado. (9)
- Reacciones intermedias: Si Ha está entre 0,3 y 5 la reacción ocurre tanto cerca de la interfase como en el seno del líquido. En este caso se utilizan reactores de tanque agitado ya que proporcionan áreas interfaciales y volúmenes de líquido elevados. (9)
- Reacciones rápidas: Si Ha está por encima de 5 la reacción ocurre casi al completo en la película y no hay concentración del gas en el líquido. (9)

Como se presenta en la Tabla 7, todos los valores de los módulos de Hatta se encuentran por debajo de 0,3, indicando que se corresponde con una reacción lenta, donde la cinética es la etapa limitante. Por tanto, el reactor más favorable se corresponde con un reactor de burbujeo o un tanque agitado.

## 6.2. Selección del tipo de reactor

A continuación se comparan los reactores propuestos y se evalúa cuál de los dos es más apto para las condiciones de operación existentes. Las principales ventajas de un equipo respecto al otro se presentan en la Tabla 8.

Tabla 8. Ventajas de los reactores de burbujeo y de los tanque agitados (12)

Reactor de burbujeo	Tanque agitado
Proporciona mayor porcentaje de líquido	Mayores áreas interfaciales por la agitación
Necesario menor mantenimiento	Control de la temperatura más fácil
Mejores para presiones elevadas	Mayores coeficientes de transferencia de materia
Menor espacio de la base requerido	Menor altura
Consumo menos potencia ya que no requiere agitador	
No hay problemas de sellado	

En conclusión, se seleccionará una columna de burbujeo, ya que la reacción se lleva a cabo a una presión de 50 bar. Este hecho supone un gran problema para los reactores agitados mecánicamente, porque se pueden producir problemas en el sellado del agitador y, por tanto, no son recomendables para presiones de operación por encima de 40 bar. Asimismo, la necesidad de la utilización de un agitador provoca que haya un mayor consumo de energía, aumentando el coste de operación. En cambio, las torres de burbujeo son columnas prácticamente vacías donde la agitación se produce directamente por el ascenso de las burbujas, lo que supone que sean equipos mucho más económicos. (12)

### 6.3. Reactor de burbujeo

En los reactores de burbujeo el gas es normalmente introducido por la parte inferior, mientras que el líquido puede ser introducido por la parte superior o la inferior. En este caso se introducirá por la parte superior.

Por otro lado, existen diferentes diseños de las columnas de burbujeo. Está la columna simple, pero existen distintas modificaciones para reducir la retromezcla y la distribución no uniforme de las burbujas. En la Figura 2 se muestran las más habituales, pero se seleccionará la columna vacía por su simplicidad y su mejor coste, ya que como la cinética controla la reacción, mejorar la eficacia de la transferencia de materia con algún método no es necesario.

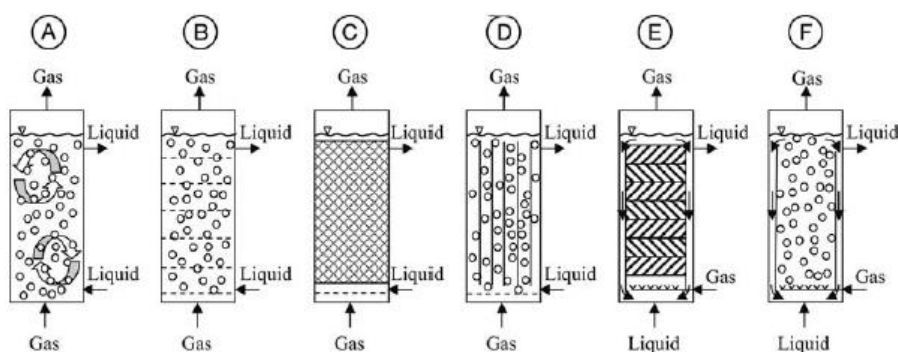


Figura 2. Diseños de columnas de burbujeo: A) Columna simple B) Columna en cascada C) Columna con lecho D) Columna de múltiples ejes E) Columna con mezcladores estáticos F) Reactor airlift-loop (7)

## 7. Cálculos previos

En esta apartado se determinarán propiedades para las mezclas líquidas y gaseosas necesarias para cálculos posteriores. En el caso de la mezcla líquida no se tendrán en cuenta el cloruro de carbonilo de rodio ni el yoduro de litio, ya que se encuentran en proporciones bajas.

Las fracciones másicas,  $w$ , y molares,  $x$ , de la mezcla líquida y gaseosa se muestra en la Tabla 9. Cabe destacar que como el flujo de líquido en el reactor se considera mezcla completa se indicarán las fracciones en el interior del reactor para el líquido. En cambio como el flujo de gas se considera un flujo ideal se indican las fracciones a la entrada del reactor.

Tabla 9. Fracciones de la mezcla líquida y gas

	Líquido		Gas	
	w	x	w	x
MeOAc	0,0957	0,1282	-	-
AcOH	0,1064	0,1758	-	-
Ac <sub>2</sub> O	0,5023	0,4886	-	-
MeI	0,2776	0,1941	-	-
LiI	0,0178	0,0132	-	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	0,0003	0,0001	-	-
CO	-	-	0,9962	0,95
H <sub>2</sub>	-	-	0,0038	0,05
Total	1	1	1	1

Las masas molares de las sustancias también son importantes para los cálculos, se presentan en la Tabla 10.

Tabla 10. Masas molares de las sustancias del medio de reacción

	MeOAc	AcOH	(Ac) <sub>2</sub> O	MeI	CO	H <sub>2</sub>
M (g/mol)	74,080	60,052	102,090	133,850	28,011	2,016

### 7.1. Viscosidad

Las viscosidades de las distintas sustancias se calculan mediante la Ecuación 7 y los coeficientes correspondientes se presentan en la Tabla 11. Para el MeI no se encuentran disponibles, por tanto se toma el valor de su viscosidad del simulador Aspen HYSYS. (13) (6)

$$\mu = e^{\left(C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 \cdot \ln(T) + C_4 \cdot T^{C_5}\right)} \quad [7]$$

Tabla 11. Coeficientes para la obtención de la viscosidad (13)

Sustancias químicas	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>
Acetato de metilo	13,557	-187,3	-3,6592	0	0
Ácido acético	-9,030	1212,3	-0,3220	0	0
Anhídrido acético	-20,457	1638,6	1,3834	0	0

Posteriormente, la viscosidad de la mezcla líquida,  $\mu_L$  (Pa·s), se calcula mediante la Ecuación 8. (13)

$$\ln(\mu_L) = \sum_i x_i \cdot \ln(\mu_i) \quad [8]$$

Por otro lado, la viscosidad de la mezcla gaseosa,  $\mu_g$ , se determina utilizando el simulador *Aspen HYSYS* en las condiciones de operación. (6)

Los resultados se muestran en la Tabla 12.

Tabla 12. Viscosidades de las sustancias y de las mezclas

	MeOAc	AcOH	(Ac) <sub>2</sub> O	MeI	$\mu_L$	$\mu_g$
$\mu$ (Pa·s)	$1,01 \cdot 10^{-4}$	$2,51 \cdot 10^{-4}$	$2,35 \cdot 10^{-4}$	$2,98 \cdot 10^{-4}$	$2,28 \cdot 10^{-4}$	$2,44 \cdot 10^{-4}$

Otro parámetro necesario será la viscosidad cinemática,  $\nu_L$ , de la mezcla líquida que se calculará empleando la Ecuación 9. Se obtiene un valor de  $2,11 \cdot 10^{-7}$  m<sup>2</sup>/s.

$$\nu_L = \frac{\mu_L}{\rho_L} \quad [9]$$

## 7.2. Difusividad

La difusividad del monóxido de carbono en los distintos líquidos se calculará mediante la Ecuación 10, donde  $\phi$  es un factor de asociación del disolvente, que en este caso tendrá el valor de 1; y  $V_m$  representa el volumen molar del soluto en el punto de ebullición, que para el monóxido de carbono toma un valor de 0,0307 m<sup>3</sup>/kmol. (14)

$$D = \frac{1,173 \cdot 10^{-13} \cdot (\phi \cdot M)^{0,5} \cdot T}{\mu_L \cdot V_m^{0,6}} \quad [10]$$

Posteriormente, la difusividad de la mezcla,  $D_{CO-L}$ , se calcula utilizando la Ecuación 11. (13)

$$D_{CO-L} \cdot \mu_L = \prod_{i=1}^n (D_{CO-i} \cdot \mu_i)^{x_i} \quad [11]$$

Los resultados obtenidos se presentan en la Tabla 13.

Tabla 13. Difusividad del CO en las sustancias y en la mezcla líquida

	MeOAc	AcOH	(Ac) <sub>2</sub> O	MeI	$D_{CO-L}$
$D$ (m <sup>2</sup> /s)	$3,62 \cdot 10^{-8}$	$1,31 \cdot 10^{-8}$	$1,82 \cdot 10^{-8}$	$1,70 \cdot 10^{-8}$	$2,08 \cdot 10^{-8}$

### 7.3. Densidad

Las densidades de los líquidos se calculan mediante la *Ecuación 12* y los coeficientes correspondientes se presentan en la Tabla 14. Para el MeI no están disponibles, por tanto se toma el valor de su viscosidad del simulador *Aspen HYSYS*. (6) (13)

$$\rho = \frac{C_1}{\left( C_2 \left[ 1 + \left( 1 - \frac{T}{C_3} \right)^{C_4} \right] \right)} \quad [12]$$

Tabla 14. Coeficientes para la determinación de las densidades (13)

Sustancias químicas	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>
Acetato de metilo	1,13000	0,25930	506,55	0,27640
Ácido acético	1,14486	0,25892	591,95	0,25290
Anhídrido acético	0,79388	0,24119	606,00	0,29817

Posteriormente, la densidad de la mezcla líquida,  $\rho_L$  (kg/m<sup>3</sup>), se calcula mediante la *Ecuación 13*.

$$\rho_L = \sum_i \rho_i \cdot x_i \quad [13]$$

Por otro lado para la densidad de los gases se utiliza la ley de los gases ideales, *Ecuación 14*, y posteriormente la de la mezcla,  $\rho_g$ , se calcula también con la *Ecuación 13*.

$$\rho_g = \frac{P \cdot M}{R \cdot T} \quad [14]$$

Los resultados se muestran en la Tabla 15.

Tabla 15. Densidades de las sustancias y de las mezclas

	MeOAc	AcOH	(Ac) <sub>2</sub> O	MeI	$\rho_L$	CO	H <sub>2</sub>	$\rho_g$
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	678,97	864,41	871,01	1742,00	1077,96	37,63	2,71	37,49

### 7.4. Tensión superficial

Las tensiones superficiales de los líquidos se calculan mediante la *Ecuación 15* y el paracoro de Sugden,  $P_{ch}$ , es una constante que depende de la estructura de la molécula y los valores correspondientes para cada sustancia se presentan en la Tabla 16. (14)

$$\sigma = \left[ \frac{P_{ch} \cdot (\rho_L - \rho_v)}{M} \right]^4 \cdot 10^{-12} \quad [15]$$

Tabla 16. Valores del paracoro de Sudgen (14)

	MeOAc	AcOH	(Ac) <sub>2</sub> O	MeI
<b>P<sub>ch</sub></b>	180,2	132,2	228,2	147,1

En este caso se desprecia la densidad del vapor saturado,  $\rho_v$ , ya que suele ser pequeña comparada con la de los líquidos. (14)

Posteriormente, la tensión de la mezcla líquida,  $\sigma$ , se calcula mediante la *Ecuación 16* y se obtiene un valor de 12,34 mN/m.

$$\sigma = \sum_i \sigma_i \cdot x_i \quad [16]$$

### 7.5. Calor específico

Los calores específicos de los líquidos se calculan mediante la *Ecuación 17* y los coeficientes correspondientes se presentan en la Tabla 17. Para el MeI no aparecen, por tanto se toma el valor del calor específico del simulador *Aspen HYSYS*. (13)

$$Cp_i = C_1 + C_2 \cdot T + C_3 \cdot T^2 + C_4 \cdot T^3 + C_5 \cdot T^4 \quad [17]$$

Tabla 17. Coeficientes para la determinación de los calores específicos (13)

Substancias químicas	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>
Acetato de metilo	61260	270,9	0	0	0
Ácido acético	139640	-320,8	0,8985	0	0
Anhídrido acético	260050	-565,43	1,1035	0	0

Posteriormente, el valor de la mezcla líquida,  $Cp_L$  (J/(kg·K)), se calcula mediante la *Ecuación 18*.

$$Cp_L = \sum_i Cp_i \cdot w_i \quad [18]$$

Los resultados obtenidos para los distintos líquidos y para la mezcla se muestran en la Tabla 18.

Tabla 18. Calores específicos de las sustancias y de la mezcla líquida

	MeOAc	AcOH	(Ac) <sub>2</sub> O	MeI	Cp <sub>L</sub>
<b>Cp (J/(kg·K))</b>	2465,22	2935,03	2235,58	795,53	1891,83

### 7.6. Conductividad térmica

Para determinar la conductividad térmica de los distintos líquidos se emplea la *Ecuación 19*. (14)

$$k_i = 3,56 \cdot 10^{-5} \cdot C p_i \cdot \left(\frac{\rho_i}{M_i}\right)^{1/3} \quad [19]$$

A continuación, la conductividad térmica de la mezcla líquida,  $k_m$  (W/(m·K)) se calcula mediante la *Ecuación 20*.

$$k_m = \sum_i k_i \cdot x_i \quad [20]$$

Los resultados obtenidos para los distintos líquidos y para la mezcla se muestran en la Tabla 19.

Tabla 19. Conductividades térmicas de las sustancias y de la mezcla líquida

	MeOAc	AcOH	(Ac) <sub>2</sub> O	MeI	$k_m$
k (W/(m·K))	0,12	0,22	0,14	0,11	0,15

## 8. Balance de materia

El balance de materia para el reactor ha sido desarrollado en profundidad en el *Anexo I. Balances de materia y energía*. No obstante, en este apartado se justificarán distintos parámetros que afectan de manera directa al balance de materia.

En primer lugar, como la reacción tiene lugar en la fase líquida, es necesario que el monóxido de carbono tenga una elevada solubilidad en el interior del reactor. Por esa razón, para asegurar que esta concentración sea constante en todo el medio de reacción se introducirá un exceso del mismo de un 50 %, que además es beneficioso para aumentar la velocidad de subida del gas favoreciendo el contacto entre las fases y aumentando la mezcla de la fase líquida.

Por otro lado, como se trata de una cinética de orden cero respecto a los reactivos, la cinética únicamente dependerá de la concentración de los catalizadores, y, como se explicó en el apartado 4. *Condiciones de operación y sistema catalítico*, esa proporción viene dada por bibliografía. Como los catalizadores no se consumen, las concentraciones del rodio y el yoduro de metilo se mantienen prácticamente constantes en el reactor, por lo que la cinética se puede convertir en un pseudo-cero orden. Esto significa que la conversión solo dependerá del tiempo que los reactivos estén en el interior de la columna.

La conversión en el reactor seleccionada ha sido del 75 %, ya que es la máxima que se puede alcanzar a nivel industrial en las condiciones de operación según bibliografía. Además, en estas condiciones solo se produce la aparición de un compuesto secundario, el diacetato de etilideno, que aparece por la presencia del hidrógeno. Esta reacción secundaria tendría una

selectividad menor al uno por ciento, por lo que debido a este valor tan bajo se ha decidido no considerarla y se asumirá una selectividad del 100 % respecto al acetato de metilo. (3)

Para terminar, en la Tabla 20 se presentan los caudales máscicos de las entradas y las salidas del reactor R-101. Se comprueba que se cumple el balance de materia.

Tabla 20. Balance de materia al reactor en flujos máscicos

Corrientes	Entradas		Salidas	
	Flujo máscico (kg/h)		Flujo máscico (kg/h)	
	C. 7 (líquido)	C. 10 (gas)	C. 13 (líquido)	C. 11 (gas)
MeOAc	12180,06	-	3045,02	-
AcOH	3385,24	-	3385,24	-
Ac <sub>2</sub> O	3400,26	-	15989,42	-
MeI	8834,89	-	8834,89	-
LiI	565,90	-	565,90	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	9,13	-	9,13	-
CO	-	6908,23	-	3454,12
H <sub>2</sub>	-	26,17	-	26,17
<b>Total</b>	<b>28375,48</b>	<b>6934,40</b>	<b>31829,60</b>	<b>3480,28</b>
<b>Comprobación del balance</b>	<b>35309,88</b>		<b>35309,88</b>	

Por último, en la Tabla 21 se recogen los caudales molares de entrada y salida.

Tabla 21. Balance de materia al reactor en flujos molares

Corrientes	Entradas		Salidas	
	Flujo molar (kmol/h)		Flujo molar (kmol/h)	
	C. 7 (líquido)	C. 10 (gas)	C. 13 (líquido)	C. 11 (gas)
MeOAc	164,42	-	41,10	-
AcOH	56,37	-	56,37	-
Ac <sub>2</sub> O	33,31	-	156,63	-
MeI	62,24	-	62,24	-
LiI	4,23	-	4,23	-
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	0,02	-	0,02	-
CO	-	246,63	-	123,31
H <sub>2</sub>	-	12,98	-	12,98
<b>Total</b>	<b>320,59</b>	<b>259,61</b>	<b>320,59</b>	<b>136,29</b>

### 8.1. Determinación del volumen del líquido en el reactor

Para determinar el volumen que está ocupado por la mezcla de líquido en el reactor es necesario conocer el patrón de flujo en el mismo.

Los patrones de flujo dentro de una columna de burbujeo pueden ser variados. Normalmente la fase líquida se aproxima a un patrón de flujo de mezcla completa ya que la mezcla provocada por el flujo de las burbujas es elevada. Por otro lado, el flujo del gas puede tratarse como un patrón de flujo en pistón o como una mezcla completa, aunque realmente la selección de uno u otro no supone un problema ya que, en este caso, se trata de una reacción de orden cero respecto a los reactivos. (15)

Para el cálculo del volumen del reactor se partirá de la expresión general de la conservación de la materia, *Ecuación 21*.

$$\text{Entrada} - \text{Salida} + \text{Generación} = \text{Acumulación} \quad [21]$$

En concreto, y como se tratará la columna de burbujeo como un reactor de mezcla completa, se puede utilizar la ecuación de diseño propia de los reactores de mezcla completa que se desarrolla a partir de los balances molares de los componentes, resultando en la *Ecuación 22*. En este caso se llevó a cabo el desarrollo de un balance de materia al acetato de metilo.

$$\frac{V_L}{F_{MeOAc_0}} = \frac{x_{MeOAc}}{-r_1} \quad [22]$$

Donde  $V_L$  representa el volumen de reacción o el volumen que ocupa el líquido,  $F_{MeOAc_0}$  es el caudal molar de entrada del acetato de metilo,  $x_{MeOAc}$  es la conversión del metil acetato y  $r_1$  representa la velocidad de consumo del reactivo.

Asimismo, se puede obtener el tiempo de residencia,  $\tau$ , de la mezcla líquida en el reactor mediante la *Ecuación 23*. Conociendo esto, se determina la cantidad de catalizador de rodio que hay continuamente en el reactor. En la siguiente ecuación,  $v_f$  representa el caudal volumétrico de salida de la corriente líquida en  $m^3/h$ .

$$\tau = \frac{V_L}{v_f} \quad [23]$$

En la Tabla 22 se indica los parámetros utilizados para calcular el volumen utilizando la *Ecuación 22*.

Tabla 22. Parámetros necesarios para el cálculo y resultado del volumen de reacción

$-r_1$ ( $kmol/(m^3 \cdot h)$ )	$F_{MeOAc_0}$ ( $kmol/h$ )	$x_{MeOAc}$	$V_L$ ( $m^3$ )	$v_f$ ( $m^3/h$ )	$\tau$ ( $h$ )	$W_{Rh_2(CO)_4Cl_2}$ ( $kg$ )
2,16	164,42	0,75	57,06	31,83	1,79	16,37

## 9. Balance de energía

En un reactor se trabaja con reacciones exotérmicas, que expulsan calor, o endotérmicas, absorben calor. Por tanto, dependiendo de las condiciones de operación deseadas, puede ser necesario añadir o retirar calor del sistema. Para determinar la cantidad de calor que se emite o absorbe en la reacción es necesario calcular la entalpía de la reacción. El proceso para su obtención se detallará a continuación.

### 9.1. Cálculo de la entalpía de reacción

En primer lugar, se deben conocer las entalpías de formación de cada uno de los compuestos químicos que intervienen en la reacción. Los valores a una temperatura de 25 °C se

recogen en la Tabla 23 y se obtienen a partir del simulador de procesos químicos *Aspen HYSYS* utilizando el paquete termodinámico *NRTL*. (6)

Tabla 23. Entalpías de formación de los reactivos y productos

Compuesto	Acetato de metilo	Monóxido de carbono	Anhídrido acético
$\Delta H_f^\circ$ (kJ/mol)	-441,56	-110,59	-627,06

Conocidas las entalpías de formación es posible determinar la entalpía de la reacción estándar, es decir, el calor liberado o absorbido por la reacción cuando se lleva a cabo en condiciones estándar, a 1 atm y 25 °C. Para ellos se utilizará la *Ecuación 24*.

$$\Delta H_r^\circ = \sum v_i \cdot H_{f,p}^\circ - \sum v_i \cdot H_{f,r}^\circ \quad [24]$$

Donde:

- $v_i$ : Coeficiente estequiométrico de cada uno de los compuestos. En este caso todos toman el valor uno.
- $H_{f,p}^\circ$ : Entalpía de formación de los productos.
- $H_{f,r}^\circ$ : Entalpía de formación de los reactivos.

Una vez determinada la entalpía en condiciones estándar se debe recalcular para conocer su valor a la temperatura de operación del reactor, en este caso de 175 °C. Esta variación en la entalpía de las sustancias puede obtenerse mediante la *Ecuación 25* si no hay cambio de fase y tiene lugar a presión constante.

$$\Delta H_i^\circ = \int_{T_1}^{T_2} C_{p_i} \cdot dT \quad [25]$$

El calor específico,  $C_p$ , es un valor que depende de la temperatura. Por tanto es necesario conocer las correlaciones que las relacionen. Mediante la *Ecuación 26* se podrán obtener los calores específicos correspondientes en J/(kmol·K) para el acetato de metilo y el anhídrido acético en estado líquido y con la *Ecuación 27* se obtendrá el valor para el monóxido de carbono en estado gas. Las constantes para los líquidos se presentaron en la Tabla 17 y para el CO se presentan en la Tabla 24.

$$C_{p_i} = C_1 + C_2 \cdot T + C_3 \cdot T^2 + C_4 \cdot T^3 + C_5 \cdot T^4 \quad [26]$$

$$C_{p_i} = C_1 + C_2 \cdot \left[ \frac{\frac{C_3}{T}}{\sinh \frac{C_3}{T}} \right]^2 + C_4 \cdot \left[ \frac{\frac{C_5}{T}}{\cosh \frac{C_5}{T}} \right]^2 \quad [27]$$

Tabla 24. Coeficiente para la determinación de los calores específicos (13)

	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>
CO	2,91·10 <sup>4</sup>	8,77·10 <sup>3</sup>	3,09·10 <sup>3</sup>	8,46·10 <sup>3</sup>	1358,20

A continuación, se calcula la entalpía de reacción a la temperatura deseada utilizando la Ecuación 28 y las Ecuaciones 26 y 27 para los calores específicos de cada uno de los compuestos.

$$\Delta H_r = \Delta H_r^o + \sum v_i \cdot \int_{298 K}^{448 K} C_{p_i} \cdot dT \quad [28]$$

En este caso, los coeficientes estequiométricos tomarán un valor positivo para el producto y valores negativos para los reactivos. Como no hay diferencia entre las entalpías de formación de la Tabla 23 y las entalpías de las sustancias a 25 °C y 50 bar, obtenidas de *Aspen HYSYS*, se ha considerado que no hay un cambio significativo de la entalpía de reacción debido a la presión.

El valor obtenido se muestra en la Tabla 25, como se puede ver se obtiene un valor negativo, lo que indica, según el criterio de signos empleado, que la reacción libera calor al exterior. En conclusión, se está ante una reacción exotérmica.

Tabla 25. Entalpía de reacción

$\Delta H_r^o$ (kJ/mol)	$\Delta H_r$ (kJ/mol)
-74,87	-68,51

## 9.2. Cálculo del calor de reacción

Tras haber determinado la entalpía de reacción se puede calcular el calor liberado en el reactor, sabiendo cuanta cantidad de los reactivos ha reaccionado o cuanto producto se ha formado. Para la determinación de este calor de reacción se utilizará la Ecuación 29 y los datos necesarios y el resultado obtenido se agrupan en la Tabla 26.

$$Q_{generado} = \Delta H_r \cdot F_{MeOAc_o} \cdot x \quad [29]$$

Donde:

- Q<sub>generado</sub>: Calor liberado en la reacción (kJ/h)
- F<sub>MeOAc<sub>o</sub></sub>: Flujo molar de metil acetato a la entrada del reactor (kmol/h)
- x: Conversión a anhídrido acético

Tabla 26. Calor generado en la reacción

x	F <sub>MeOAc<sub>o</sub></sub> (kmol/h)	Q <sub>generado</sub> (kJ/h)	Q <sub>generado</sub> (kW)
0,75	164,42	-8,45·10 <sup>6</sup>	-2,35·10 <sup>3</sup>

Como se explicó en el apartado 4. *Condiciones de operación y sistema catalítico* se va a trabajar con un reactor isoterma, por tanto es necesario retirar ese calor aportado por la reacción. Para ello se diseñará el sistema de refrigeración más adecuado en el apartado 14. *Sistema de refrigeración*. Finalmente, el calor que se desea retirar se calcula con la *Ecuación 30*.

$$Q_{\text{retirado}} = -Q_{\text{generado}} \quad [30]$$

## 10. Dimensionamiento del reactor

Para dimensionar el reactor es necesario conocer el volumen total del mismo. En el apartado 8. *Balance de materia* se calculó el volumen de reacción, pero al tratarse de un reactor de burbujeo también se debe tener en cuenta el volumen que ocupa la fase gas en el interior. Por tanto el volumen total se calcula mediante la *Ecuación 31*.

$$V_T = V_L + V_G \quad [31]$$

Donde:

- $V_T$ : Volumen total de reactor ( $\text{m}^3$ ).
- $V_L$ : Volumen del líquido o volumen de reacción ( $\text{m}^3$ ).
- $V_G$ : Volumen ocupado por la fase gas ( $\text{m}^3$ ).

### 10.1. Volumen del gas

El *hold-up* del gas indica la fracción de volumen del gas en la mezcla gas-líquido. Mediante la *Ecuación 32* se puede determinar este parámetro. (16)

$$\frac{\varepsilon_G}{(1 - \varepsilon_G)^4} = 0,2 \cdot \left(\frac{g \cdot D_{CO-L}^2 \cdot \rho_L}{\sigma}\right)^{1/8} \cdot \left(\frac{g \cdot D_{CO-L}^3 \cdot \rho_L^2}{\mu_L^2}\right)^{1/12} \cdot \left(\frac{u_g}{\sqrt{g \cdot D_{CO-L}}}\right) \quad [32]$$

Donde  $u_g$  es la velocidad superficial del gas la columna (m/s). Se calcula mediante la *Ecuación 33* donde  $v_g$  hace referencia al caudal volumétrico de gas en el reactor ( $\text{m}^3/\text{s}$ ) y D al diámetro de la columna (m).

$$u_g = \frac{v_g}{\left(\pi \cdot \frac{D^2}{4}\right)} \quad [33]$$

Una vez determinado este parámetro, se puede calcular el volumen que ocupa el gas en el reactor utilizando la *Ecuación 34*.

$$\varepsilon_G = \frac{V_G}{V_L + V_G} \quad [34]$$

### 10.1. Volumen total

Finalmente, se utiliza la *Ecuación 31* para determinar el volumen total del reactor. Posteriormente se decide una relación altura/diámetro para la columna. Según bibliografía este

ratio está normalmente entre 3 y 5, pero también se indica que es frecuente que pueda alcanzar hasta un valor de 10. Se eligió un valor de 6, para no tener ni un diámetro muy grande ni una altura muy elevada. A partir de este ratio y de la *Ecuación 35* se determinan las dimensiones del reactor. (15)

$$D = \sqrt{\frac{4 \cdot V_T}{\pi \cdot L}} \quad [35]$$

Donde L representa la altura del líquido en el reactor (m).

Como al principio se desconoce el *hold-up* del gas, ya que se desconoce la velocidad superficial del gas, se asumirá inicialmente que  $V_L$  se corresponde con  $V_T$  y posteriormente se obtendrá  $V_g$ . Una vez hecho esto se calcula un nuevo  $V_T$  y se repite el proceso, es decir, se itera hasta que no haya una diferencia entre el calculado y el obtenido. En la Tabla 27 se presentan los resultados de los volúmenes y dimensiones obtenidas en la tercera iteración, así como el *hold-up* calculado.

Tabla 27. Resultados de las dimensiones del reactor

$v_g$ (m <sup>3</sup> /s)	$u_g$ (m/s)	$\epsilon_g$	$V_L$ (m <sup>3</sup> )	$V_g$ (m <sup>3</sup> )	$V_T$ (m <sup>3</sup> )	L/D	D (m)	L (m)
$5,37 \cdot 10^{-2}$	$1,25 \cdot 10^{-2}$	$5,49 \cdot 10^{-2}$	57,06	3,32	60,38	6	2,34	14,04

Por otro lado, al tratarse de un reactor gas-líquido puede llegar a producirse el arrastre de gotas de líquido por el gas. Por esa razón será necesario la utilización de una malla y, asimismo, debe haber un diámetro mínimo que reduzca la velocidad del gas para que sea menor a la velocidad con la que las gotas se depositan. Esta velocidad de sedimentación se calcula con la *Ecuación 36* y el diámetro mínimo se determina mediante la *Ecuación 37*.

$$u_t = 0,07 \cdot \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V}} \quad [36]$$

Siendo:

- $u_t$ : Velocidad de sedimentación (m/s).

$$D_v = \sqrt{\frac{4 \cdot v_g}{\pi \cdot u_s}} \quad [37]$$

Donde:

- $D_v$ : Diámetro mínimo de la columna (m).
- $u_s$ : Se corresponde a  $0,15 \cdot u_t$  porque se utilizará un separador sin una almohadilla antivaho, ya que según los datos obtenidos no parece ser necesaria una malla antivaho (m/s).

Los resultados de estos parámetros se muestran en la Tabla 28.

Tabla 28. Velocidad de sedimentación y diámetro mínimo

$u_t$ (m/s)	$u_s$ (m <sup>3</sup> )	$D_v$ (m)
0,37	0,06	1,11

A partir de este diámetro mínimo se determinan proporciones típicas de las columnas gas-liquido como se observa en la Figura 3.

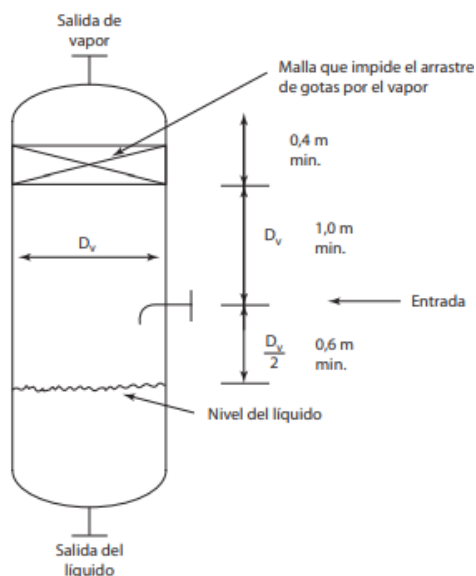


Figura 3. Proporciones de la altura de un separador gas-líquido (14)

Además de estas alturas indicadas en la Figura 3, que se añadirán a la altura determinada en la Ecuación 35, se agregará una altura de 0,4 m por debajo de la torre ya que hay un distribuidor de gas.

Los resultados de las dimensiones finales del reactor se muestran en la Tabla 29.

Tabla 29. Dimensiones del reactor

$D$ (m)	$L_{añadida}$ (m)	$L_{final}$ (m)	$(L/D)_{final}$
2,22	2,51	16,55	7,07

## 11. Hidrodinámica del proceso

### 11.1. Regímenes de flujo

Existen tres regímenes que pueden existir dentro de las columnas de burbujeo, se presentan en la Figura 4.

- Régimen homogéneo: Las burbujas tienen un tamaño prácticamente uniforme y una distribución también uniforme, pudiendo considerar que la interacción entre ellas es casi

inexistente. Sucede cuando la velocidad superficial del gas es menor a 5 cm/s y la velocidad de subida de las burbujas está entre los 20 y los 30 cm/s. (17) (18)

- Régimen heterogéneo: Ocurre cuando las velocidades del gas son mayores, provocando un patrón de flujo de las burbujas irregular a través de la columna. Además, se caracteriza por la coexistencia de burbujas de gran tamaño y de pequeño tamaño en el interior, ascendiendo de manera conjunta. (18)
- Régimen globular: Se forman burbujas de gran tamaño que pueden ocupar toda la sección de la columna. Ocurre normalmente en laboratorio, con diámetros pequeños y velocidades de gas altas. (18)

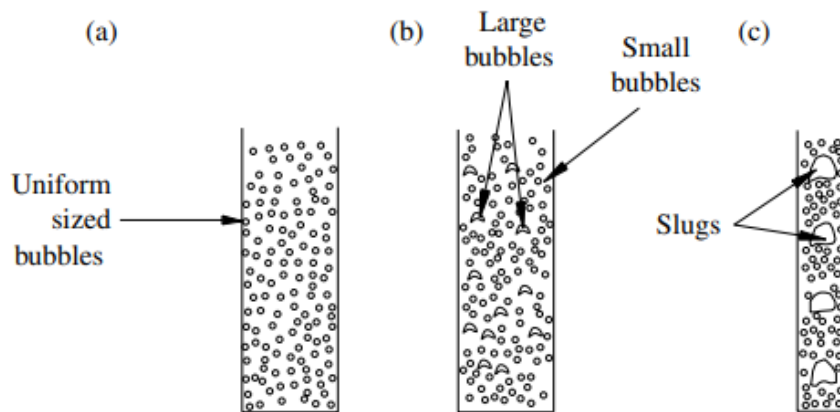


Figura 4. Regímenes de flujo: a) Homogéneo b) Heterogéneo c) Globular (17)

### 11.2. Diámetro de la burbuja

El diámetro de las burbujas dentro de la columna es uno de los parámetros de mayor importancia para el diseño, ya que está directamente relacionado con el área de transferencia de materia. Existen numerosas correlaciones empíricas y semi-empíricas para la obtención de una media de esta variable, y en este caso se calculará el diámetro medio de Sauter,  $d_s$  (m), mediante la Ecuación 38. (16)

$$d_s = 0,289 \cdot \rho_L^{-0,552} \cdot \mu_L^{-0,448} \cdot \sigma^{0,442} \cdot u_g^{-0,124} \quad [38]$$

### 11.3. Área interfacial y coeficiente de transferencia de materia

El área interfacial de las burbujas,  $a$  ( $m^{-1}$ ), en la columna de burbujeo se determina de manera directa a partir del diámetro de las burbujas y asimilando las burbujas a una forma esférica. Se utiliza la Ecuación 39.

$$a = \frac{6 \cdot \varepsilon_g}{d_s} \quad [39]$$

Posteriormente se determina el coeficiente volumétrico de transferencia de masa,  $k_L a$  (1/s). Existen múltiples correlaciones empíricas para distintos sistemas. En este caso se utilizará la propuesta por Hikita *et al* en la *Ecuación 40*. (19)

$$k_L a = \frac{14,9 \cdot g}{u_g} \cdot \left( \frac{u_g \cdot \mu_L}{\sigma} \right)^{1,76} \cdot \left( \frac{\mu_L \cdot g}{\rho_L \cdot \sigma^3} \right)^{-0,289} \cdot \left( \frac{\mu_g}{\mu_L} \right)^{0,243} \cdot \left( \frac{\mu_L}{\rho_L \cdot D_{CO-L}} \right)^{-0,604} \quad [40]$$

A partir de esto se puede calcular el coeficiente de transferencia de materia con la *Ecuación 41*.

$$k_L = \frac{k_L a}{a} \quad [41]$$

Por último se comprueba la suposición inicial del módulo de Hatta. Se obtiene un valor de  $3,50 \cdot 10^{-3}$ , que es menor a 0,3, por tanto la selección del reactor de burbujeo fue correcta. Además, utilizando la *Ecuación 42*, desarrollada para una reacción de orden cero, se obtiene la relación entre la concentración de CO en la interfase y en el seno del líquido. Se cumple que no hay resistencia a la transferencia de materia en la fase líquida y que la cinética sea la que limita la velocidad de la reacción.

$$\frac{C_{CO}}{C_{CO}^*} = 1 - \frac{k'}{k_L a \cdot C_{CO}^*} \quad [42]$$

#### 11.4. Velocidades de subida de la burbuja

La velocidad media de subida de las burbujas,  $u_g^*$  (m/s), en un conjunto de burbujas, se puede calcular con la *Ecuación 43*. (18)

$$u_g^* = \frac{u_g}{\varepsilon_g} \quad [43]$$

El valor obtenido se encuentra dentro del rango indicado en el régimen homogéneo, por lo que se confirma que se está trabajando en ese régimen en concreto.

Otro parámetro que se puede calcular es la velocidad terminal de subida de burbujas individuales, (m/s), que representa la velocidad constante de subida de la burbuja cuando se ha alcanzado el equilibrio con el arrastre producido por la bajada del líquido. Se utilizan las *Ecuaciones 44-46*, que son válidas para las condiciones del sistema. (18)

$$u_{b\infty} = \frac{\mu_L}{\rho_L \cdot d_s} \cdot M^{-0,149} \cdot (J - 0,857) \quad [44]$$

Donde:

$$M = \frac{g \cdot \mu_L^4 \cdot (\rho_L - \rho_g)}{\rho_L^2 \cdot \sigma^3} \quad [45]$$

$$J = 3,42 \cdot \left( \frac{4}{3} \cdot \left( \frac{g \cdot (\rho_L - \rho_g) \cdot d_s^2}{\sigma} \right) \cdot M^{-0,149} \cdot \left( \frac{\mu_L}{\mu_{agua}} \right) \right)^{0,441} \quad [46]$$

Los resultados de todos los parámetros mencionados anteriormente se muestran en la Tabla 30.

Tabla 30. Resultados de los parámetros hidrodinámicos

$d_s$	$a$	$k_L a$	$k_L$	$Ha$	$\frac{C_{CO}}{C_{CO}^*}$	$u_g^*$	$M$	$J$	$u_{b\infty}$
(m)	(m <sup>-1</sup> )	(s <sup>-1</sup> )	(m/s)			(m/s)			(m/s)
$2,26 \cdot 10^{-3}$	145,85	0,29	$2,01 \cdot 10^{-3}$	$3,50 \cdot 10^{-3}$	1	$2,27 \cdot 10^{-1}$	$1,26 \cdot 10^{-11}$	41,78	$1,28 \cdot 10^{-1}$

## 12. Distribuidor de gas

### 12.1. Tipos y selección de distribuidor

Los distribuidores de gas son instrumentos fundamentales, colocados en la parte baja de las columnas de burbujeo, que se encargan de introducir el gas en forma de burbujas para favorecer el contacto entre las fases. Existen distintos tipos, los más comunes son los mencionados a continuación, y en la Figura 5 se muestran distintos diseños utilizados en la industria.

- Platos perforados: Son baratos y fáciles de construir, lo que los convierte en la opción más utilizada en la industria. (20)
- Toberas y tapas: Son utilizados en ambientes con mucha reactividad y con temperaturas muy altas. También existen distintos tipos de diseños dependiendo de si se requiere una buena distribución del gas o si se quiere evitar, en reactores con sólidos, que los orificios sean taponados. (20)

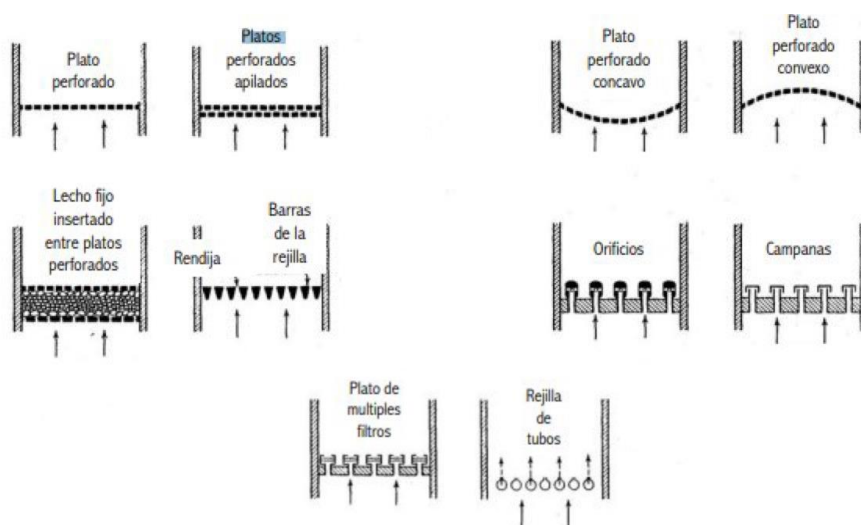


Figura 5. Diferente configuraciones de los distribuidores de gas (21)

Se seleccionan los platos perforados apilados, ya que son de los más simples y económicos y es factible su utilización en las condiciones del reactor.

## 12.2. Diseño del distribuidor

En primer lugar se ha de calcular la velocidad del gas a través del orificio,  $u_{or}$  (m/s) utilizando la *Ecuación 47*. (20)

$$u_g = \frac{\pi}{4} \cdot d_{or}^2 \cdot u_{or} \cdot N_{or} \quad [47]$$

Para ello es necesario conocer  $d_{or}$ , el diámetro de los orificios del distribuidor, y  $N_{or}$ , el número de orificios por unidad de área. Estos dos parámetros están ligados entre ellos y en distribuidores de platos perforados la relación se muestra en la Tabla 31. Los valores del diámetro varían entre 1 y 4 mm. Se seleccionó un valor medio de 2 mm, ya que es habitual que el diámetro de la burbuja y del orificio sean similares.

Tabla 31. Diámetro de los orificios y número de orificios por unidad de área (20)

<b><math>d_{or}</math> (m)</b>	0,001	0,002	0,004
<b><math>N_{or}</math> (m<sup>-2</sup>)</b>	16900	4200	1060

Es importante verificar que el ratio entre la velocidad superficial del gas y la velocidad del gas a través del orificio ( $u_g/u_{or}$ ), que representa la área vacía del plato, sea menor a 10 %.

(20)

Por último se calcula el número de orificios totales en el plato con el área del plato,  $A_{plato}$  (m<sup>2</sup>), utilizando la *Ecuación 48*. Los resultados finales se muestran en la Tabla 32.

$$N_{orificios} = A_{plato} \cdot N_{or} \quad [48]$$

Tabla 32. Parámetros finales del distribuidor de gas

<b><math>u_g</math></b> (m/s)	<b><math>d_{or}</math></b> (m)	<b><math>N_{or}</math></b> (m <sup>-2</sup> )	<b><math>u_{or}</math></b> (m/s)	<b><math>u_g/u_{or}</math></b> (%)	<b><math>A_{plato}</math></b> (m <sup>2</sup> )	<b><math>N_{orificios}</math></b>
$1,25 \cdot 10^{-2}$	$2,00 \cdot 10^{-3}$	4200,00	$9,46 \cdot 10^{-1}$	1,32	4,30	18063

## 13. Caída de presión

### 13.1. Caída de presión en la columna

La caída de presión en una columna de burbujeo se calcula mediante la *Ecuación 49*.

(22)

$$\Delta P = L \cdot g \cdot (\rho_L \cdot (1 - \varepsilon_g) + \rho_g \cdot \varepsilon_g) \quad [49]$$

El valor obtenido de la caída de presión se muestra en la Tabla 33. Esta caída de presión no se puede despreciar, aun así, según bibliografía, las correlaciones usadas anteriormente no dependen de la presión y se considera que esta caída de presión no afecta de manera significativa a las propiedades de los líquidos.

Tabla 33. Caída de presión a lo largo de la columna

$\Delta P$ (Pa)	$\Delta P$ (kPa)	$\Delta P$ (bar)
140596,06	140,60	1,41

### 13.2. Caída de presión en el distribuidor y en la malla

Para calcular la caída de presión en el distribuidor es necesario un coeficiente del orificio,  $C_{d,or}$ , que dependerá del Reynolds, que se calcula con la Ecuación 50, y que posteriormente se determina siguiendo la Tabla 34.

$$Re = \frac{D_i \cdot u_g \cdot \rho_g}{\mu_g} \quad [50]$$

Tabla 34. Valores del coeficiente del orificio con respecto al Reynolds (20)

Re	100	300	500	1000	2000	>3000
$C_{d,or}$	0,68	0,70	0,68	0,64	0,61	0,6

Una vez determinado el coeficiente se utiliza la Ecuación 51 para determinar la caída de presión en el plato. Los resultados se muestran en la Tabla 35, como se puede ver la caída de presión en el distribuidor de gas es despreciable.

$$u_{or} = C_{d,or} \cdot \sqrt{\left(\frac{2 \cdot \Delta P_{plato}}{\rho_g}\right)} \quad [51]$$

Tabla 35. Resultados de la caída de presión en el plato perforado

Re	$C_{d,or}$ (m)	$\Delta P_{plato}$ (Pa)
44833,05	0,6	46,61

Al haber llegado a esta conclusión se puede afirmar que la caída de presión en el separador sin almohadilla antivaho situado en la parte superior de la columna también será despreciable.

## 14. Sistema de refrigeración

Como se mencionó anteriormente, las columnas de burbujeo destacan por sus excelentes propiedades de transporte de calor. Esto se debe a las altas capacidades caloríficas de los líquidos y a la elevada difusión efectiva del calor en todas direcciones de la columna, lo que

provoca que desaparezcan prácticamente los gradientes de temperatura dentro de las torres de burbujeo. Por ese motivo, mientras haya suficiente área disponible para llevar a cabo la refrigeración, el control de la temperatura es relativamente sencillo. (15)

En la industria existen diversos métodos para absorber el calor liberado por la reacción. Estos sistemas de refrigeración van desde los más simples, las camisas de refrigeración, hasta los más complejos, haz de tubos internos, y su selección dependerá de múltiples factores, entre los que está la cantidad de calor emitido en la reacción, las condiciones del sistema, el régimen de operación, etc. Los principales métodos para eliminar calor se muestran en la Figura 6.

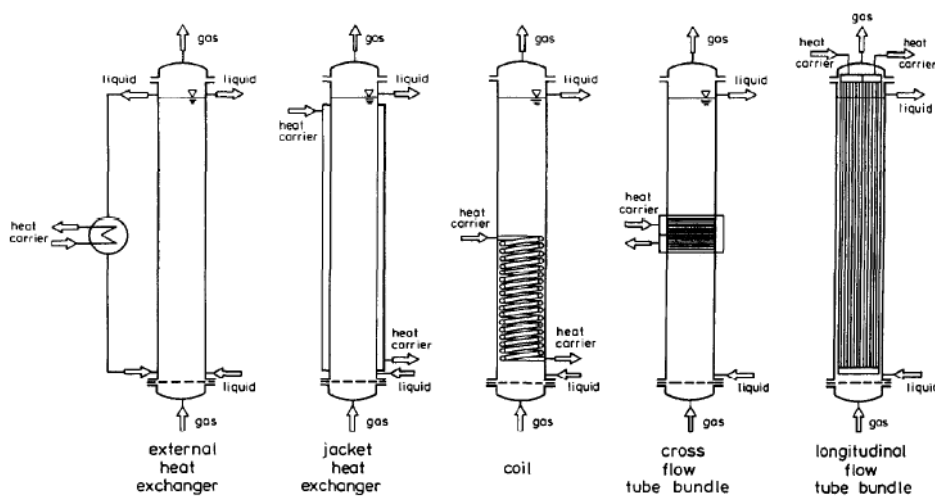


Figura 6. Principales métodos de refrigeración de las torres de burbujeo (23)

No se optará por los sistemas de refrigeración internos ya que pueden afectar a la hidrodinámica del proceso, además son preferibles cuando se requieren áreas de transferencia de calor muy elevadas.

De entre los sistemas de refrigeración externos, los intercambiadores de calor externos son recomendados cuando se trabaja con reacciones rápidas que tienen calores de reacción por encima de los 100 kJ/mol. Este no es el caso del sistema, por ello, para la columna de burbujeo a diseñar se seleccionará una camisa de refrigeración, ya que es uno de los sistemas más sencillos y, además, la reacción del sistema no es muy exotérmica, por lo que los requerimientos energéticos no son excesivamente elevados. (17)

#### 14.1. Selección de la camisa

Las camisas de refrigeración son cilindros externos que rodean parte o la totalidad del equipo. El caudal de refrigerante circula a través del espacio entre la camisa y la pared de la columna y el calor es transferido desde el interior del tanque hacia el fluido refrigerante. Esta configuración se observa de manera más detallada en la Figura 7. (24)

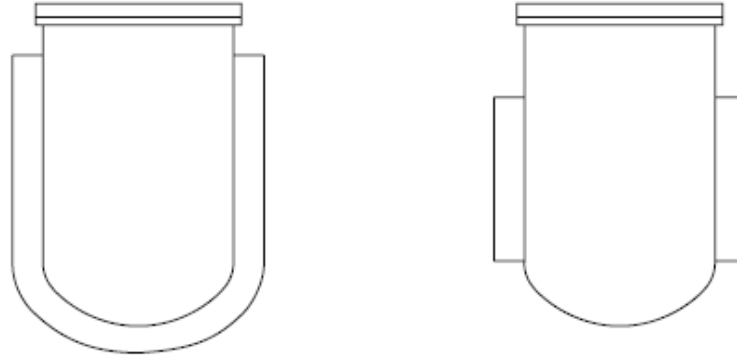


Figura 7. Configuraciones de una camisa de refrigeración (24)

En concreto, para el reactor R-101 solo se utilizará la camisa en la superficie lateral del reactor, ya que la transferencia de calor será lo suficientemente eficaz para cumplir las condiciones y será donde se produzca el mayor aumento de calor ya que es donde se lleva a cabo la reacción.

Hay distintos tipos de camisas. Las más utilizadas son las siguientes y se presenta cada una de ellas en la Figura 8.

- Camisas convencionales: Cilindro situado en la parte externa del equipo que en su interior cuenta con deflectores que favorecerán la turbulencia del líquido dentro de la camisa, aumentando el coeficiente de transferencia de calor. (14)
- Camisa con hendiduras: Similares a las convencionales pero con espesores de pared menores y unidas al reactor mediante hendiduras que están soldadas a la pared con un arreglo regular. (14)
- Camisas de media tubería: Compuestas por conjuntos de tubos soldados que están divididos por la mitad a lo largo de su eje central. Este tipo de camisas suelen estar alrededor del reactor colocadas en forma de espiral. (14)

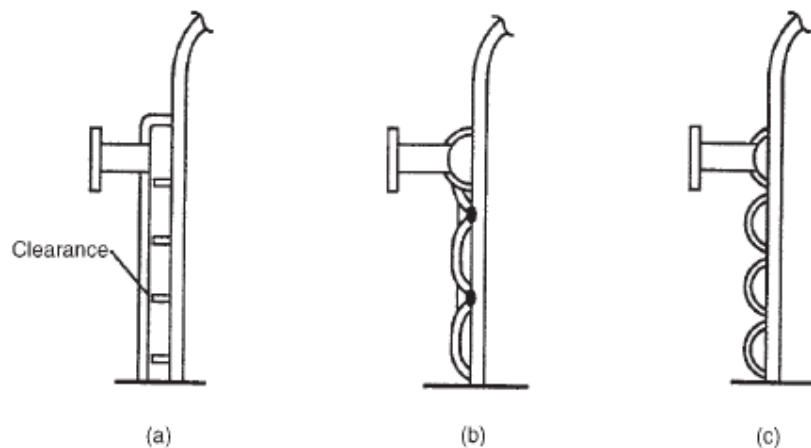


Figura 8. Tipos de camisas (24)

A continuación, en la Tabla 36 se presentan las principales características para la selección de un tipo u otro.

Tabla 36. Características de las distintas camisas (24)

	Costes	Transferencia de calor	Presión
<b>C. convencionales</b>	Bajos	Media	Hasta 10 bar
<b>C. con hendiduras</b>	Altos	Alta	Hasta 20 bar
<b>C. de media tubería</b>	Elevados	Elevada	Hasta 70 bar

En conclusión, se selecciona una camisa de media tubería, ya que, a pesar de su elevado coste en comparación con los otros tipos, es la más adecuada para el rango de presión en el que se trabaja (50 bar).

#### 14.2. Dimensiones de la camisa

La camisa escogida se caracteriza por no rodear completamente el área lateral de la columna, ya que las medias tuberías que se sitúan alrededor de la torre están separadas entre sí. Es decir, la camisa da vueltas alrededor de la columna, y esas vueltas están separadas entre sí por una distancia que permanece constante, conocida como *pitch*.

Por tanto, es necesario determinar cuanta área lateral de la columna estará ocupada por la camisa y cuanta estará vacía. Las dimensiones de la media tubería dependen principalmente de tres parámetros: el diámetro interno ( $d_{ci}$ ), el espesor de la tubería ( $t_c$ ) y el *pitch* ( $p$ ), que es la distancia entre el eje central de la tubería de una vuelta respecto a otra. (25) (26)

En este caso se selecciona una tubería de diámetro interno de 146,3 mm, según el *Schedule 80* del acero, con un espesor de 3,5 mm, calculado en el apartado 17. *Diseño mecánico*. Asimismo, las distancias habituales entre medias tuberías está entre los 20 y 40 mm. En este escenario, se seleccionan los 20 mm para aprovechar el máximo espacio, lo que resultaría en un *pitch* de 173,3 mm. (27) (28)

El número de vueltas que da la camisa se calcula con la *Ecuación 52*, donde  $L$  es la altura de la columna donde hay volumen de líquido, que se calculó en el apartado 10. *Dimensionamiento del reactor*. Se selecciona esta altura ya que la camisa solo se situará alrededor de la zona ocupada por el líquido.

$$L = (d_{ci} + 2 \cdot t_c) \cdot N_{vueltas} + (p - d_{ci} - 2 \cdot t_c) \cdot (N_{vueltas} - 1) \quad [52]$$

Posteriormente, se ha de calcular la longitud total de la media tubería que rodea a la columna,  $L_c$ . Para su determinación se debe buscar el valor de la longitud que cumpla la *Ecuación 53*.

$$A_{lateral} = A_{cv} + A_t \quad [53]$$

Donde  $A_{lateral}$ , es el área de la superficial lateral de la columna, calculada con la Ecuación 54 con las dimensiones del apartado 10. Dimensionamiento del reactor;  $A_{cv}$  es el área vacía de la superficial lateral que no está ocupada por la camisa (Ecuación 55) y  $A_t$  que es el área de la superficie lateral ocupada por la camisa, es decir, el área donde se producirá la transferencia de calor (Ecuación 56).

$$A_{lateral} = \pi \cdot D \cdot L \quad [54]$$

$$A_{cv} = L_c \cdot 2 \cdot t_c + (N_{vueltas} - 1) \cdot \frac{L_c}{N_{vueltas}} \cdot (p - 2 \cdot t_c - d_{ci}) \quad [55]$$

$$A_t = L_c \cdot d_{ci} \quad [56]$$

En conclusión, las dimensiones de la camisa de media tubería, así como las áreas mencionadas anteriormente, se presentan en la Tabla 37.

Tabla 37. Dimensiones de una camisa de media tubería (25) (26)

$d_{ci}$ (mm)	$t_c$ (mm)	$p$ (mm)	$N_{vueltas}$	$A_{lateral}$ (m <sup>2</sup> )	$L_c$ (m)	$A_{cv}$ (m <sup>2</sup> )	$A_t$ (m <sup>2</sup> )
146,30	3,50	173,30	81,13	103,21	596,43	15,96	87,26

### 14.3. Estimación del caudal de refrigerante

Es fundamental seleccionar el refrigerante más adecuado para el sistema. En primer lugar, se ha analizado la selección de agua de refrigeración, ya que es el refrigerante de menos coste y del que hay mayor disponibilidad. Tras la realización de los cálculos pertinentes se ha optado por su utilización, ya que se obtiene que se puede retirar el calor deseado trabajando en los rangos temperatura recomendados. Las características principales del agua de refrigeración se muestran en la Tabla 38.

Tabla 38. Propiedades del agua de refrigeración

$\rho_{cw}$ (kg/m <sup>3</sup> )	$C_{pcw}$ (kJ/(kg·K))	$\mu_{cw}$ (Pa·s)	$k_{cw}$ (W/(m·K))	$T_{min}$ operación	$T_{max}$ operación
1000	4,18	$7,00 \cdot 10^{-4}$	0,63	26,00	50,00

A continuación, como ya se conoce el área de transferencia de calor que proporciona la camisa se ha de calcular el aumento de temperatura que sufre el refrigerante. Para ello se utiliza la Ecuación 57.

$$Q = U \cdot A_t \cdot \Delta T_{ml} \quad [57]$$

Siendo Q el calor intercambiado en W, U el coeficiente global de transferencia de calor en W/(m<sup>2</sup>·°C) y  $\Delta T_{ml}$  la temperatura media logarítmica en °C.

El calor intercambiado se corresponde con el calor retirado calculado en el apartado 9. Balance de energía, el coeficiente global de transferencia será estimado y para el cálculo de

$\Delta T_{ml}$  hay que conocer las temperaturas de entrada y salida de los fluidos del reactor y del fluido refrigerante.

Para el parámetro U se emplea la Tabla 39, que muestra distintos rangos de valores que toma el coeficiente global de transferencia de calor dependiendo del fluido de servicio y del fluido de operación que se empleen en una camisa.

Tabla 39. Valores del coeficiente global de materia para reactores encamisados (14)

Camisa	Reactor	U (W/(m <sup>2</sup> ·K))
Vapor	Disoluciones acuosas diluidas	500-700
Vapor	Orgánicos ligeros	250-500
Agua	Disoluciones acuosas diluidas	200-500
Agua	Orgánicos ligeros	200-300

Como se trabaja con sustancias orgánicas ligeras, se debe seleccionar un valor entre 200 y 300 W/(m<sup>2</sup>·K). Se ha decidido seleccionar el valor más bajo, para trabajar desde un enfoque más conservador, ya que se espera un coeficiente global de transferencia de calor bajo. Esto es así debido a que la columna tendrá un espesor elevado.

Para calcular la temperatura media logarítmica se utiliza la *Ecuación 58*.

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \left( \frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1} \right)} \quad [58]$$

Siendo T<sub>1</sub> la temperatura de entrada del fluido caliente (°C o K), T<sub>2</sub> la temperatura de salida del fluido caliente (°C o K), t<sub>1</sub> la temperatura de entrada del fluido frío (°C o K) y t<sub>2</sub> la temperatura de salida del fluido frío (°C o K).

Finalmente, se utilizaron las ecuaciones anteriores y la *Ecuación 59* para buscar las temperaturas de entrada y salida del agua refrigerada en el reactor que minimicen su masa introducida.

$$Q = m_{cw} \cdot Cp_{cw} \cdot (t_2 - t_1) \quad [59]$$

Siendo Q el calor intercambiado (kJ/h), m<sub>cw</sub> la corriente de *cooling water* (kg/h) y Cp<sub>cw</sub> el calor específico medio de la corriente de entrada (kJ/kg·°C).

No obstante, el caudal de refrigerante en la camisa está limitado por una restricción de velocidad dentro del tubo. Según bibliografía la velocidad del agua a lo largo de la camisa debe ser superior a 2,3 m/s para que haya una transferencia de calor adecuada. Para calcular esa velocidad, v<sub>cw</sub>, se utiliza la *Ecuación 60*. (29)

$$v_{cw} = \frac{\left(\frac{m_{cw}}{\rho_{cw}}\right)}{\left(\pi \cdot \frac{d_{ci}^2}{8}\right)} \quad [60]$$

Los valores alcanzados que proporcionan esa condición se muestran en la Tabla 40.

Tabla 40. Resultados de los parámetros que mantienen la temperatura del reactor constante

Q (W)	U (W(m <sup>2</sup> ·°C))	T <sub>1</sub> (°C)	T <sub>2</sub> (°C)	t <sub>1</sub> (°C)	t <sub>2</sub> (°C)	m (kg/h)	m (kg/s)	v <sub>cw</sub> (m/s)
2,35·10 <sup>6</sup>	200	175,00	175,00	26,00	54,09	71849,40	19,96	2,37

#### 14.4. Comprobación del coeficiente global de transferencia de calor

A continuación, se debe comprobar si el coeficiente global de calor estimado se corresponde con el valor real calculado. Si la diferencia entre el valor estimado y el valor calculado es muy grande se debe llevar a cabo un proceso de iteración.

El coeficiente global de transferencia de calor se calcula mediante la *Ecuación 61*.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_r} + \frac{1}{h_{rd}} + \frac{d_i \cdot \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2 \cdot k_w} + \frac{d_i}{d_o \cdot h_c} + \frac{d_i}{d_o \cdot h_{cd}} \quad [61]$$

Donde:

- h<sub>r</sub>: Coeficiente de convección en el interior del reactor (W/m<sup>2</sup>·K).
- h<sub>rd</sub>: Coeficiente de ensuciamiento en el reactor (W/m<sup>2</sup>·K).
- h<sub>c</sub>: Coeficiente de convección en el interior de la camisa (W/m<sup>2</sup>·K).
- h<sub>cd</sub>: Coeficiente de ensuciamiento en la camisa (W/m<sup>2</sup>·K).
- d<sub>o</sub>: Diámetro externo de la columna (m). Donde d<sub>o</sub> es igual a d<sub>i</sub> + 2·t, siendo t el espesor e igual a 72,9 mm (calculado en el apartado 17. *Diseño mecánico*).
- d<sub>i</sub>: Diámetro interno de la columna (m).
- k<sub>w</sub>: Conductividad térmica del material de construcción (W/(m·K)). Para el acero inoxidable 316 tiene un valor de 17,4 W/(m·K) en las condiciones del sistema.

El coeficiente de transferencia de calor en el interior de la columna de burbujeo se calcula mediante la *Ecuación 62*.

$$\frac{h_r}{\rho_L \cdot C_{pL} \cdot u_g} \cdot \left(\frac{C_{pL} \cdot \mu_L}{k_m}\right)^{\frac{2}{3}} = 0,418 \cdot \left(\frac{u_g^3 \cdot \rho_L}{\mu_L \cdot g}\right)^{-1/3} \cdot \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)^{1/3} \cdot \left(\frac{\mu_w}{\mu_L}\right)^{0,05} \cdot u_g^{0,25} \quad [62]$$

Donde Δρ es la diferencia entre la densidad del líquido y la del gas (kg/m<sup>3</sup>).

Por otro lado, el coeficiente de transferencia de calor en la camisa se calcula empleando la *Ecuación 63*.

$$h_c = \frac{Nu \cdot k_{cw}}{d_e} \quad [63]$$

Donde:

- Nu: Número de Nusselt. Calculado mediante la *Ecuación 64*. (29)
- $k_{cw}$ : Conductividad térmica del agua (W/(m·K)).
- $d_e$ : Diámetro hidráulico medio (m). Calculado mediante la *Ecuación 65*. (29)

$$Nu = 0,023 \cdot \left( \frac{\rho_{cw} \cdot v_{cw} \cdot d_e}{\mu_{cw}} \right)^{0,8} \cdot \left( \frac{\mu_{cw} \cdot C_{p_{cw}}}{k_{cw}} \right)^{1/3} \cdot \left( \frac{\mu_{cw}}{\mu_w} \right)^{0,14} \cdot E \quad [64]$$

Donde E es la eficiencia añadida para tener en cuenta las zonas del reactor que no están cubiertos por la camisa. El valor oscila entre 0,8 y 1. Se selecciona un valor medio de 0,9.

$$d_e = \frac{\pi \cdot d_{ci}}{2} \quad [65]$$

Los parámetros empleados en la *Ecuación 62* han sido determinados para la corriente líquida en el apartado 7. *Cálculos Previos* y el resultado obtenido se muestra en la Tabla 41. Por otro lado, los parámetros del agua de refrigeración empleados en la *Ecuación 64* se corresponden con los indicados en la Tabla 38. Asimismo, los resultados correspondiente de las ecuaciones para determinar el coeficiente de calor en la camisa se muestran en la Tabla 41.

Tabla 41. Resultados de los coeficientes de transferencia de calor

$\Delta p$ (kg/m <sup>3</sup> )	$h_r$ (W/(m <sup>2</sup> ·K))	$d_e$ (m)	E	Nu	$h_c$ (W/(m <sup>2</sup> ·K))
1040,47	1877,69	0,23	0,9	1736,26	4783,08

Por último, se consideran unos factores de ensuciamiento debido a las posibles incrustaciones que pueden dejar los fluidos en las paredes. En la Figura 9, se presentan valores típicos de distintos fluidos. Para la mezcla líquida en el interior del reactor se toma un coeficiente de 5000 W/m<sup>2</sup>·K, por ser líquidos orgánicos, y para el *cooling water* se toma un valor de 6000 W/m<sup>2</sup>·K, por seleccionar agua de enfriamiento.

Fluido	Coficiente (W/m <sup>2</sup> °C)	Factor (resistencia) (m <sup>2</sup> °C/W)
Agua de río	3000–12 000	0,0003–0,0001
Agua de mar	1000–3000	0,001–0,0003
Agua de enfriamiento (torres)	3000–6000	0,0003–0,00017
Agua de ciudad (blanda)	3000–5000	0,0003–0,0002
Agua de ciudad (dura)	1000–2000	0,001–0,0005
Condensado de vapor de agua	1500–5000	0,00067–0,0002
Vapor de agua (sin aceite)	4000–10 000	0,0025–0,0001
Vapor de agua (trazas de aceite)	2000–5000	0,0005–0,0002
Salmuera refrigerada	3000–5000	0,0003–0,0002
Aire y gases industriales	5000–10 000	0,0002–0,0001
Gases de chimenea	2000–5000	0,0005–0,0002
Vapores orgánicos	5000	0,0002
Líquidos orgánicos	5000	0,0002
Hidrocarburos ligeros	5000	0,0002
Hidrocarburos pesados	2000	0,0005
Orgánicos en ebullición	2500	0,0004
Orgánicos condensantes	5000	0,0002
Fluidos de transferencia de calor	5000	0,0002
Soluciones acuosas de sal	3000–5000	0,0003–0,0002

Figura 9. Factores de ensuciamiento para distintos fluidos (14)

Tras llevar a cabo el cálculo se obtiene un coeficiente de transferencia de calor global de 195,42 W/m<sup>2</sup>·K, un valor lejano al asumido. Por tanto, se vuelve a realizar el cálculo con el nuevo coeficiente de transferencia hasta que el estimado y el calculado tengan una diferencia poco significativa. Finalmente, en la Tabla 42 se muestran los valores calculados y la cantidad final de refrigerante necesario, así como su temperatura de entrada y salida.

Tabla 42. Resultados finales obtenidos tras el proceso iterativo

$h_r$ (W/(m <sup>2</sup> ·K))	$h_c$ (W/(m <sup>2</sup> ·K))	U (W/(m <sup>2</sup> ·°C))	$t_1$ (°C)	$t_2$ (°C)	m (kg/h)	m (kg/s)	$v_{cw}$ (m/s)
1877,69	5403,22	196,29	26,00	49,32	86532,91	24,04	2,86

#### 14.5. Caída de presión en la camisa

Debido a la elevada longitud de la camisa alrededor de la columna de burbujeo, la caída de presión del agua de refrigeración será significativa y elevada. Para determinar la caída de presión,  $\Delta P_c$  (Pa), en camisas de media tubería se emplea la Ecuación 66. (28)

$$\Delta P_c = 4 \cdot f \cdot \frac{L_c \cdot v_{cw}^2}{D_h \cdot 2} \quad [66]$$

Donde  $f$  es el factor de fricción de Adalah que se determina mediante la Ecuación 67 y  $D_h$  el diámetro hidráulico de la camisa (m) que se determina mediante la Ecuación 68. (28) (30)

$$f = 0,076 \cdot \frac{\rho_{cw} \cdot v_{cw} \cdot d_e}{\mu_{cw}} + 0,0073 \cdot \left(\frac{D_h}{D}\right)^{0,5} \quad [67]$$

$$D_h = \frac{4 \cdot \left(\frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot (d_{ci})^2}{d_{ci} + \frac{\pi \cdot d_{ci}}{2}} = 0,611 \cdot d_{ci} \quad [68]$$

Los datos empleados y el resultado de la caída de presión en la camisa se indican en la Tabla 43. Por tanto, el agua de refrigeración entrará a la camisa a una presión de 4,96 bar y habrá una caída de presión de 0,66 bar por cada 100 metros.

Tabla 43. Caída de presión en la camisa de media tubería

$d_{ci}$ (mm)	$d_e$ (m)	D (m)	$v_{cw}$ (m/s)	$L_c$ (m)	$D_h$ (m)	f	$\Delta P$ (Pa)	$\Delta P$ (bar)
146,30	0,23	2,34	2,86	596,43	$9,67 \cdot 10^{-2}$	$3,92 \cdot 10^{-3}$	395852,98	3,96

## 15. Aislante

Será necesaria la utilización de un aislante que rodee toda la superficie de la camisa para evitar las pérdidas de calor, ya que esta pérdida podría provocar que se desestabilizara la temperatura en el interior del mismo. Además, para los cálculos realizados en el apartado 9.

*Balance de energía* no se han considerado pérdidas, por tanto el aislante es necesario para conseguir que el sistema sea prácticamente adiabático.

Por ello, se han analizado distintos tipos de aislante para ver cuál es el más adecuado para las condiciones del proceso. Se ha considerado principalmente el uso de fibra de vidrio o lana de roca. Finalmente, se ha seleccionado este último por ofrecer resistencias mayores a la transferencia de calor. Asimismo, es un material adecuado ya que su temperatura máxima de servicio son 700 °C y tiene un coeficiente de conductividad térmica,  $k_{\text{aislante}}$ , de 0,043 W/(m·K).  
 (31)

Se debe calcular el espesor óptimo del aislante para el peor escenario, es decir, se debe asegurar que a la temperatura máxima a la que circula el agua, las pérdidas de calor en el interior sean reducidas de manera drástica, volviendo el reactor esencialmente adiabático.

La cantidad de calor intercambiada con el exterior resulta en la siguiente expresión, *Ecuación 69*.

$$Q = \frac{T_{\text{max,camisa}} - T_{\infty}}{R_t} \quad [69]$$

Donde la resistencia total al intercambio de calor,  $R_t$ , es la suma de las resistencias individuales a la transmisión de calor consideradas en serie y representadas en la Figura 10. Se calcula utilizando la *Ecuación 70*.

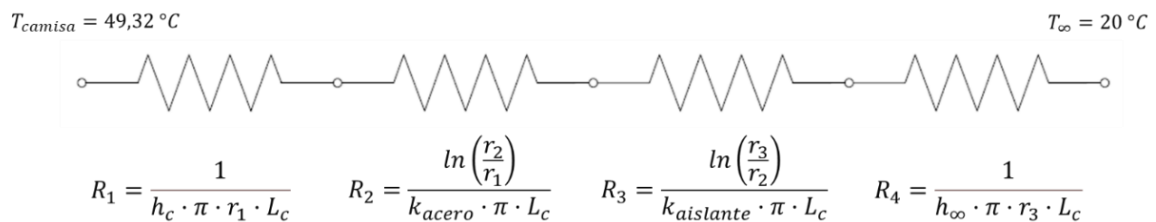


Figura 10. Resistencias en serie desde el interior de la camisa hasta el exterior (Elaboración propia)

$$R_t = \frac{1}{h_c \cdot \pi \cdot r_1 \cdot L_c} + \frac{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}{k_{\text{acero}} \cdot \pi \cdot L_c} + \frac{\ln\left(\frac{r_3}{r_2}\right)}{k_{\text{aislante}} \cdot \pi \cdot L_c} + \frac{1}{h_{\infty} \cdot \pi \cdot r_3 \cdot L_c} \quad [70]$$

La resistencia en el interior de la camisa ( $R_1$ ), la resistencia ofrecida por el material de construcción de la camisa ( $R_2$ ) y la resistencia del aislante ( $R_3$ ) se calculan con los datos indicados en la Tabla 44. Cabe destacar que,  $r_1$  se corresponde con el radio interno de una media tubería de la camisa,  $r_2$  con el radio externo y  $r_3$  con el radio externo más el espesor del aislante que se desee. Estos radios y la longitud indicada en la *Ecuación 70* son respecto a la superficie de la camisa, ya que el aislante se colocará alrededor de la misma.

Tabla 44. Parámetros necesarios para la determinación de las resistencias

$h_c$ (kg/m <sup>3</sup> )	$r_1$ (mm)	$r_2$ (mm)	$L_c$ (m)	$k_{acero}$ W/(m·K)	$k_{aislante}$ W/(m·K)	$r_3$ (m)
5403,22	73,15	76,65	596,43	16,2	0,043	$r_2+t_{aislante}$

Como se diseña el aislante para las condiciones más desfavorables, se asumirá que hay convección forzada en el exterior del reactor debido al viento que circula alrededor. Este coeficiente de convección se calcula mediante la Ecuación 71, y el diámetro empleado se corresponde con diámetro total del reactor, incluyendo la camisa y el aislante ( $D_0+2\cdot r_3$ ).

$$h_{\infty} = \frac{Nu_D \cdot k_{aire}}{D} \quad [71]$$

Para obtener el número de Nusselt se emplea la correlación de Churchill y Bernstein, destinada para fluidos alrededor de un cilindro y que se puede emplear para todo rango de Re, siempre que se cumpla que  $Re \cdot Pr$  sea mayor a 0,2. Esta correlación se indica en la Ecuación 72 y el número de Reynolds y el número de Prandtl se calculan mediante la Ecuación 73 e 74. (32)

$$Nu_D = 0,3 + \frac{0,62 \cdot Re_D^{1/2} \cdot Pr^{1/3}}{\left(1 + \left(\frac{0,4}{Pr}\right)^{2/3}\right)^{1/4}} \cdot \left(1 + \left(\frac{Re_D}{282000}\right)^{4/5}\right) \quad [72]$$

$$Re_D = \frac{\rho_{aire} \cdot v_{aire} \cdot D}{\mu_{aire}} \quad [73]$$

$$Pr = \frac{\mu_{aire} \cdot C_{p,aire}}{k_{aire}} \quad [74]$$

En la Tabla 45 se indican las propiedades del aire y el coeficiente de convección obtenido para el espesor seleccionado, asumiendo que la velocidad del viento es de 11,11 m/s, que equivale a los 40 km/h que pueden producirse como máximo en la zona.

Tabla 45. Propiedades del aire y coeficiente de convección

$\rho_{aire}$ (kg/m <sup>3</sup> )	$C_{p,aire}$ (J/kg·K)	$\mu_{aire}$ (Pa·s)	$k_{aire}$ (W/(m·K))	$Pr$	$Re_D$	$Re_D \cdot Pr$	$h_{\infty}$ (W/(m <sup>2</sup> ·K))
1,16	1007,00	$1,85 \cdot 10^{-5}$	0,0263	0,708	$1,88 \cdot 10^6$	$1,33 \cdot 10^6$	20,75

Finalmente, en la Figura 11 se representa el calor perdido calculado mediante la Ecuación 69 frente a distintos espesores del aislante. Como se observa, a partir de un determinado espesor, la variación en la cantidad de calor perdido se vuelve muy poco significativa. Por tanto se debe seleccionar un espesor que proporcione un porcentaje de reducción de pérdidas que sea suficiente sin que el espesor seleccionado sea muy grande.

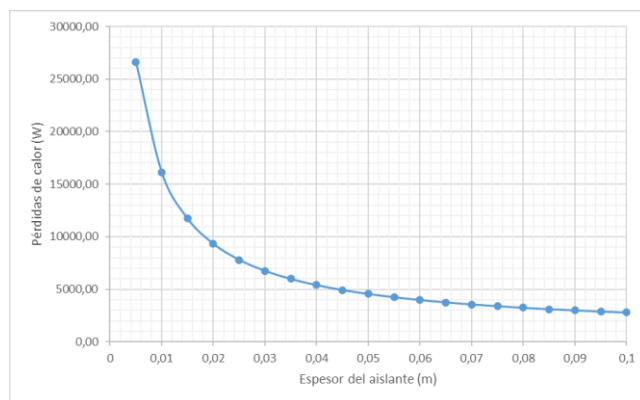


Figura 11. Pérdidas de calor del sistema frente a espesores del aislante (Elaboración propia)

En la Tabla 46 se indica el espesor finalmente seleccionado y otros parámetros de interés. Se ha seleccionado este espesor ya que proporciona una reducción de las pérdidas del 92,23 %, lo que se considera suficiente, ya que como se observa en la Tabla 46, las temperaturas de la pared respecto al interior de la camisa son prácticamente iguales y, además, se obtiene una temperatura en la parte exterior del aislante segura para los operarios.

Tabla 46. Datos finales del aislante seleccionado

$t_{\text{aislante}}$ (m)	Q sin aislante (W)	Q con aislante (W)	$T_{\text{pared interior camisa}}$ (°C)	$T_{\text{pared exterior camisa}}$ (°C)	$T_{\text{pared exterior aislante}}$ (°C)
0,03	86852,63	6750,53	49,31	49,30	21,63

## 16. Selección del material

### 16.1. Reactor R-101

Para la selección del material más adecuado para el recipiente del reactor R-101 se emplea la metodología Ahsby, tal y como se explicó en el apartado 2. *Selección del material de la Parte A: Diseño Mecánico del Anexo II. Cálculos justificativos*. A lo largo de este apartado se hará referencias a tablas, figuras y ecuaciones expuestas en dicho anexo.

En la Tabla 1 se presentan los requerimientos para el diseño de los recipientes a presión, donde se indica que la función principal es contener la presión de forma segura. Con el fin de cumplir este requerimiento, se sigue el criterio de vertido antes de ruptura (“*leak before break*”), que es el adecuado para recipientes de gran volumen, como es el caso del reactor R-101. Con este criterio se buscará maximizar el índice de material indicado en la *Ecuación 1*, con el que se buscan aquellos materiales más tenaces, es decir, con la capacidad de absorber energía antes de fracturarse. (33)

Además, se busca maximizar el índice de la *Ecuación 3*, para buscar los materiales con un mayor índice elástico. Este índice permite seleccionar los materiales que den menores

espesores del recipiente y, por tanto, que necesitan una menor cantidad de material, lo que reducirá el coste.

En la Figura 1 se representan los índices de material en el diagrama y se obtiene que los más adecuados son los aceros al carbono y los aceros inoxidable. Asimismo, en la Figura 2 se compara el precios de los mismos para ver cuál de ellos es más barato. (33)

Finalmente, se lleva a cabo un estudio de la compatibilidad química de las sustancias del sistema con los distintos materiales de construcción. Como se presenta en la Tabla 2, aquellos que tiene una mejor compatibilidad son el acero inoxidable 316 y el monel. Como se indica en la Tabla 3, el último tiene un coste por kilogramos mucho más elevado que el primero.

En conclusión, se selecciona el acero inoxidable AISI 316 ya que es uno de los materiales que logra maximizar los índices estudiados con el método Ashby. Asimismo, tiene una compatibilidad excelente con todos las sustancias del proceso, a excepción del anhídrido acético.

## 16.2. Camisa

Para el material de la camisa se ha seleccionado también el acero inoxidable 316, ya que es el material de construcción utilizado por el fabricante y el más habitual en este tipo de equipamiento. Este material es compatible con el agua de refrigeración que circula por la misma. (26)

## 17. Diseño mecánico del reactor

A continuación, se llevará a cabo el diseño mecánico del equipo empleando las ecuaciones y los planteamientos expuestos en la *Parte A. Diseño Mecánico del Anexo II. Cálculos Justificativos*. Como se explicó, para el diseño se seguirá el código *ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII Division 1*, ya que es el empleado para tanques a presión por debajo de los 20 Mpa, como es el caso del reactor R-101 que opera a 50 bar. En este apartado también se hará referencia a ecuaciones, tablas y figuras de la *Parte A: Diseño Mecánico*.

### 17.1. Presión y temperatura de diseño

Para conocer las condiciones de diseño se emplearon las ecuaciones de la *Parte A: Diseño Mecánico*. Se utilizó la *Ecuación 4* y *5* para determinar la presión de diseño con los dos métodos presentados y se seleccionó el mayor valor de presión de entre los dos.

$$P_d = 1,72 + 51,41 = 53,13 \text{ bar}$$

$$P_d = 1,1 \cdot 51,41 = 56,55 \text{ bar}$$

Como 56,55 bar es mayor que 53,13 bar, se considera que la presión de diseño para el recipiente del reactor R-101 es 56,55 bar.

Por otro lado, se emplea la *Ecuación 6* para determinar la temperatura de operación.

$$T_d(^{\circ}F) = 347 + 50 = 397^{\circ}F = 202,78^{\circ}C$$

En este caso, también es necesario determinar las condiciones de diseño para la camisa que está colocada rodeando al reactor. Se emplean de nuevo las *Ecuaciones 5-7*.

$$P_d = 1,72 + 4,96 = 6,68 \text{ bar}$$

$$P_d = 1,1 \cdot 4,96 = 5,45 \text{ bar}$$

$$T_d(^{\circ}F) = 122 + 50 = 172^{\circ}F = 77,78^{\circ}C$$

Por tanto, las camisa tiene una presión de diseño de 6,68 bar y 77,78 °C.

## 17.2. Espesor de la columna de burbujeo

Para determinar el espesor de la torre de burbujeo se debe calcular el espesor sujeto a presión interna y el sujeto a presión externa y seleccionar el mayor. Esto debe tenerse muy en cuenta ya que la parte interna del reactor está bajo la presión dada por la camisa, lo que puede llevar a que se produzca pandeo.

En primer lugar, para obtener el espesor mínimo que logre soportar la presión interna se utiliza la *Ecuación 7*, para obtener el espesor radial, y la *Ecuación 8*, para el longitudinal, ya que se trata de un recipiente cilíndrico. Se selecciona el espesor mayor, puesto que el diseño es siempre para el caso más desfavorable.

El valor del esfuerzo máximo permisible ha sido obtenido mediante la interpolación de los valores dados en la Figura 3 de la *Parte A: Diseño Mecánico*. Puesto que la temperatura de diseño es de 202,8 °C el valor de S obtenido para el acero inoxidable 316 es de 994,17 bar.

Por otro lado, la eficiencia de soldadura depende de la unión seleccionada y del examen radiográfico especificado en el código de diseño. En este caso, ya que el equipo está sometido a una elevada presión, se escoge una eficiencia de la soldadura máxima, es decir, se selecciona una junta a tope de doble soldadura con un examen radiográfico completo, que como se indicó en la Tabla 5 de la *Parte A: Diseño mecánico* toma el valor de 1.

Finalmente, los espesores mínimos son obtenidos como se indica a continuación.

$$t_{radial} = \frac{56,55 \cdot 2,34}{2 \cdot 994,17 \cdot 1 - 1,2 \cdot 57,55} = 0,0689 \text{ m} = 68,9 \text{ mm} > 1,5 \text{ mm}$$
$$t_{longitudinal} = \frac{56,55 \cdot 2,34}{4 \cdot 994,17 \cdot 1 - 0,8 \cdot 57,55} = 0,0337 \text{ m} = 33,7 \text{ mm} > 1,5 \text{ mm}$$

Por tanto, como el espesor calculado para la tensión radial es mayor que el calculado para la tensión longitudinal, se selecciona el primero. Asimismo, como se presenta se cumple lo indicado en la norma *ASME BPV Sec. VIII D.1* ya que los espesores son superiores a 1,5 mm.

Por último, se añade un factor de corrección por corrosión que como se mencionó en la *Parte A: Diseño mecánico* será de 4 mm. Por tanto, se obtiene un espesor de carcasa de 72,9 mm.

Por otro lado, para el diseño por presión externa se ha de calcular la presión crítica, la cual provoca el pandeo. Para ello se utiliza la *Ecuación 75* y posteriormente se aplica un factor de seguridad para determinar la presión admisible, la cual debe ser mayor a la presión de diseño de la camisa, *Ecuación 76*.

$$P_c = \frac{2,42 \cdot E_y \cdot \left(\frac{t}{D_i + 2 \cdot t}\right)^{5/2}}{\left\{(1 - \gamma^2)^{3/4} \cdot \left(\frac{L}{D_i + 2 \cdot t} - 0,45 \cdot \left(\frac{t}{D_i + 2 \cdot t}\right)^{1/2}\right)\right\}} \quad [75]$$

Siendo:

- $P_c$ : Presión crítica de pandeo (N/m<sup>2</sup>).
- $\gamma$ : Coeficiente de Poisson. Para la mayoría de los materiales de recipientes a presión se toma como 0,3.
- L: Longitud efectiva del recipiente (m).
- $E_y$ : Módulo de elasticidad del material (N/m<sup>2</sup>).

$$P_{adm} = \frac{P_c}{n} \quad [76]$$

Donde  $P_{adm}$  es la presión admisible (N/m<sup>2</sup>) y n un factor de seguridad, que toma el valor de 4, para asegurar que se trabaja en condiciones de seguridad máxima.

Se iniciará el cálculo tomando como espesor inicial el calculado para presión interna y se llevará a cabo un proceso iterativo hasta que la presión admisible obtenida sea mayor a la presión de diseño de la camisa. En esas condiciones se asegura que el recipiente no vaya a sufrir pandeo.

En este caso al iniciar el cálculo con el diámetro obtenido por presión interna, ya se consigue el objetivo de que la presión admisible sea superior a la de diseño. En la Tabla 47, se presenta el espesor mínimo que cumple esta condición.

*Tabla 47. Espesor mínimo necesario para soportar la tensión de la presión externa*

<b>P<sub>c</sub></b> <b>(bar)</b>	<b>P<sub>adm</sub></b> <b>(bar)</b>	<b>t<sub>mínimo</sub></b> <b>(mm)</b>	<b>t<sub>corregido</sub></b> <b>(mm)</b>
27,59	6,90	41,00	45,00

Finalmente, se selecciona para la carcasa el espesor obtenido por presión interna, ya que es superior y así no se producirá pandeo debido al efecto de la camisa. En conclusión, el espesor del recipiente es de 72,9 mm.

### 17.3. Espesor de la camisa de refrigeración

Según bibliografía, el cálculo del espesor mínimo para la camisa de media tubería se calcula utilizando la *Ecuación 77*. (34)

$$t_{camisa} = \frac{P_i \cdot r_i}{0,85 \cdot S - 0,6 \cdot P_i} \quad [77]$$

Siendo  $r_i$  el radio interno de la camisa (m), que como se especificó en el apartado 14. *Sistema de refrigeración* es de 73,15 mm.

El esfuerzo máximo permisible para el material de la camisa de acero inoxidable 316 a su temperatura de diseño (77,78 °C) es de 1185,10 bar.

Finalmente se obtiene un valor del espesor de 0,49 mm, como este valor está por debajo del espesor mínimo especificado por la norma *ASME BPV S. VIII D.1*, se selecciona un espesor de 1,5 mm. Asimismo, como lo que circula en el interior de la camisa es agua de refrigeración se ha decidido aplicar un factor de corrosión de 2 mm. Finalmente se obtiene que el espesor de la camisa es de 3,5 mm.

### 17.4. Selección y dimensionado de los cabezales

Como se explicó en la *Parte A: Diseño Mecánico* del presente anexo se ha realizado el cálculo de los espesores correspondientes a los cabezales abombados. Cabe destacar, que se ha descartado la utilización del cabezal plano, ya que sus características no están destinadas a un equipo como el que se está diseñando. Se emplean las *Ecuaciones 10-12*.

En la Tabla 48 se muestran los espesores obtenidos para cada uno de los cabezales. Asimismo, se indican los espesores tras añadir el factor de corrosión de 4 mm.

Tabla 48. Espesores de los distintos cabezales

Tipo de cabezal	t (m)	t (mm)	t <sub>corregido</sub> (mm)
Hemisférico	0,0335	33,46	37,46
Elíptico	0,0669	66,93	70,93
Toriesférico	0,1185	118,46	122,46

Finalmente, se opta por seleccionar un cabezal hemisférico, ya que, a pesar de su coste superior, son los más adecuados a presión elevadas. En resumen, se opta por primar la seguridad antes que el precio. Cabe destacar, que como material de construcción se seleccionó el acero inoxidable AISI 316, al igual que en la carcasa.

En la Figura 12 se presenta un esquema general de estos cabezales, donde aparecen indicados los parámetros fundamentales para su dimensionamiento según la norma DIN 28011. Hay que indicar que  $h_1$  es una altura que depende de los requerimientos del comprador y que en este caso no se añadirá. Los resultados de las dimensiones de los cabezales, superior e inferior, así como la altura final de la torre teniéndolos en cuenta se muestra en la Tabla 49.

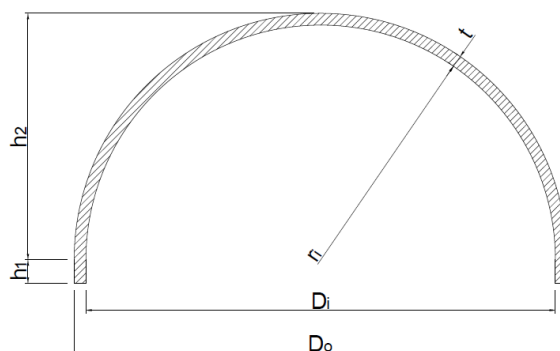


Figura 12. Dimensiones de un cabezal hemisférico (Elaboración propia)

Tabla 49. Dimensiones de los cabezales

$r_i$ (m)	$D_i$ (m)	$t$ (mm)	$D_o$ (m)	$h_1$ (m)	$h_2$ (m)	$L_{torre}$ (m)
1,17	2,34	37,50	2,41	0	1,21	18,97

### 17.5. Análisis de cargas

En este apartado se realizará un estudio de las cargas que puedan afectar al equipo, y cuya combinación puede provocar que el equipo colapse. Por lo que se ha de realizar el diseño para que el recipiente sea capaz de soportarlas.

#### 17.5.1. Cargas por peso

Una de las cargas principales que afecta de forma directa al equipo son las cargas debidas al peso del propio recipiente, de la camisa, del aislante, de los fluidos y de los internos del reactor.

En primer lugar, el peso del recipiente cilíndrico con cabezales abombados se ha determinado mediante la *Ecuación 13* de la *Parte A: Diseño Mecánico*.

Los datos utilizados y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 50.

Tabla 50. Peso del recipiente vacío

$C_w$	$\rho_m$ (kg/m <sup>3</sup> )	$t_{carcasa}$ (mm)	$D_m$ (m)	$g$ (m/s <sup>2</sup> )	$H_v$ (m)	$W_v$ (N)	$W_v$ (kN)
1,08	8030,00	72,90	2,41	9,81	18,97	982424,21	982,43

En segundo lugar, se calcula el peso de los fluidos que circulan a través del reactor R-101. Se trata de un flujo bifásico, por tanto habrá una carga producida por el peso del líquido y otra por el peso del gas. Aunque la carga del gas es mucho menor, casi despreciable frente al resto de cargas, se calculará su valor para mayor precisión. Para el cálculo se utilizarán la *Ecuación 78* y *79*.

$$W_L = V_L \cdot \rho_L \cdot g \quad [78]$$

$$W_g = V_g \cdot \rho_g \cdot g \quad [79]$$

Donde  $W_L$  se corresponde con el peso del líquido (N),  $V_L$  con el volumen del líquido ( $m^3$ ) y  $\rho_L$  con la densidad del líquido ( $kg/m^3$ ). Por otro lado,  $W_g$  es la carga por el peso del gas (N),  $V_g$  el volumen del gas ( $m^3$ ) y  $\rho_g$  la densidad del gas ( $kg/m^3$ ).

Además, también se ha de tener en cuenta el peso del fluido, en este caso agua de refrigeración, que circula por el interior de la camisa. Esta carga se calcula mediante la *Ecuación 80*. Los resultados de las cargas provocadas por el peso de los fluidos se muestran en la *Tabla 51*.

$$W_{cw} = m_{cw} \cdot \left( \frac{L_c}{v_{cw}} \right) \cdot g \quad [80]$$

*Tabla 51. Peso de los fluidos en el reactor*

$V_L$ ( $m^3$ )	$\rho_L$ ( $kg/m^3$ )	$V_g$ ( $m^3$ )	$\rho_g$ ( $kg/m^3$ )	$W_L$ (kN)	$W_g$ (N)	$m_{cw}$ (kg/s)	$L_c$ (m)	$v_{cw}$ (m/s)	$W_{cw}$ (kN)
57,06	1077,96	3,32	37,49	693,42	1220,38	24,04	596,43	2,86	49,18

Para la determinación del peso del distribuidor de gas y del separador superior,  $W_i$ , se utiliza la *Ecuación 81* que es una estimación para internos de acero, donde se incluye una carga de líquido usual, y que depende de la sección de los internos,  $S$  ( $m^2$ ). Por otro lado, se calcula el peso de la camisa,  $W_c$ , mediante la *Ecuación 82*.

$$W_i = 2 \cdot 1200 \cdot S \quad [81]$$

$$W_c = \frac{\pi \cdot d_{ic} \cdot L_c}{2} \cdot t_{camisa} \cdot \rho_m \cdot g \quad [82]$$

Por último, se determina la carga aportada por el peso del aislante,  $W_a$ . Como el aislante recubre la parte exterior de la camisa, su carga correspondiente se calcula mediante la *Ecuación 83*. Cabe destacar que, la densidad se duplica para tener en cuenta el sellado, las uniones y la humedad. Los datos empleados y el resultado obtenido de estas cargas se indican en la *Tabla 52*.

$$W_a = \frac{\pi \cdot (d_{ic} + t_{camisa}) \cdot L_c}{2} \cdot t_{aislante} \cdot 2 \cdot \rho_{aislante} \cdot g \quad [83]$$

Tabla 52. Cargas de internos y camisa

S (m <sup>2</sup> )	W <sub>i</sub> (N)	W <sub>i</sub> (kN)	d <sub>ic</sub> (cm)	t <sub>camisa</sub> (mm)	W <sub>c</sub> (N)	W <sub>c</sub> (kN)	t <sub>aislante</sub> (cm)	ρ <sub>aislante</sub> (kg/m <sup>3</sup> )	W <sub>a</sub> (N)	W <sub>a</sub> (kN)
4,3	10321,35	10,32	14,63	3,5	37789,67	37,79	3,00	100,00	8453,54	84,54

En conclusión, la carga total a la que está sometido la torre de burbujeo R-101 se corresponde con la suma de todas las cargas descritas anteriormente. Se utiliza la *Ecuación 84* y se obtiene un valor de la carga total de 1692,82 kN.

$$W_{total} = W_v + W_L + W_g + W_{cw} + W_i + W_c + W_a \quad [84]$$

Es importante señalar que no se lleva a cabo el cálculo para la carga en la prueba hidráulica, ya que la densidad de la mezcla del reactor es superior a la del agua. Por tanto, la carga total será mayor en las condiciones de operación del reactor R-101.

### 17.5.2. Cargas por viento

La columna de burbujeo a diseñar tiene una altura elevada, cercana a los 22 metros, ya que como se indicará posteriormente en el apartado 17.6. *Selección de soporte* se le añadirá un soporte de 4 m. Por tanto las cargas que puede provocar el viento deben ser consideradas, ya que tienen gran relevancia y afectan de manera directa al equipo. (14)

Para ello, en primer lugar, se ha empleado el procedimiento explicado en la *Parte A: Diseño Mecánico* del presente anexo. En concreto se emplearon las *Ecuaciones 15-19*. Los datos empleados y los resultados obtenidos se presentan en la Tabla 53.

Tabla 53. Momento flector provocado por el viento

u <sub>w</sub> (km/h)	P <sub>w</sub> (N/m <sup>2</sup> )	D <sub>eff</sub> (m)	W (N/m)	x (m)	M <sub>x</sub> (N·m)
100	500	2,70	1349,55	21,76	319481,38

### 17.5.3. Análisis de tensiones

#### 17.5.3.1. Esfuerzos primarios

Los esfuerzos radiales y longitudinales ejercidos por la presión interna se calculan mediante la *Ecuación 20* y la *Ecuación 21* de la *Parte A: Diseño Mecánico* de este mismo anexo. Los cálculos realizados se presentan a continuación. (14)

$$\sigma_r = \frac{56,55 \cdot 2,34}{2 \cdot 0,0729} = 907,55 \text{ bar} = 90755535,91 \frac{N}{m^2} = 90,76 \frac{N}{mm^2}$$

$$\sigma_L = \frac{56,55 \cdot 2,34}{4 \cdot 0,0729} = 453,78 \text{ bar} = 45377767,45 \frac{N}{m^2} = 45,38 \frac{N}{mm^2}$$

Posteriormente se calculará el esfuerzo directo,  $\sigma_w$ , utilizando la *Ecuación 22*. El cálculo realizado es el siguiente. (14)

$$\sigma_w = \frac{-1692819,34}{\pi \cdot (2,34 + 0,0729) \cdot 0,0729} = -3063367,02 \frac{N}{m^2} = -3,06 \frac{N}{mm^2}$$

Por último, se determina el segundo momento del área del recipiente alrededor del plano de flexión con la *Ecuación 24* y los esfuerzos de flexión,  $\sigma_b$ , mediante la *Ecuación 23*. (14)

$$I_v = \frac{\pi}{64} \cdot ((2,34 + 2 \cdot 0,0729)^4 - 2,34^4) = 0,40 m^4$$

$$\sigma_b = \pm \frac{319481,38}{0,40} \cdot \left( \frac{2,34}{2} + 0,0729 \right) = \pm 986468,93 \frac{N}{m^2} = 0,99 \frac{N}{mm^2}$$

### 17.5.3.2. Esfuerzos principales

En primer lugar, se ha de calcular el esfuerzo longitudinal total dependiendo de si el esfuerzo de flexión es positivo o negativo. Se emplea la *Ecuación 25* de la *Parte A: Diseño Mecánico*.

$$\sigma_z = 45,38 - 3,06 + 0,99 = 43,30 \frac{N}{mm^2}$$

$$\sigma_z = 45,38 - 3,06 - 0,99 = 41,33 \frac{N}{mm^2}$$

Una vez calculados, se determinan los esfuerzos principales a partir de la *Ecuación 26*, 27 y 28. En la Tabla 54 se muestra el valor de los esfuerzos principales obtenidos y del esfuerzo longitudinal total, tanto si el esfuerzo de flexión es de expansión como de compresión.

Tabla 54. Esfuerzos principales

	+ $\sigma_b$	- $\sigma_b$
$\sigma_z$ (N/mm <sup>2</sup> )	43,30	41,33
$\sigma_1$ (N/mm <sup>2</sup> )	90,76	90,76
$\sigma_2$ (N/mm <sup>2</sup> )	43,30	41,33
$\sigma_3$ (N/mm <sup>2</sup> )		-2,83

### 17.5.3.3. Intensidad de esfuerzo permisibles

La intensidad máxima de esfuerzo en cualquier punto del reactor se obtiene como el valor máximo resultante de la *Ecuación 29*, *30* o *31* de la *Parte A: Diseño Mecánico*. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 55. Tal y como se presenta, ninguna de las intensidades calculadas supera al esfuerzo máximo permisible del material seleccionado. Por tanto, se confirma que el espesor obtenido para el reactor es adecuado para soportar las tensiones y no es necesario seleccionar otro material de construcción.

Tabla 55. Intensidad de los esfuerzos permisibles

	$+\sigma_b$	$-\sigma_b$
$\sigma_1 - \sigma_2$ (N/mm <sup>2</sup> )	47,45	49,43
$\sigma_1 - \sigma_3$ (N/mm <sup>2</sup> )	93,58	93,58
$\sigma_2 - \sigma_3$ (N/mm <sup>2</sup> )	46,13	44,16
<b>S</b> (N/mm <sup>2</sup> )	99,42	

#### 17.5.3.4. Esfuerzos compresivos y estabilidad elástica

Como los esfuerzos axiales resultantes,  $\sigma_z$ , no son compresivos, no existe la posibilidad de que se produzca una inestabilidad elástica, que produzca pandeo. De esta manera, se llega a la conclusión de que el diseño mecánico realizado ha sido correcto.

### 17.6. Selección del soporte

Como se comentó en la *Parte A: Diseño Mecánico del Anexo II. Cálculos justificativos* el reactor estará colocado de manera vertical y se empleará una falda recta de acero inoxidable 316. Asimismo, la falda tendrá una altura de 4 metros, lo que llevaría a una altura final de la columna de burbujeo de 21,76 metros.

Como ya se comentó, es necesario asegurar que el espesor de la falda sea capaz de aguantar las tensiones que hay sobre la misma. Para ello se deben determinar los esfuerzos de compresión y flexión y los esfuerzos resultante con las *Ecuaciones 35-38* de la *Parte A: Diseño Mecánico*. Para determinar el espesor del soporte se deberá calcular aquel que cumpla la *Ecuación 39* y la *40*.

Los resultados finales obtenidos se muestran en la Tabla 56. Se obtiene un espesor mínimo que cumple las ecuaciones y al que se le añadirán 4 milímetros de corrección por seguridad, obteniendo así el espesor final del soporte.

Tabla 56. Espesor del soporte tipo falda

$t_{sk,min} = 5,70$ mm				
$D_s$ (m)	$\sigma_{bs}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{ws}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{tensión}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{compresión}$ (N/mm <sup>2</sup> )
2,49	11,52	37,94	-26,42	49,46
$t_{sk} = 9,70$ mm				
$D_s$ (m)	$\sigma_{bs}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{ws}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{tensión}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{compresión}$ (N/mm <sup>2</sup> )
2,49	6,76	22,26	-15,50	29,02

Se comprueba el cumplimiento de las restricciones de diseño con el espesor seleccionado en la Tabla 57.

Tabla 57. Comprobación de las restricciones de diseño

$\sigma_{tensión} < S \cdot E \cdot \text{sen}\theta$ (N/mm <sup>2</sup> )
-15,50 < 88,88
$\sigma_{compresión} < 0,125 \cdot E_Y \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) \cdot \text{sen}\theta$ (N/mm <sup>2</sup> )
29,02 < 84,17

### 17.7. Tubuladuras conexiones y compensación de aperturas

El reactor cuenta con cuatro tubuladuras, para entrada y salida del líquido y del gas. Los diámetros nominales de estas tuberías se indican en la *Parte D: Dimensionamiento básico de los equipos del Anexo II. Cálculos justificativos*. Asimismo, dispondrá de un determinado número de orificios de menor tamaño para los distintos tipos de sistemas de control empleados en el equipo y para la válvula de alivio PSV-113 que se diseñará posteriormente en el apartado 18. *Válvula de alivio*. También dispondrá de una boca de hombre en la parte superior del reactor y de otra en el soporte, que serán necesarias para mantenimiento y posibles reparaciones desde el interior de la columna o desde la parte inferior.

Como se comentó en la *Parte A: Diseño Mecánico* del presente anexo, en los bordes de las conexiones se emplearán almohadillas soldadas para diluir las tensiones que se pueden generar en estos puntos. El diámetro exterior de estas almohadillas es el doble del diámetro de la tubería instalada, por lo que según el ‘método de áreas iguales’ el espesor de la almohadilla para la entrada y salida de los líquidos es igual a 72,9 mm y para la entrada y salida del gas es igual a 37,5 mm. (14)

## 18. Válvula de alivio

Como medida de seguridad para evitar cualquier accidente producido por una sobrepresión en la columna, se instalará una válvula de alivio de presión (PSV-113) en la parte superior. Su diseño y dimensionamiento se llevará a cabo utilizando la normativa API RP 520: *Sizing, Selection, and Installation of Pressure-Relieving Devices in Refineries* y se seleccionará la válvula de alivio cargada por resorte, que es la más utilizada en la industria tanto para líquidos como para gases y se presenta un esquema en la Figura 13. (35)

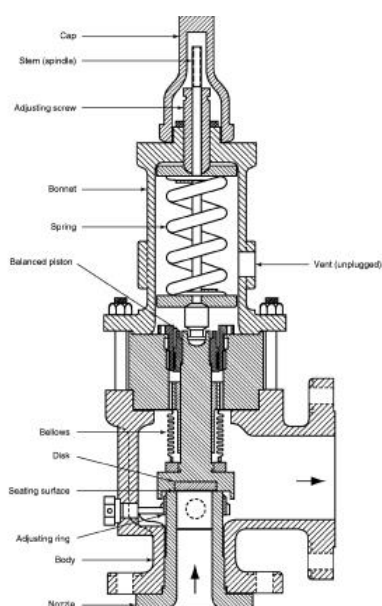


Figura 13. Válvula de alivio cargada por resorte (35)

### 18.1. Dimensionamiento de la válvula

Como se está diseñando una columna de burbujeo la corriente que sale por la parte superior será la gaseosa, por esa razón se diseñará una válvula de alivio para gases. En este caso, lo primero es concretar si se trabaja bajo condiciones de flujo crítico. Para ello se utiliza la relación de los gases ideales expresada en la *Ecuación 85*, la cual permite estimar la presión crítica del flujo a través de la boquilla,  $P_{cf}$ . (35)

$$\frac{P_{cf}}{P_1} = \left[ \frac{2}{k+1} \right]^{\frac{k}{k-1}} \quad [85]$$

La  $P_1$  se corresponde con la presión de entrada a la válvula aguas arriba que según el código API RP 520 será la presión de diseño más un 10% de sobrepresión y más la presión atmosférica, *Ecuación 86*. Por otro lado, la  $k$  se corresponde al ratio entre las capacidades caloríficas del gas ideal ( $C_p/C_v$ ) que se determina utilizando el simulador *Aspen HYSYS*. (35) (6)

$$P_1 = P_d \cdot 1,1 + P_{atm} \quad [86]$$

Los resultados obtenidos se presentan en la Tabla 58. Se llega a la conclusión de que el diseño de la válvula de alivio debe seguir el procedimiento propuesto para el flujo crítico, ya que la  $P_{cf}$  obtenida está por encima de la presión exterior del sistema de alivio, es decir, de la presión atmosférica.

Tabla 58. Presión de flujo crítica

$P_d$ (bar)	$P_1$ (bar)	$k$	$P_{cf}$ (bar)
56,55	63,20	1,39	33,47

Una vez determinado el flujo, se calcula el área de descarga,  $A_d$  (mm<sup>2</sup>), de la válvula de alivio siguiendo lo indicado por el código API RP 520. Se utiliza la *Ecuación 87*. (35)

$$A_d = \frac{13160 \cdot m_g}{C \cdot K_d \cdot P_1 \cdot K_b \cdot K_c} \cdot \sqrt{\frac{T \cdot Z}{M_M}} \quad [87]$$

En esta ecuación  $m_g$  es el caudal másico especificado para la válvula, que se corresponderá con el caudal másico de entrada del gas en el reactor en kg/h, y  $C$  es un coeficiente que se calcula mediante la *Ecuación 88*.

$$C = 520 \cdot \sqrt{k \cdot \left( \frac{2}{k+1} \right)^{\frac{k+1}{k-1}}} \quad [88]$$

El valor de  $K_d$  representa el coeficiente efectivo de descarga. En este cálculo preliminar se supondrá un valor de 0,975 ya que se instala una válvula de alivio. Asimismo,  $K_c$  es un factor

de corrección relacionado con los discos de ruptura, como en este caso no se instala toma el valor de 1, y  $K_b$  es un factor de corrección debido a la contrapresión que solo se tiene en cuenta con determinadas válvulas, en este caso no aplica y toma el valor de 1. (35)

Por último, T se corresponde a la temperatura de entrada del gas a la válvula en K, Z es un factor de compresibilidad que muestra la desviación del gas de la idealidad y  $M_M$  es el peso molecular del gas de entrada, en este caso de la mezcla de CO y H<sub>2</sub>, en kg/kmol.

Los datos utilizados y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 59.

Tabla 59. Área de descarga de la válvula de alivio

mgs (kg/h)	C	Kd	Kb	Kc	P1 (kPa)	T (K)	Z	MM (kg/kmol)	Ad (mm <sup>2</sup> )
6934,40	355,36	0,975	1	1	6320	448	1	27,82	167,25

Finalmente se estandariza, por lo que es necesario seleccionar una válvula del fabricante que proporcione un área de descarga igual o superior a la obtenida. En la Figura 14 se presenta el catálogo de válvulas cargadas por resorte de Crosby.

Orifice Designation and Effective Area Sq. In. (Sq. mm)	Series BP Fixed Blowdown Balanced Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Liquid 3/4" x 1", 1" x 1"	Style JOS/JBS Closed Bonnet Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam 1 D 2 to 8 T, 10	Style JLT-JOS/JBS Closed Bonnet Pressure Relief Valve Liquid 1 D 1 to 8 T, 10	Style JOS-H Open Bonnet Pressure Relief Valve Steam 1 D 2 to 8 T, 10	Style JOJB Closed Bonnet Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam 10 V 14 to 20 BB, 24	Series 800 Adjustable Blowdown Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam 3/4" x 1" to 1-1/2" x 2-1/2"	Series 900 OMNI-TRIM Fixed Blowdown Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam, Liquid 1/2" x 1" to 1-1/2" x 2-1/2"
-	0.074 (47.7)	*					*
D	0.110 (71.0)	*	*	*	*	*	*
E	0.196 (126)	*	*	*	*	*	*
F	0.307 (198)	*	*	*	*	*	*
G	0.503 (325)	*	*	*	*	*	*
H	0.785 (506)	*	*	*	*	*	*
J	1.287 (830)	*	*	*	*	*	*
K	1.838 (1186)	*	*	*	*	*	*
L	2.853 (1841)	*	*	*	*	*	*
M	3.600 (2323)	*	*	*	*	*	*
N	4.340 (2800)	*	*	*	*	*	*
P	6.379 (4116)	*	*	*	*	*	*
Q	11.05 (7129)	*	*	*	*	*	*
R	16.00 (10323)	*	*	*	*	*	*
T	26.00 (16774)	*	*	*	*	*	*
T <sub>2</sub>	27.87 (17982)	*	*	*	*	*	*
V	42.19 (27219)	*	*	*	*	*	*
W	60.75 (39193)	*	*	*	*	*	*
Y	82.68 (53342)	*	*	*	*	*	*
Z	90.95 (58677)	*	*	*	*	*	*
Z <sub>2</sub>	108.86 (70232)	*	*	*	*	*	*
AA	136.69 (88187)	*	*	*	*	*	*
BB	168.74 (108864)	*	*	*	*	*	*
BB <sub>2</sub>	185.00 (119355)	*	*	*	*	*	*
Crosby Catalog No.		310	310	310	307	902	902

Figura 14. Catalogo Crosby de válvulas de alivio (36)

Por tanto, se escoge una válvula con orificios del tipo F y que proporciona un área de descarga de 198 mm<sup>2</sup>. Entre los distintos tipos de válvula, se selecciona una del estilo JOS, ya que son adecuadas para trabajar con gases.

## 19. Hoja de especificaciones

<i>Planta de producción de anhídrido acético por carbonilación de acetato de metilo</i>			
<b>REACTOR DE BURBUJEJO CON CATALIZADOR HOMOGÉNEO</b>			
Nombre del equipo	Reactor R-101		
Etiqueta del equipo	R-101		
Código de diseño	ASME BPV Sección VIII Div. 1		
Diámetro máximo (incluido aislante)	mm	2699,10	
Altura total (desde el suelo)	m	21,76	
<b>DATOS DEL PROCESO</b>			
Recipiente	Caudal de líquido de entrada	kg/s	9,81
	Caudal de gas de entrada	kg/s	1,93
	Temperatura de operación	°C	175
	Presión de operación	bar	50
	Densidad de la mezcla líquida	kg/m <sup>3</sup>	1077,96
	Densidad de la mezcla de gas	kg/m <sup>3</sup>	37,49
Camisa	Caudal de refrigerante	kg/s	24,04
	Temperatura de operación	°C	49,32
	Presión de operación	bar	4,96
	Densidad del agua	kg/m <sup>3</sup>	1000,00
Tipo de refrigerante	Agua de refrigeración		
Tipo de catalizador	Cloruro de carbonilo de rodio		
<b>CONSTRUCCIÓN Y MATERIALES</b>			
Material del recipiente	Acero inoxidable 316		
Diámetro interno del recipiente	mm	2340,00	
Diámetro externo del recipiente	mm	2485,80	
Altura de la carcasa cilíndrica	m	16,55	
Altura del equipo con cabezales incluidos	m	18,97	
Temperatura de diseño del recipiente	°C	202,78	
Presión de diseño del recipiente	bar	56,55	
Material de la camisa	Acero inoxidable 316		
Radio interno de la camisa	mm	73,15	
Radio externo de la camisa	mm	76,65	
Longitud de la camisa	m	596,43	
Número de vueltas de la camisa	81,13		
Temperatura de diseño de la camisa	°C	77,78	
Presión de diseño de la camisa	bar	6,68	
<i>Pitch</i> entre medias tuberías	mm	173,30	
Caída de presión en la camisa	bar	3,96	
Caída de presión total en el recipiente	bar	1,41	
<b>NOTAS</b>			
El reactor R-101 cuenta con dos cabezales hemisféricos., el superior y el inferior. Se emplea como aislante 30 mm de lana de roca, que rodean la parte externa de la camisa del reactor. El soporte del equipo es de tipo falda recta y tiene una altura de 4 m.			

## 20. Bibliografía

1. **DORAISWAMY, L. K.** *Organic Synthesis Engineering*. New York : Oxford University Press, 2001. ISBN 0-19-509489-4.

2. *Kinetic study on the carbonylation of methyl acetate to acetic anhydride catalyzed by partially quaternized poly(4-vinylpyridine) bound rhodium complexes.* **WANG, E., LI, X. y**

**JIANG, D.** 11, Beijing : John Wiley & Sons, 1997, *Polymers for Advanced Technologies*, Vol. 8. ISSN 10427147.

3. *Eastman Chemical Company Acetic Anhydride Process*. **ZOELLER, J. R., y otros.** 1, Amsterdam : Elsevier Science Publishers B.V., 1992, *Catalysis Today*, Vol. 13. ISSN 09205861.

4. **LARKINS, T. H., y otros.** *Preparation of Acetic Anhydride*. 0 0649 986 England, 14 de Agosto de 1985.

5. *Investigations of the synthesis of acetic anhydride by homogeneous catalysis. I. Catalytic system and process parameters*. **LUFT, G. y SCHROD, M.** 2, Darmstadt : Elsevier Sequoia, 1983, *Journal of Molecular Catalysis*, Vol. 20. ISSN 03045102.

6. **ASPEN TECHNOLOGY INC.** AspenTech [programa informático]. [En línea] [Citado el: 10 de Mayo de 2024.] <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-hysys>.

7. **ULLMANN, F. y GERHARTZ, W.** *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 5th. Deerfield Beach : Advisory Board, 1985. Vol. A1. ISBN 0-89573-151-7.

8. **AGREDA, V. H.** *Acetic Acid and Its Derivatives*. Primera. Boca Ratón : CRC Press, 1992. pág. 468. Vol. 49. ISBN 9780824787929.

9. **SANTAMARÍA, J. M., y otros.** *Ingeniería de Reactores*. Madrid : Síntesis, 1999. ISBN 84-7738- 665-X.

10. **TEGANI HOSEA KIMWERI, H.** *Enhancement of gas-liquid mass transfer in hydrometallurgical leaching systems*. Department of Metals and Materials Engineering, The University of British Columbia. Vancouver : s.n., 2001. Tesis doctoral.

11. *Hydrocarbonylation of methyl acetate using a homogeneous Rh(CO)Cl(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub> complex as a catalyst precursor: Kinetic modeling*. **KELKAR, A. A., JAGANATHAN, R. y CHAUDHARI, R. V.** 7, India : American Chemical Society, 2001, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 40. ISSN 08885885.

12. **KAYODE COKER, A.** *Ludwig's Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants*. 4ª ed. Burlington : Gulf Professional Publishing, 2013. ISBN 978-0-7506-8524-5.

13. **GREEN, D. W. y SOUTHARD, M.** *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 9ª ed. New York : McGraw-Hill Education, 2019. ISBN 978-0-07-183409-4.

14. **SINNOTT, R. K. y TOWLER, G.** *Diseño en Ingeniería Química*. 5ª ed. Barcelona : Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
15. **WOLF-DIETER, D.** *Bubble Column Reactors*. Aarau : John Wiley and Sons, 1992. ISBN 0-471-91811-3.
16. *Bubble diameter correlation via numerical experiment*. **POHORECKI, R., y otros.** 1, Warsaw : Chemical Engineering Journal, 2005, Vol. 113. ISSN 13858947.
17. **GOVIND PANGARKAR, V.** *Design of Multiphase Reactors*. Hoboken : John Wiley & Sons, 2015. ISBN 978-1-118-80756-9.
18. *Design parameters estimations for bubble column reactors*. **SHAH, Y. T., y otros.** 3, s.l. : AIChE Journal, 1982, Vol. 28. ISSN 15475905.
19. *Organic Liquids in a Bubble Column: Holdups and mass transfer coefficients*. **ÖZTÜRK, S. S., SCHUMPE, A. y DECKWER, Deckwer, W. D.** 9, s.l. : AIChE Journal, 1987, Vol. 33. ISSN 15475905.
20. **KUNII, D. y LEVENSPIEL, O.** *Fluidization Engineering*. 2ª ed. Stoneham : Butterworth-Heinemann, 1991. ISBN 0-409-90233-0.
21. **CUNILL, F., IBORRA, M. y TEJERO, J.** Ampliación de Reactores Químicos. *Apuntes*. [En línea] 2010. [Citado el: 1 de Abril de 2024.] <https://diposit.ub.edu/dspace/bitstream/2445/11903/1/APUNTES%20DE%20AMPLIACI%C3%93N%20DE%20REACTORES%20QU%C3%8DMICOS.pdf>.
22. *Gas hold up in bubble column at high pressure and high temperature*. **LEONARD, C., y otros.** Marseille : Chemical Engineering Science, 2019, Vol. 200, págs. 186-202. ISSN 00092509.
23. *Modeling and simulation of bubble column reactors*. **SCHLÜTER, S., STEIFF, A. y WEINSPACH, P. M.** 2, Dortmund : Chemical Engineering and Processing., 1992, Vol. 31. ISSN 02552701.
24. **SINNOTT, R. K.** *Chemical Engineering Design*. Cuarta ed. Oxford : Coulson & Richardson's, 2005. ISBN 0-7506-6538-6.
25. **WARD VESSEL & EXCHANGER CORP.** Ward Vessel & Exchanger. [En línea] [Citado el: 2 de Abril de 2024.] <https://wardvesselandexchanger.com/reactors/>.
26. **R-V INDUSTRIES INC.** Thomasnet. *Pressure Vessels Jacket Selection and Surface Enhancement*. [En línea] [Citado el: 2 de Abril de 2024.] <https://cdn.thomasnet.com/ccp/00145878/292146.pdf>.

27. **QUALITY TUBE SERVICES.** Quality Tube Services. *Fittings : Butt weld ASTM A234 Grade WPB.* [En línea] [Citado el: 25 de Mayo de 2024.] <https://qualitytube.co.za/2011/05/buttweld-astm-a234-grade-wpb/#3>.

28. *Correlation of Steam Velocity and Pipe Diameter with Heat Transfer Performance on 120° Half-Pipe Jacket.* **WIDARTI, S., RAHAYU, I. G. y PRAYOGO, S.** 1, Bandung : Fluida, 2023, Vol. 16. ISSN 1412-8543.

29. **CARPENTER, K. J.** Thermopedia. [En línea] 2 de Febrero de 2011. [Citado el: 7 de Abril de 2024.] <https://www.thermopedia.com/cn/content/547/>.

30. **MCKETTA, J. J.** *Heat Transfer Design Methods.* s.l. : CRC Press, 1991. ISBN 9780849306655.

31. **ROCKWOOL TECHNICAL INSULATION.** Rockwool. *ProRox® PS 960.* [En línea] 4 de Abril de 2018. [Citado el: 30 de Abril de 2024.] <https://rti.rockwool.com/products/industrial/prorox-ps-960/>.

32. **INCROPERA, F. P. y DEWITT, D. P.** *Fundamentos de transferencia de calor.* Naucalpan de Juárez : Prentice Hall Hispanoamericana S. A., 1999. ISBN 970-17-0170-4.

33. **ASHBY, M. F.** *Materials Selection in Mechanical Design.* Oxford : Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. ISBN 0 7506 6168 2.

34. *A design method for half-pipe jacketed vessels based on numerical limit-load analysis.* **LI, W., y otros.** 2, s.l. : Wiley, 2022, Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering, Vol. 17. ISSN 19322143.

35. **AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE.** Sizing, Selection, and Installation of Pressure-Relieving Devices in Refineries. *Part I-Sizing and Selection.* [En línea] [Citado el: 12 de Junio de 2024.] [https://www.usb.ac.ir/FileStaff/5658\\_2018-10-22-13-55-26.pdf](https://www.usb.ac.ir/FileStaff/5658_2018-10-22-13-55-26.pdf).

36. **CROSBY VALVE INC.** *Crosby® Pressure Relief Valve Engineering Handbook.* Estados Unidos : s.n., 1997. Technical Document No. TP-V300.

---

**PARTE C:**

**Columna de  
destilación T-202**

---

## Índice

1.	Introducción.....	1
2.	Especificaciones de diseño para la columna de destilación.....	1
2.1.	Especificaciones de la corriente de alimentación .....	2
2.2.	Pureza del producto .....	3
2.3.	Condiciones de operación.....	3
2.4.	Selección del tipo de dispositivo de contacto .....	4
3.	Determinación del número de etapas de equilibrio .....	5
3.1.	Consideraciones de reflujo.....	5
3.2.	Balance de materia.....	5
3.3.	Balance de energía .....	6
3.4.	Equilibrio líquido-vapor .....	7
3.5.	Diseño aproximado de la columna: Método McCabe-Thiele .....	14
3.6.	Diseño riguroso de la columna: Metodología MESH.....	17
3.6.1.	Cálculo de las entalpías específicas .....	18
3.6.2.	Cálculo de etapas .....	19
3.7.	Eficiencia de la columna.....	27
4.	Diseño hidráulico.....	28
4.1.	Caudales de líquido y de vapor.....	28
4.2.	Propiedades físico-químicas .....	28
4.3.	Espaciado entre platos .....	30
4.4.	Diámetro de la columna.....	30
4.5.	Patrón de flujo.....	32
4.6.	Construcción del plato .....	33
4.7.	Comprobación de la velocidad de goteo.....	36
4.8.	Comprobación de la caída de presión.....	37
4.9.	Comprobación del retorno de la bajante .....	38
4.10.	Verificación del tiempo de residencia.....	39
4.11.	Diseño hidráulico del plato.....	39

4.12.	Comprobación de la inundación y del arrastre .....	42
5.	Diseño mecánico .....	43
5.1.	Selección del material de construcción.....	43
5.2.	Temperatura de diseño .....	44
5.3.	Presión de diseño .....	44
5.4.	Espesor de la carcasa .....	44
5.5.	Cabezales .....	45
5.6.	Altura de la columna.....	46
5.7.	Aislante térmico.....	47
5.8.	Cargas .....	50
5.9.	Análisis de esfuerzos y tensiones.....	51
5.10.	Aberturas y conexiones.....	52
5.11.	Soporte.....	53
6.	Válvula de alivio.....	54
7.	Hoja de especificaciones de la columna de destilación .....	56
8.	Bibliografía.....	57

## 1. Introducción

Esta Parte del *Anexo II: Cálculos justificativos* se centrará en el diseño de la columna de destilación T-202 del proceso de producción de anhídrido acético.

La destilación es probablemente el proceso de separación más ampliamente usado en la industria química y la separación de mezclas líquidas mediante este método depende de la diferencia de volatilidad de los compuestos presentes. Esta torre busca separar una corriente pseudo-binaria de ácido acético y anhídrido acético, siendo este último el producto de interés. (1)

Se distinguen dos secciones, una que va desde la alimentación principal hasta la cabeza del equipo denominada sección de enriquecimiento y otra desde la alimentación hasta la cola llamada de agotamiento.

Las torres de separación pueden tener más de una corriente de alimentación e incluso salidas laterales a lo largo de la carcasa. En la Figura 1 se muestran un esquema de ello.

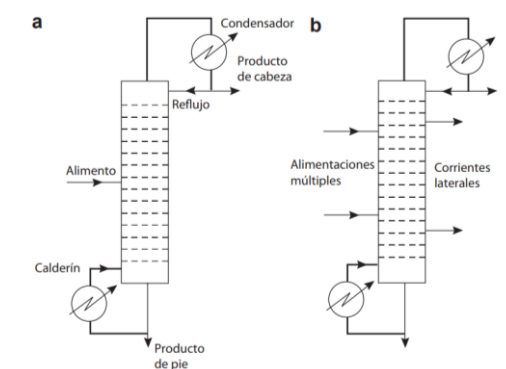


Figura 1. Columna con alimentación simple A y columna con alimentación múltiple B. (2)

Por lo general, las columnas suelen contar con una serie de equipos auxiliares tales como condensadores parciales o totales, calderas, bombas de reflujo y tanques de reflujo. Además el modo de operación habitual es el continuo pero también pueden trabajar en discontinuo dependiendo de los requerimientos económicos y de proceso.

## 2. Especificaciones de diseño para la columna de destilación

El diseño de la columna de destilación puede ser dividido en los siguientes pasos: (1)

- Especificar el grado de separación requerido: según las especificaciones del producto.
- Seleccionar las condiciones de operación: proceso batch o continuo, presión de operación, etc.
- Seleccionar el tipo de dispositivo de contacto: platos o relleno empaquetado.
- Determinar el número de etapas de equilibrio y los requerimientos de reflujo.
- Diseño hidráulico y mecánico

## 2.1. Especificaciones de la corriente de alimentación

La corriente de entrada de la columna de destilación que se procede a diseñar corresponde con la número 21 del diagrama de flujo del *Documento II*, y se trata de una mezcla compuesta por ácido acético y anhídrido acético. Sin embargo, es importante mencionar que, aunque en cantidades ínfimas, habría presente algún resto de metil acetato y yoduro de metilo de la columna de destilación previa. En la Tabla 1 se recogen los flujos y fracciones molares de cada compuesto en la corriente.

Tabla 1. Especificaciones de la corriente cuaternaria de alimentación de la columna de destilación.

Compuesto	Flujo molar (kmol/h)	Fracción molar $X_{E,i}$
Ácido acético (AcOH)	50,963	0,278
Anhídrido acético (Ac <sub>2</sub> O)	132,332	0,722
Yoduro de metilo (MeI)	$3,588 \cdot 10^{-6}$	<0,0001
Metil acetato (MeOAc)	$4,792 \cdot 10^{-5}$	<0,0001
<b>TOTAL</b>	<b>183,295</b>	<b>&gt;0,999</b>

Como se aprecia, la cantidad de MeI y MeOAc es insignificante en comparación con los primeros compuestos de la tabla. Por lo que para el diseño de la columna, se toma como aceptable tratar la mezcla cuaternaria como pseudo binaria, formada por ácido y anhídrido acético. Además, según bibliografía (1), cuando la suma de concentración de los componentes no clave es menor al 10%, se podrán agrupar a los componentes clave. De los dos compuestos del sistema, el más volátil es el ácido acético, por lo que en principio se asumirá que la mayor cantidad de ácido abandonará el equipo por cabezas y la de anhídrido por colas. Mencionar que según lo asumido, si cualquier pequeña traza de los compuestos despreciados ingresara a la columna, estos la abandonarían por cabezas debido a su elevada volatilidad. De este modo, la corriente se tomará de la siguiente manera.

Tabla 2. Especificaciones de la corriente pseudo binaria de alimentación de la columna.

Compuesto	Flujo molar (kmol/h)	Fracción molar $X_{E,i}$
Ácido acético (AcOH)	50,963	0,278
Anhídrido acético (Ac <sub>2</sub> O)	132,332	0,722
<b>TOTAL</b>	<b>183,295</b>	<b>1,000</b>

Otra característica de la alimentación, es que la corriente se introduce al equipo como líquido saturado, es decir, un pequeño aumento en la temperatura, sin modificar la presión, provoca que parte del líquido se convierta en vapor.

## 2.2. Pureza del producto

El objetivo de esta columna de destilación es obtener como producto una corriente de anhídrido acético a una cierta pureza. Dicho valor de pureza se selecciona en función de las necesidades que presenten los potenciales clientes o la oferta de empresas competidoras entre otras. Teniendo en cuenta aspecto como los mencionados, se decide producir el producto con una composición molar del 99,5%.

Empleando el *software Aspen HYSYS*, se realizaron diversas simulaciones de la columna fijando la pureza deseada en la corriente de colas, y se concluye que como primera estimación se obtendría una corriente de destilado con ácido acético y anhídrido acético con una composición molar del 85% de ácido.

## 2.3. Condiciones de operación

Como se comentó en la introducción, las columnas de destilación pueden operar de forma continua o discontinua. En este caso, debido a los elevados caudales tanto de entrada como de salida, se operará de forma continua.

Un factor crucial en el diseño de columnas de destilación es la presión de operación. Generalmente, los equipos industriales como las columnas de destilación suelen trabajar en un rango de 1 a 10 bares. Para presiones superiores a los 10 bares, el espesor de la carcasa suele ser mayor que a menores presiones, y ello conlleva un costo de equipo más elevado. Del mismo modo, a pesar de que operar a vacío puede presentar beneficios como reducir el punto de ebullición de las sustancias, requiere técnicas de construcción especiales que también provocan que el coste del equipo sea mayor. Por ende, operar a una presión fuera del rango habitual debe estar justificado. (3)

Otra consideración para seleccionar la presión de la columna es que se precisa que el condensador pueda operar con agua de refrigeración. Esto conlleva que la temperatura de rocío de la corriente que se pretende destilar se encuentre por encima de los 30°C, ya que se considera que es la máxima temperatura que puede alcanzar el agua de refrigeración en verano. Si por algún motivo las condiciones no permitieran emplear agua, habría que utilizar otro tipo de utilidad como por ejemplo salmuera. (1)

Finalmente se decide como primera estimación, que la presión de operación de la columna sea de 1,15 bar. Posteriormente en el apartado 3.4. *Equilibrio líquido-vapor* se comprobará si esta presión puede ser válida para la operación. Por otro lado, como hasta conocer el número de etapas reales no es posible calcular la caída de presión del equipo, se considerará dicha presión como constante para poder proceder con el diseño. La decisión de

seleccionar esa presión no solo se respalda con la literatura consultada. Como se mencionó en apartados anteriores, el proceso consta de un tren de destiladores formado por dos columnas y en el presente proyecto se pretende diseñar de manera rigurosa la segunda de ellas. La corriente de colas de la primera torre sirve de alimentación para la segunda. Según bibliografía (4), la primera columna de este proceso contaría con alrededor de 20 etapas y en *Aspen HYSYS* se logró alcanzar la separación requerida empleando 22. Basándose en heurísticas para columnas de platos, la caída de presión se puede tomar de 0,007 bar/plato (3). Suponiendo que por la cabeza de la primera torre la presión es atmosférica, en la cola se obtendría una presión de aproximadamente 1,17 bar. Teniendo en cuenta que las torres precisan de una distancia mínima de seguridad entre ellas, la caída de presión por las tuberías hace que en la entrada de la columna T-202, la presión será de los 1,15 bar mencionados.

En cuanto a la temperatura, la columna operará entre la temperatura de la caldera y del condensador. Como se comentó, a priori se entiende que el ácido acético saldrá por cabezas y el anhídrido acético por colas, por ende la temperatura del condensador se fijará como la temperatura de ebullición del ácido, y la de la caldera como la de ebullición del anhídrido. En lo que respecta a la alimentación, como se introduce como líquido saturado a 1,15 bar, la temperatura será la de burbuja, que en este caso se corresponde con 135,8°C.

#### 2.4. Selección del tipo de dispositivo de contacto

El contacto entre fases mejora considerablemente la separación, por lo que se emplean una serie de platos o material de relleno que lo favorezca. En la industria son más habituales las columnas de destilación de platos, sin embargo se analizarán las ventajas y desventajas de ambas opciones para tomar una decisión. En la Tabla 3 se muestra la comparativa.

*Tabla 3. Ventajas y desventajas de las columnas de platos y de relleno. (1)*

	<b>Platos</b>	<b>Relleno</b>
<b>Ventajas</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Soportan mayores caudales de líquido y de gas</li> <li>• La eficiencia del plato puede ser calculada con mayor certeza que el relleno</li> <li>• Mejor distribución del líquido</li> <li>• Mayor facilidad de refrigeración</li> <li>• Mayor facilidad de contar con salidas laterales</li> <li>• Mayor facilidad para tomar medidas para la limpieza</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Preferible para fluidos corrosivos y sistemas con espumas</li> <li>• Preferible si se opera a vacío</li> <li>• Menor caída de presión que con platos</li> <li>• Preferible para diámetros de columna menores a 0,6 m</li> </ul>
<b>Desventajas</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Mayor coste si se emplean sustancias corrosivas</li> <li>• No recomendada si se trabaja a vacío, con espumas o el diámetro es menor a 0,6 m</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• No son adecuadas para caudales de líquido bajos</li> <li>• Dificultoso contar con salidas laterales y peor distribución de líquido</li> </ul>

Teniendo en cuenta que no se opera a vacío, que es un sistema sin espumas y que los caudales son elevados, se decide diseñar una columna de platos. Además según bibliografía las columnas que se emplean para separar mezclas ácido acético-anhídrido acético son de platos con diámetros mayores a 0,6 metros. (4) (5)

### 3. Determinación del número de etapas de equilibrio

#### 3.1. Consideraciones de reflujo

La relación de reflujo es un parámetro crucial en el diseño de columnas de destilación, pues afecta directamente al número de etapas de la columna. Se define como la relación entre el caudal que retorna a la columna como reflujo y el de cabezas previo a entrar al condensador. (1)

La relación de reflujo mínima ( $R_{min}$ ) se obtiene mediante un método aproximado de diseño. En el apartado 3.5. *Diseño aproximado de la columna: Método McCabe-Thiele* se presenta el método aplicado y con la *Ecuación 1* se obtiene la  $R_{min}$  a partir de la pendiente de la recta de operación de la zona de enriquecimiento calculada para reflujo total,  $(L/V)_{min}$ . En próximos apartados se detallarán estos aspectos.

$$R_{min} = \frac{(L/V)_{min}}{1 - (L/V)_{min}} \quad [1]$$

Posteriormente se calcula la relación de reflujo óptima, que se obtiene multiplicando la  $R_{min}$  por un factor que ronda entre 1,2 y 1,5. (1)

#### 3.2. Balance de materia

Las características de la alimentación de entrada y el grado de pureza requerido son los parámetros que van a condicionar el resultado del balance de materia. En el *Anexo I: Balances de materia y energía* ya se realizó un balance global al equipo. Ahora se detallará más ampliamente ese cálculo. En la Figura 2 se muestra un esquema con la estructura.

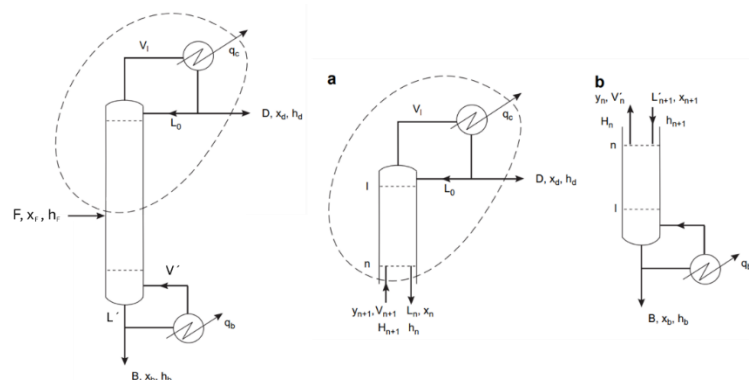


Figura 2. Esquema de la columna de destilación con las corrientes de interés. Adaptado de: (2)

El balance global y a uno de los componentes de la columna se definía como:

$$F = D + B \quad [2]$$

$$F \cdot x_{F,i} = D \cdot x_{D,i} + B \cdot x_{B,i} \quad [3]$$

Por su parte, los balances a la caldera y al condensador resultan:

$$V = L + D \quad [4]$$

$$V \cdot y_i = L \cdot x_i + D \cdot x_{D,i} \quad [5]$$

$$L' = V' + B \quad [6]$$

$$L' \cdot x_i = V' \cdot y_i + B \cdot x_{B,i} \quad [7]$$

$$L = D \cdot R \quad [8]$$

Además, como la entrada ingresa al equipo como líquido saturado, entonces:

$$L' = F + L \quad [9]$$

$$V = V' \quad [10]$$

El resultado de aplicar esta relación de ecuaciones se presenta tabulado a continuación.

Tabla 4. Datos y resultados de aplicar el balance de materia a la columna

Compuesto en (kg/h)	F	D	B	L	V	L'	V'
Ácido acético	3060,44	3023,23	37,22	14447,35	17470,59	140,20	102,99
Anhídrido acético	13508,82	919,66	12589,16	4394,86	5314,52	47427,17	34838,01
<b>TOTAL</b>	<b>16569,27</b>	<b>3942,89</b>	<b>12626,38</b>	<b>18842,22</b>	<b>22785,11</b>	<b>47567,37</b>	<b>34941,00</b>
Fracción másica	x <sub>F</sub>	x <sub>D</sub>	x <sub>B</sub>	x <sub>L</sub>	y <sub>V</sub>	x <sub>L'</sub>	y <sub>V'</sub>
Ácido acético	0,185	0,767	0,003	0,767	0,767	0,003	0,003
Anhídrido acético	0,815	0,233	0,997	0,233	0,233	0,997	0,997

### 3.3. Balance de energía

Para poder realizar el balance de energía global del equipo se deben conocer las entalpías de cada corriente y el calor aportado y retirado de la caldera y del condensador como se muestra en la *Ecuación 11*.

$$F \cdot h_F + Q_{caldera} = D \cdot h_D + B \cdot h_B + Q_{condensador} \quad [11]$$

Las entalpías (h) se calculan como se indicó en la *Ecuación 29* del *Anexo I*, y el calor retirado del condensador ( $Q_{condensador}$ ) puede ser calculado con la *Ecuación 12* que puede simplificarse en la 13. Los valores de  $C_p$  (calor específico) y  $\lambda_{vap}$  (calor de vaporización) se obtienen de la simulación en *Aspen HYSYS*.

$$Q_{condensador} = V \cdot H_V - L \cdot h_L - D \cdot h_D \quad [12]$$

$$Q_{condensador} = V \cdot (C_{pV} \cdot (T_V - T_D) + \lambda_{vap}) \quad [13]$$

Conocidos los caudales, las entalpías y el calor del condensador se puede despejar de la *Ecuación 11* el calor que se necesita aportar a la caldera. Los datos y resultados aparecen en la *Tabla 5*:

Tabla 5. Datos y resultados del balance de energía a la columna

$h_F$	$h_D$	$h_B$	$C_{pV}$	$T_V$	$T_D$	$\lambda_{vap, cald}$	$\lambda_{vap, cond}$	$Q_{cald}$	$Q_{cond}$
kJ/kmol	kJ/kmol	kJ/kmol	kJ/(kmol·°C)	°C	°C	kJ/kmol	kJ/kmol	kJ/h	kJ/h
74969,28	53955,38	85639,05	1,55	126,04	124,34	396,12	395,95	9,03E+06	9,09E+06

### 3.4. Equilibrio líquido-vapor

Los datos de equilibrio (EVL) son fundamentales para poder proceder con el diseño de este tipo de equipos. En la Figura 3 se muestran representados gráficamente los datos de equilibrio de la mezcla ácido acético-anhídrido acético obtenidos con diferentes paquetes termodinámicos en *Aspen HYSYS* a 1,15 bar, donde x e y hacen referencia a las fracciones molares en fase líquida y vapor de ácido acético respectivamente.

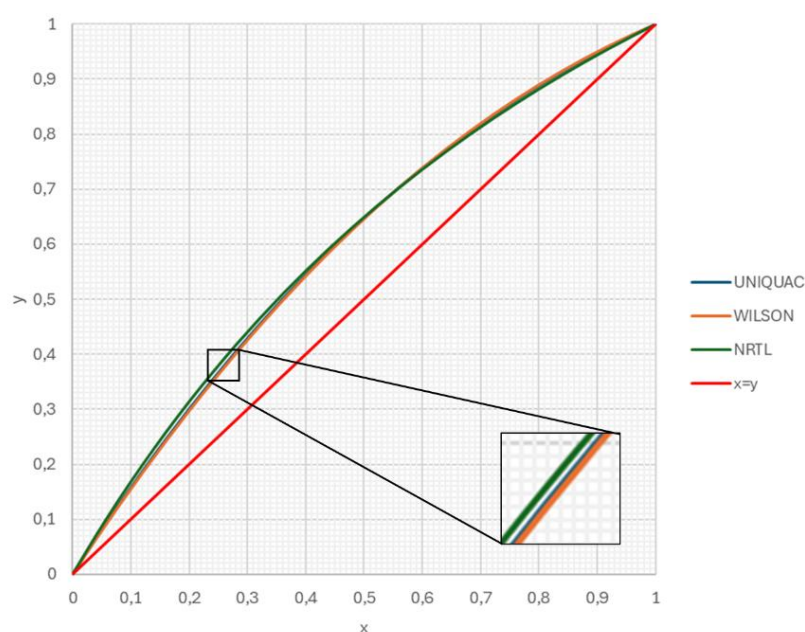


Figura 3. Representación de datos de equilibrio a 1,15 bar con diferentes paquetes termodinámicos. Adaptado de *Aspen HYSYS*

Como se aprecia, para los tres paquetes empleados los datos se ajustan de manera bastante parecida. Simplemente se puede apreciar una pequeña desviación del modelo NRTL en comparación con los otros.

Se utilizarán estos datos como estimación inicial para comprender como es el comportamiento de la mezcla ácido acético-anhídrido acético, sin embargo los datos de equilibrio serán calculados más adelante.

Por otra parte, con el fin de analizar el efecto de la presión sobre el equilibrio, se representan los datos de EVL a diferentes presiones (obtenidos con *Aspen HYSYS*) en la Figura siguiente:

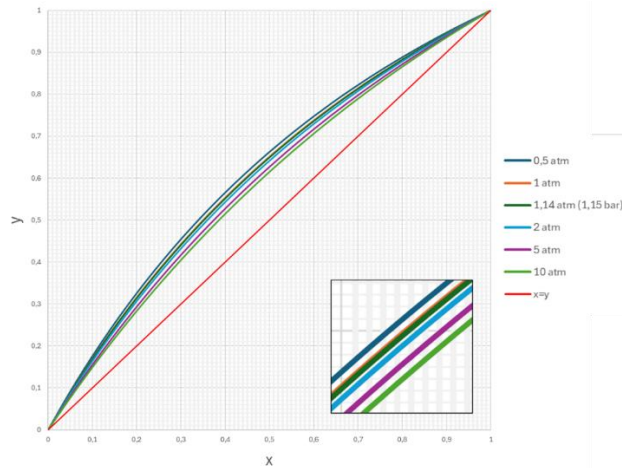


Figura 4. Representación de datos de equilibrio a diferentes presiones. Adaptado de Aspen HYSYS

Como se muestra, no hay presencia de azeótropos y variar la presión hace que se desplace ligeramente el equilibrio. A medida que se aumenta la presión, el equilibrio se acerca más a la línea de operación  $x=y$ . Esto se traduce en que a presiones bajas la separación va a ser mejor que a presiones elevadas, debido a que cuanto mayor sea la distancia entre la curva de equilibrio y la línea  $x=y$ , mejor será la separación de los compuestos de la mezcla. Por otro lado, la estimación hecha anteriormente acerca de la presión de operación se ve reforzada, ya que la diferencia en los datos de equilibrio entre operar a vacío y a 1,15 bar es muy pequeña. Aunque se pudiera apreciar algún pequeño beneficio si se trabajara con la torre a vacío, el coste de construcción y operación de una columna a presión menor a la atmosférica hacen que esta opción tenga que ser descartada.

Por otro lado, el criterio para el equilibrio termodinámico entre la fase vapor y líquida de una mezcla de componentes es: (6)

$$f_i^V = f_i^L \quad [14]$$

Donde  $f_i^V$  y  $f_i^L$  son la fugacidad de la fase vapor y líquida respectivamente. Las ecuaciones para su cálculo se muestran a continuación: (6)

$$f_i^V = P \cdot \phi_i \cdot y_i \quad [15]$$

$$f_i^L = P_i^0 \cdot \gamma_i \cdot x_i \quad [16]$$

Donde:

- $P$  es la presión del sistema en bar.
- $\Phi$  es el coeficiente de fugacidad de la fase gas.
- $y_i$  es la fracción molar del componente  $i$  de la mezcla en fase vapor.
- $P_i^0$  es la presión de vapor del compuesto  $i$  de la mezcla en bar.
- $\gamma_i$  es el coeficiente de actividad del componente  $i$ .
- $x_i$  es la fracción molar del componente  $i$  de la mezcla en fase líquida.

El coeficiente de fugacidad de la fase vapor puede aproximarse a la unidad a presiones bajas, por lo que se considera que 1,15 bar es aceptable para esta aproximación y se considera la fase gas como ideal. Por el contrario, las soluciones líquidas se abordan a través de propiedades que miden sus desviaciones, no desde el comportamiento ideal sino desde su comportamiento real, de ahí que se encuentre presente el término  $\gamma_i$  en la *Ecuación 3*. (6) (7)

Con esto, unificando las *Ecuaciones 14, 15 y 16* resulta la **Ley de Raoult modificada**:

$$P \cdot y_i = P_i^0 \cdot \gamma_i \cdot x_i \quad [17]$$

Las propiedades que miden la desviación de las mezclas líquidas son las llamadas de exceso. Por ejemplo, si M representa el valor molar de cualquier propiedad termodinámica extensiva como es el caso del volumen, una propiedad en exceso  $M^E$  se define como la diferencia entre el valor real de la propiedad de una disolución y el valor que tendría como solución ideal  $M^{id}$ , bajo las mismas condiciones de presión, temperatura y composición. De este modo: (7)

$$M^E = M - M^{id} \quad [18]$$

La energía libre de Gibbs residual y los coeficientes de actividad están directamente relacionados:

$$G_i^E = G_i - G_i^{id} = R \cdot T \cdot \ln \gamma_i \rightarrow \ln \gamma_i = \frac{G_i^E}{RT} \quad [19]$$

Donde:

- $G_i$  es la energía de Gibbs del compuesto i
- R es la constante de los gases ideales
- T es la temperatura
- $\gamma_i$  es el coeficiente de actividad del compuesto i

Son varios los modelos para la energía de Gibbs de exceso: Margules, van Laar, Wilson, NRTL y UNIQUAC. (7)

### **Cálculo de la presión de vapor**

Para poder utilizar la Ley de Raoult se precisa calcular la presión de vapor tanto del anhídrido acético como del ácido acético. Para su cálculo se hace uso de la Ecuación de Antoine: (8)

$$\log_{10} P_i^0 = A - \frac{B}{T^a + C} \quad [20]$$

Donde:

- $P_i^0$  es la presión de vapor del compuesto i de la mezcla en mmHg.
- A, B y C son las constantes de Antoine, diferentes para cada sustancia.
- $T^a$  es la temperatura en °C.

En la Tabla 6, se presentan los valores de las constantes para cada uno de los compuestos, junto con el rango de temperaturas para el que se dan dichos valores.

Tabla 6. Constantes de Antoine (8)

Compuesto	A	B	C	Tmin (°C)	Tmax (°C)
Ácido acético	7,30	1479,02	216,82	17	157
Anhídrido acético	7,12	1427,77	198,05	35	194

### Coefficientes de actividad

Al igual que la presión de vapor, para poder emplear la Ley de Raoult modificada es necesario conocer los coeficientes de actividad. Con los modelos para la energía de Gibbs de exceso, los coeficientes de actividad pueden ser determinados. Las ecuaciones para ello se presentan a continuación y los subíndices 1 y 2 hacen referencia al anhídrido acético y al ácido acético respectivamente. (7)

### Wilson

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + x_2 \Lambda_{12}) + x_2 \left( \frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}} \right) \quad [21]$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + x_1 \Lambda_{21}) - x_1 \left( \frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}} \right) \quad [22]$$

$$\Lambda_{ij} = \frac{V_j}{V_i} \exp\left(\frac{-\alpha_{ij}}{RT}\right) ; (i \neq j) \quad [23]$$

Donde:

- $x_1$  y  $x_2$  son las fracciones molares de líquido de ambas especies.
- $\Lambda_{12}$  y  $\Lambda_{21}$  son los parámetros para un sistema binario, en este caso ácido acético-anhídrido acético.
- $V_j$  y  $V_i$  son los volúmenes molares ( $\text{cm}^3/\text{mol}$ ) a la temperatura  $T$  (K) de los líquidos puros  $j$  e  $i$ .
- $\alpha_{ij}$  es un parámetro constante e independiente de la composición y la temperatura.

### NRTL (Non-Random-Two-Liquid)

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[ \tau_{21} \left( \frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \left( \frac{G_{12} \tau_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right) \right] \quad [24]$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[ \tau_{12} \left( \frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \left( \frac{G_{21} \tau_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right) \right] \quad [25]$$

$$G_{12} = \exp(-\alpha \tau_{12}) ; G_{21} = \exp(-\alpha \tau_{21}) \quad [26,27]$$

$$\tau_{12} = \frac{b_{12}}{RT} ; \tau_{21} = \frac{b_{21}}{RT} \quad [28,29]$$

Donde  $\alpha$ ,  $b_{12}$  y  $b_{21}$  son parámetros específicos de la mezcla ácido acético-anhídrido acético, y son independientes de la composición y temperatura.

La ecuación de UNIQUAC es un modelo de mayor complejidad (7) que los demás mencionados, y las ecuaciones de Margules y van Laar son parecidas a la de Wilson. Sin embargo, el uso del modelo de Wilson es más conveniente para el diseño de sistemas no ideales (1). Por ello, se procederá al cálculo de los datos de equilibrio empleando Wilson y NRTL con el fin de compararlos con los proporcionados por *Aspen HYSYS*. Si el resultado es satisfactorio, no se considerarán los modelos de UNIQUAC, Margules y van Laar. Los parámetros necesarios para el cálculo se recogen en la Tabla 7.

Tabla 7. Datos para las ecuaciones de Wilson y NRTL. (9)(*Aspen HYSYS*)

	$\alpha_{12}$ (J/mol)	$\alpha_{21}$ (J/mol)	$V_1$ (cm <sup>3</sup> /mol)	$V_2$ (cm <sup>3</sup> /mol)
<b>Wilson</b>	2414,39	-723,43	95,12	56,64
		$\alpha$	$b_{12}$ (J/mol)	$b_{21}$ (J/mol)
<b>NRTL</b>		0,3	-1196,36	2859,17

Para ambos modelos, la estimación de los datos consiste en un proceso iterativo de prueba y error. Para poder comenzar se precisa conocer el rango de temperaturas en el que trabajará la columna. Se estimará la temperatura de cabezas y de colas. Como se mencionó en el apartado 2.3. *Condiciones de operación*, se entiende que la mayor parte del ácido acético abandona el equipo por la cabeza debido a ser más volátil que el anhídrido acético. Por lo que la temperatura de cabezas la marcará la de ebullición del ácido y la de colas la del anhídrido. Para su cálculo se despeja de la Ecuación de Antoine, *Ecuación 20*, la temperatura. Los valores de las constantes figuran en la Tabla 6. Para la temperatura de cabeza se emplean los datos del ácido y para la de colas los del anhídrido. Como se supone presión constante  $P=1,15$  bar, se obtiene una temperatura de ebullición de ácido de 122,20 °C y de anhídrido de 143,15 °C. Este será el rango de temperaturas ( $T^a$ ) en el que opere la columna de destilación.

El proceso iterativo para los modelos de Wilson y NRTL consiste en lo reflejado en el algoritmo de la Figura 5. Destacar que las fracciones tanto de líquido como vapor son molares.

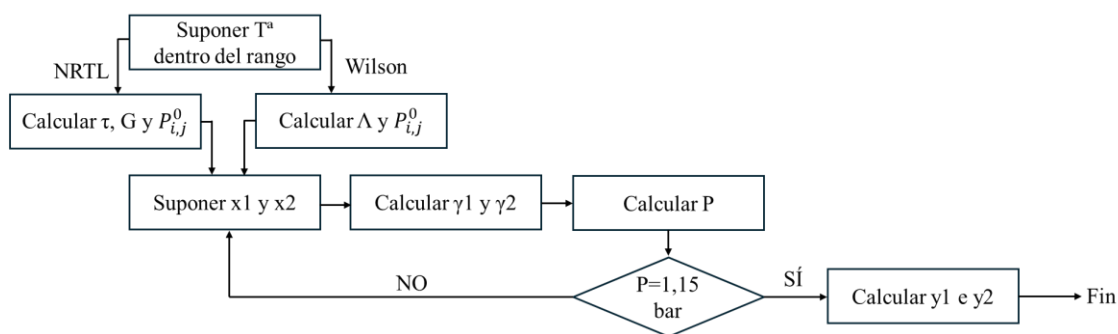


Figura 5. Algoritmo para cálculo de EVL para el método NRTL y de Wilson (Elaboración propia)

Para este proceso se tuvo en cuenta que las temperaturas supuestas estuvieran dentro del rango estipulado. Además de que se cumplieran las *Ecuaciones 30 y 31*.

$$\sum x_i = x_1 + x_2 = 1 \quad ; \quad \sum y_i = y_1 + y_2 = 1 \quad [30, 31]$$

El cálculo de la presión se realiza adaptando la Ley de Raoult modificada, *Ecuación 17*, resultando en la *Ecuación 32*.

$$P = P_1^0 \cdot \gamma_1 \cdot x_1 + P_2^0 \cdot \gamma_2 \cdot x_2 \quad [32]$$

Finalmente el cálculo de las fracciones molares de vapor se lleva a cabo despejando de la *Ecuación 17*, que resultaría:

$$y_i = \frac{P_i^0 \cdot \gamma_i \cdot x_i}{P} \quad [33]$$

Como el proceso iterativo es largo y laborioso, se decide emplear la herramienta *Solver* de *Excel* para el cálculo. Gracias a ella, el procedimiento se resume en suponer una temperatura dentro del rango de operación, e indicarle al programa que devuelva para que valor de  $x_1$  la presión  $P$  calculada mediante la *Ecuación 32* es 1,15 bar. De esta forma se pueden conocer los valores de todos los parámetros del proceso iterativo de la Figura 5.

En la Tabla 8 se muestran los resultados para  $x_2 = x_{\text{ácido acético}} = 0,60$  con las ecuaciones del modelo NRTL.

Tabla 8. Resultados de aplicar el algoritmo para la iteración  $T=126,20$  °C con las ecuaciones de NRTL

<b>T<sup>a</sup></b> °C	<b>P<sup>0</sup><sub>1</sub></b> bar	<b>P<sup>0</sup><sub>2</sub></b> bar	$\tau_{12}$	$\tau_{21}$	<b>G<sub>12</sub></b>	<b>G<sub>21</sub></b>	$\gamma_1$	$\gamma_2$	<b>X<sub>ácido acético</sub></b>	<b>Y<sub>ácido acético</sub></b>	<b>P</b> bar
126,20	0,70	1,30	-0,36	0,86	1,11	0,77	1,12	1,08	0,60	0,73	1,15

En la Tabla 9 se presentan los cálculos con las ecuaciones del método de Wilson para la misma temperatura que la Tabla 8.

Tabla 9. Resultados de aplicar el algoritmo para la iteración  $T=126,20$  °C con las ecuaciones de Wilson

<b>T<sup>a</sup></b> °C	<b>P<sup>0</sup><sub>1</sub></b> bar	<b>P<sup>0</sup><sub>2</sub></b> bar	$\Lambda_{12}$	$\Lambda_{21}$	$\gamma_1$	$\gamma_2$	<b>X<sub>ácido acético</sub></b>	<b>Y<sub>ácido acético</sub></b>	<b>P</b> bar
126,20	0,70	1,30	0,29	2,09	0,99	1,02	0,74	0,84	1,15

Una vez conocidos los datos de equilibrio desde  $x=0$  a  $x=1$  para ambos modelos, en las Figuras 6 y 7 se compararán con los obtenidos mediante *Aspen HYSYS*. Además, también se compararán con datos de equilibrio bibliográficos. Desafortunadamente, los datos encontrados en bibliografía (10) están dados a presión atmosférica, sin embargo en la Figura 4 se puede apreciar que la diferencia entre los datos de equilibrio a presión atmosférica y 1,15 bar es pequeña.

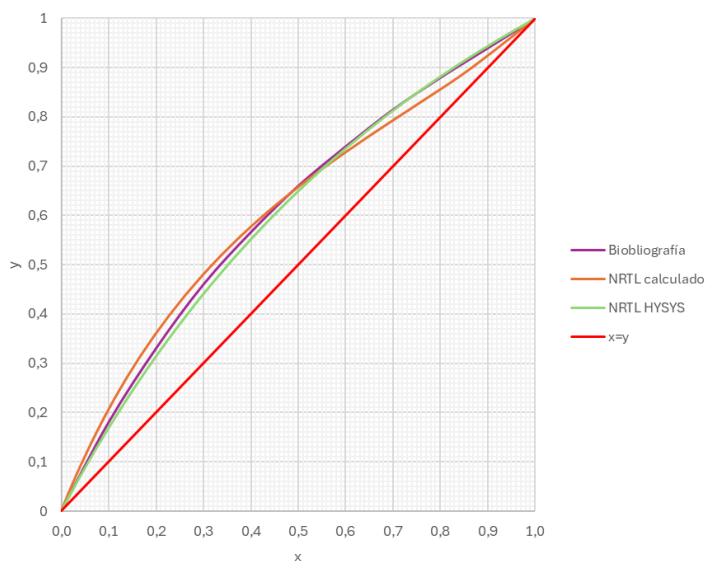


Figura 6. Datos EVL para el método NRTL (Aspen HYSYS, Adaptado de (10) y Elaboración propia)

En la Figura 6 se recogen los datos del modelo NRTL y puede observarse que existe una ligera desviación entre los tres pares de datos representados, pero la tendencia general es prácticamente la misma para los tres casos. Para valores inferiores a  $x=0,5$  los datos estimados son ligeramente mayores a los bibliográficos y a los obtenidos con *Aspen HYSYS*. Por el contrario, para valores superiores a  $x=0,5$  son algo menores. Es interesante mencionar que pese a la diferencia de presión, los datos de *HYSYS* y bibliográficos son muy parecidos, especialmente los que van de  $x=0,5$  a  $x=1,0$ .

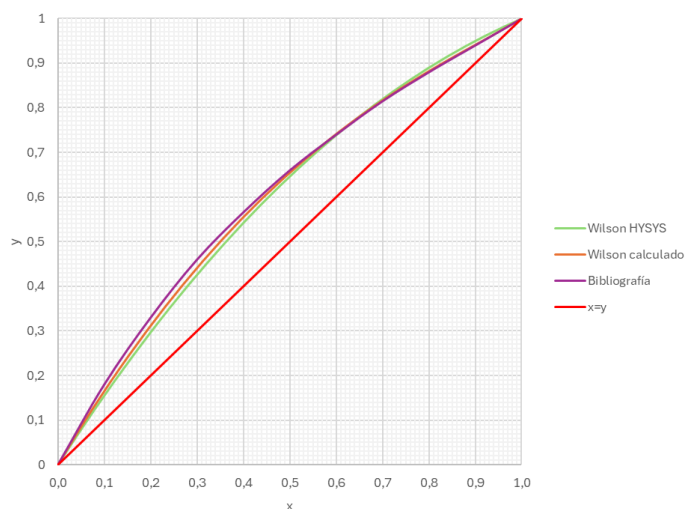


Figura 7. Datos EVL para el método de Wilson (Aspen HYSYS, Adaptado de (10) y Elaboración propia)

En la Figura 7, se representan los datos del modelo de Wilson. Se puede ver como ocurre algo similar a lo que pasaba con NRTL, los tres pares de datos difieren ligeramente pero la tendencia es la misma. En este caso el desvío que genera la Ecuación de Wilson es menor que

el que genera la de NRTL. Debido a ello, se decide que se continuará el diseño de la columna de destilación con los datos obtenidos con el modelo de Wilson.

Una vez recopilados los datos de equilibrio mediante la Ecuación de Wilson, se pueden representar gráficamente las fracciones molares de líquido y vapor frente a la temperatura. Este es el llamado diagrama T-x-y, que se presenta en la Figura 8. En ella se pueden evaluar las diferencias entre los valores de *Aspen HYSYS* y los calculados, y la conclusión que se sacan es que ambas representaciones son muy parecidas. Con este gráfico se puede conocer la temperatura de burbuja y de rocío a una composición concreta.

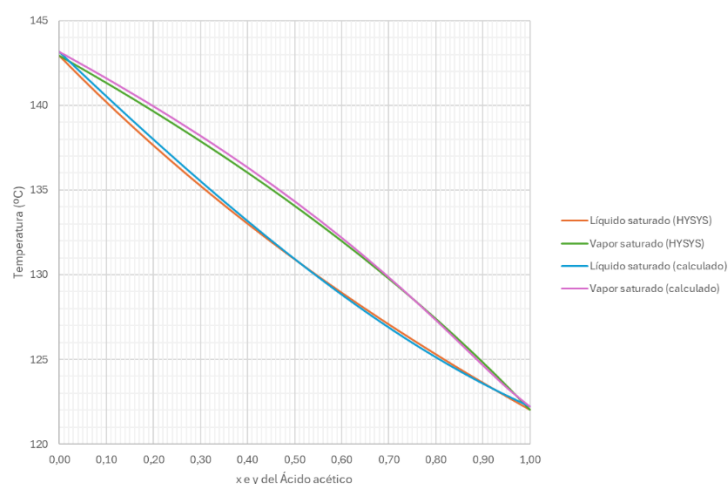


Figura 8. Diagrama T-x-y de la mezcla ácido acético-anhídrido acético (*Aspen HYSYS* y *Elaboración propia*)

### 3.5. Diseño aproximado de la columna: Método McCabe-Thiele

Son varios los métodos con los que se pueden diseñar columnas de manera aproximada. En el año 1925 McCabe y Thiele desarrollaron un método gráfico para el diseño de columnas que consiste en los siguientes puntos: (1)

- 1) Representar la curva de equilibrio usando los datos disponibles a la presión de operación.
- 2) Realizar el balance de materia global del equipo para determinar la composición de colas ( $x_b$ ) y de cabezas ( $x_d$ ).
- 3) Intersecar las líneas de operación de la parte superior e inferior con la línea de operación diagonal  $x=y$  en los puntos  $x_b$  y  $x_d$ .
- 4) El punto de intersección de las dos rectas es dependiente de las condiciones de la corriente de alimentación. La línea en la que la intersección ocurre se llama línea q. En la Figura 9 se muestran los tipos de línea q.
- 5) Seleccionar una relación de reflujo.
- 6) Empezar a dibujar etapas como se muestra en la Figura 9, empezando desde  $x_b$  o  $x_d$ .

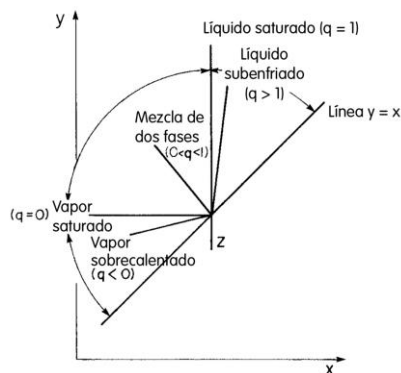


Figura 9. Tipos de línea q (11)

En la Figura 10 se emplea el método McCabe-Thiele para conocer el número de etapas teóricas bajo la condición de reflujo total. En esta situación, todo el producto condensado ingresa de nuevo a la columna, es decir, que este es el caso para el que se obtiene el número de etapas mínimas necesarias para alcanzar la separación requerida. Debido a que todo el caudal condensado es devuelto a la torre, la relación  $L/V$  y  $L'/V'$  es igual a la unidad, lo que se traduce en que las líneas de operación coinciden con la diagonal  $x=y$ .

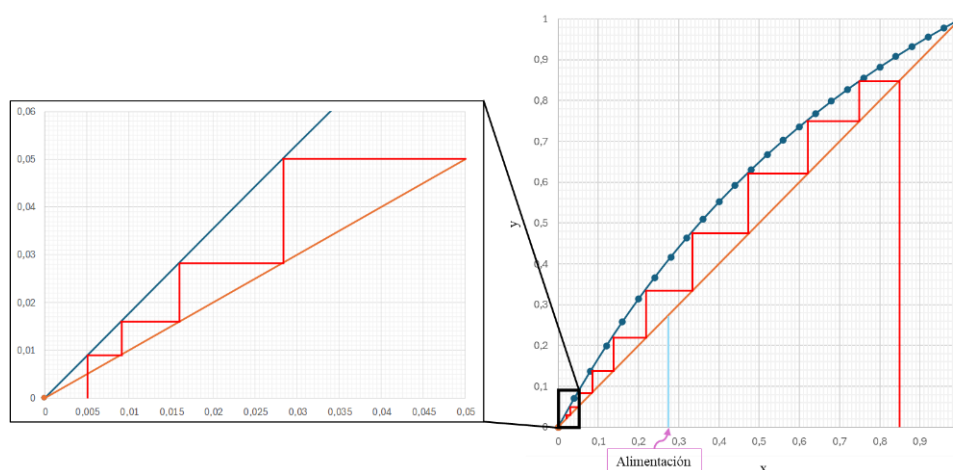


Figura 10. Método McCabe-Thiele para reflujo total (elaboración propia)

El procedimiento para la creación de la Figura 10 es el explicado al inicio del presente apartado. El modo de dibujar las etapas consiste en hacer líneas verticales y horizontales que empiecen en la composición de colas o de cabezas. Estas deben ir desde la curva de equilibrio hasta las líneas de operación sucesivamente, hasta igualar o superar el valor de composición contrario al del comienzo. Por ejemplo, si se empiezan a dibujar etapas desde la cabeza  $x_B$ , se finaliza cuando se iguale o supere el valor de  $x_D$ . Para el caso de estudio, se obtuvieron un total de 12 etapas teóricas.

Por el contrario, la Figura 11 muestra las líneas de operación para la relación de reflujo mínimo, la cual solo será lograda con un número infinito de etapas.

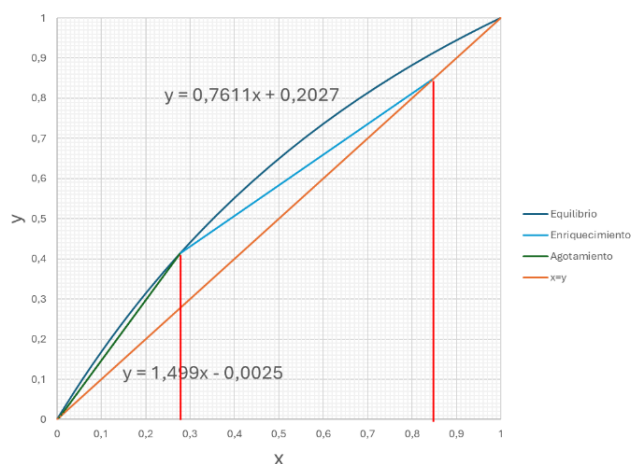


Figura 11. Método McCabe-Thiele para reflujo mínimo (elaboración propia)

Mediante la Ecuación 1 y la pendiente de la línea de operación de enriquecimiento, es decir  $(L/V)_{\min}$ , se puede conocer la relación de reflujo mínima.

Como se adelantó en un apartado anterior, la relación de reflujo óptima, es decir, la real que se utilizará en el diseño del equipo, se obtiene mediante el producto de la  $R_{\min}$  y un factor que según bibliografía (1) suele variar entre 1,2 y 1,5. En este caso se decidió finalmente emplear 1,5. En la Tabla 10, se recoge los valores y resultados.

Tabla 10. Datos y resultados de reflujo

Parámetro	$(L/V)_{\min}$	$R_{\min}$	R
Valor	0,761	3,186	4,779

Conocido el valor de la relación de reflujo óptima, es posible representar las líneas de operación reales. La Figura 12 muestra la representación gráfica.

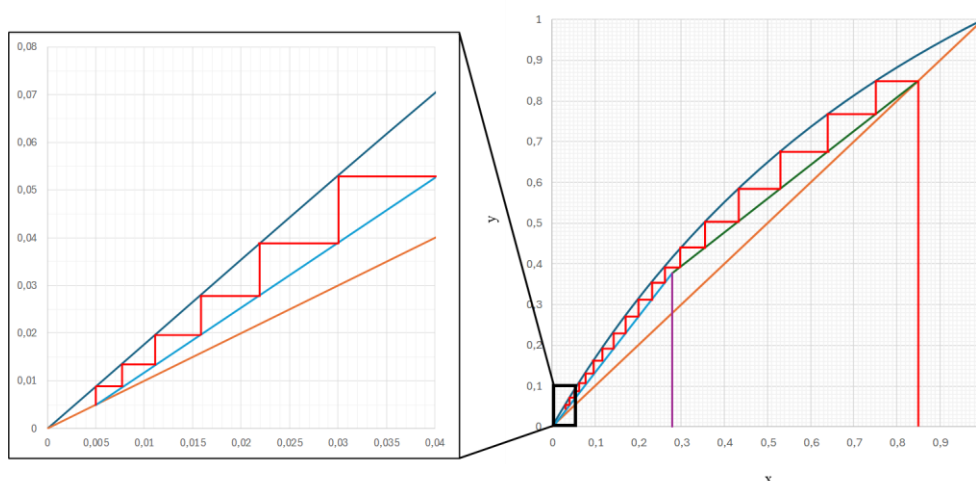


Figura 12. Método McCabe-Thiele para reflujo óptimo (elaboración propia)

Con esto, se concluye que el número de etapas de equilibrio teóricas es de 23, siendo una de ellas la caldera. A esto se añade que la alimentación debe ser introducida por la etapa 7.

A modo de conclusión del diseño aproximado, mencionar que los resultados obtenidos sirven como orientación hacia el diseño riguroso del equipo, el cual será el definitivo. Asimismo, la relación de reflujo óptima será la empleada para el diseño mediante ecuaciones MESH.

### 3.6. Diseño riguroso de la columna: Metodología MESH

La metodología MESH permite calcular la temperatura, flujos y composiciones para cada etapa de la columna, y consiste en aplicar para cada etapa  $n$  de la columna de destilación las ecuaciones que se muestran a continuación junto con la Figura 13 que indica las corrientes de entrada y salida de cada etapa. (2)

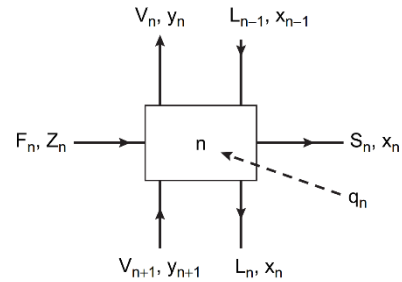


Figura 13. Corrientes de entrada y salida de una etapa  $n$  (2)

#### M: Balance de materia

$$F_n \cdot Z_n + V_{n+1} \cdot y_{n+1} + L_{n-1} \cdot x_{n-1} = S_n \cdot x_n + V_n \cdot y_n + L_n \cdot x_n \quad [34]$$

#### E: Equilibrio líquido-vapor

$$P \cdot y_i = P_i^0 \cdot \gamma_i \cdot x_i \quad [17]$$

#### S: Sumatorio de fracciones molares

$$\sum x_i = x_1 + x_2 = 1 = y_1 + y_2 = \sum y_i \quad [30] \text{ y } [31]$$

#### H: Balance de energía (Heat balance)

$$F_n \cdot h_f + V_{n+1} \cdot H_{n+1} + L_{n-1} \cdot h_{n-1} + q_n = S_n \cdot h_n + V_n \cdot H_n + L_n \cdot h_n \quad [35]$$

Donde:

- $V_{n+1}$  y  $V_n$  son los caudales de vapor de entrada y salida respectivamente en kmol/h.
- $L_{n-1}$  y  $L_n$  son los caudales de líquido de entrada y salida respectivamente en kmol/h.
- $F_n$  es la corriente de entrada a la etapa  $n$  en kmol/h.
- $S_n$  es la corriente de salida lateral de la etapa  $n$  en kmol/h.
- $x$  e  $y$  son las composiciones molares de líquido y vapor de un determinado compuesto.
- $Z$  es la composición molar de un determinado compuesto en la alimentación.
- $H$  y  $h$  son las entalpías de vapor y de líquido respectivamente, en kJ/kmol.
- $h_f$  es la entalpía de la corriente de entrada en kJ/kmol.
- $q_n$  es cualquier flujo de calor que se aporte o se retire de la etapa  $n$  en kJ/h.

Como se mencionó, con esta metodología se busca resolver las cuatro ecuaciones desde la cabeza del equipo hasta la alimentación, y desde la cola hasta la alimentación. Sin embargo, como se consideró un sistema pseudo-binario se resolverá de cabezas a colas directamente.

### 3.6.1. Cálculo de las entalpías específicas

La entalpía es una propiedad termodinámica que se puede definir en función de la capacidad calorífica y la temperatura mediante la *Ecuación 36*. Cabe destacar que uno de los términos de la ecuación es una entalpía de referencia, que en este caso se tomará con valor 0, pues depende de la temperatura de referencia,  $T_r$ , que se seleccione, en este caso será 0 °C. (2)

$$h \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right) = h_r \cdot \int_{T_r}^T C_p \cdot dT \quad [36]$$

Por su parte, el calor específico se define como la cantidad de energía necesaria para variar una unidad molar en una unidad de temperatura. Se calcula tanto para el anhídrido acético como para el ácido acético con la *Ecuación 37*, que depende de la temperatura y de una serie de constantes obtenidas bibliográficamente (12) que se muestran en la Tabla 11.

$$C_p = C_1 + C_2 \cdot T + C_3 \cdot T^2 + C_4 \cdot T^3 + C_5 \cdot T^4 \quad [37]$$

Tabla 11. Constantes para el cálculo del calor específico (12)

J/(kmol·K)	C1	C2	C3	C4	C5
Ácido acético	139640	-320,8	0,8985	0	0
Anhídrido acético	260050	-565,43	1,1035	0	0

Como se mencionó, se tomaba  $T_r$  con un valor de 0 °C, por lo que resolviendo la integral la *Ecuación 36* y unificándola con la *Ecuación 37* queda de la siguiente expresión para calcular la entalpía de cualquier compuesto.

$$h_i \left( \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right) = C_1 \cdot T + C_2 \cdot \frac{T^2}{2} + C_3 \cdot \frac{T^3}{3} + C_4 \cdot \frac{T^4}{4} + C_5 \cdot \frac{T^5}{5} \quad [38]$$

Es importante resaltar que  $h_i$  hace referencia a las entalpías líquidas. Para las entalpías de vapor  $H_i$ , se aplica la *Ecuación 39*.

$$H_i = h_i + \lambda_i \quad [39]$$

Donde  $\lambda_i$  es el calor de vaporización en kJ/kmol y cuyos valores han sido obtenidos mediante la simulación en *Aspen HYSYS*. Estos se recogen en la Tabla 12.

Tabla 12. Calores de vaporización (*Aspen HYSYS*)

kJ/kmol	Ácido acético	Anhídrido acético
$\lambda_i$	23231,91	40407,18

Por último, para el cálculo de entalpías en corrientes con mezclas se aplican las *Ecuaciones 40 y 41* dependiendo se si se tratan de corrientes líquidas o de vapor.

$$h = \sum_i h_i \cdot x_i \quad H = \sum_i H_i \cdot y_i \quad [40, 41]$$

### 3.6.2. Cálculo de etapas

El primer paso será calcular la temperatura en el condensador, en la caldera y en la alimentación. Para ello se emplea el algoritmo de la Figura 5 con una pequeña modificación, en este caso no hace falta suponer ninguna fracción molar puesto que con las fracciones másicas indicadas en la Tabla 4 y las masas molares del anhídrido (102,09 kg/kmol) y ácido acético (60,05 kg/kmol), se pueden hallar las fracciones molares. Por ende se iterará con diferentes temperaturas hasta encontrar una que satisfaga la condición de  $P=1,15$  bar. La Tabla 13 muestra los resultados con las temperaturas finales.

Tabla 13. Cálculo de las temperaturas de burbuja del condensador, alimentación y caldera

<b>Condensador <math>\rightarrow T_{\text{burbuja}}(^{\circ}\text{C}) = 124,34</math></b>					
	$x_{D,i}$	$\Delta_{ij}$	$P^{\circ}_i$ (bar)	$\gamma_i$	$y_{D,i}$
Ácido acético	0,848	2,090	1,228	1,009	0,911
Anh. acético	0,152	0,287	0,657	1,024	0,089
<b>SUMA</b>	<b>1</b>				<b>1</b>
<b>Alimentación <math>\rightarrow T_{\text{burbuja}}(^{\circ}\text{C}) = 136,05</math></b>					
	$x_{F,i}$	$\Delta_{ij}$	$P^{\circ}_i$ (bar)	$\gamma_i$	$y_{F,i}$
Ácido acético	0,278	2,077	1,710	1,005	0,414
Anh. acético	0,722	0,293	0,940	0,995	0,586
<b>SUMA</b>	<b>1</b>				<b>1</b>
<b>Caldera <math>\rightarrow T_{\text{burbuja}}(^{\circ}\text{C}) = 143,02</math></b>					
	$x_{B,i}$	$\Delta_{ij}$	$P^{\circ}_i$ (bar)	$\gamma_i$	$y_{B,i}$
Ácido acético	0,005	2,070	2,062	0,977	0,009
Anh. acético	0,995	1,296	1,149	1,000	0,991
<b>SUMA</b>	<b>1</b>				<b>1</b>

Conocidos estos datos se puede dar comienzo al cálculo etapa a etapa. No obstante, comentar que como el condensador es total no se considerará como una etapa, pues se cumple que  $y_1 = x_0 = x_D$ . Por ende, la etapa 1 se corresponde con lo establecido por la Figura 14.

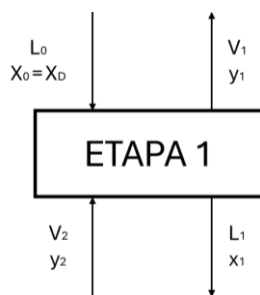


Figura 14. Etapa 1 de equilibrio

Por la parte superior de esta etapa entra la corriente  $L_0$  de reflujo y el vapor  $V_2$  que asciende desde la etapa 2. A su vez, como salidas del plato  $L_1$  y  $V_1$ , esta última sirviendo de alimentación para el condensador. Las fracciones molares y caudales de las corrientes  $L_0$  y  $V_1$  son conocidas debido al balance de materia al condensador, y como  $L_1$  y  $V_1$  están en equilibrio por pertenecer a la misma etapa se calcula la composición de  $L_1$  y la temperatura de la etapa. Para ello se va iterando con diferentes valores de temperatura hasta satisfacer la Ecuación 30. Los resultados se recogen en la Tabla 14.

Tabla 14. Cálculo de la temperatura de la Etapa 1

ETAPA 1		Temperatura (°C) = 126,04			
	$y_{1,i}$	$P^{\circ}_i$ (bar)	$\gamma_i$	$K = \gamma_i(P^{\circ}/P)$	$x_{1,i} = y_{1,i}/K$
Ácido acético	0,848	1,290	1,016	1,136	0,746
Anh. acético	0,152	0,693	0,996	0,599	0,254
<b>SUMA</b>	<b>1</b>				<b>1</b>

Como se expuso anteriormente, las MESH deben cumplir tanto el balance de materia global, como el de los componentes y el de energía en cada etapa n, Ecuaciones 34, 35 y 42.

$$F_n + V_{n+1} + L_{n-1} = S_n + V_n + L_n \quad [42]$$

Con estas tres ecuaciones se plantea un sistema para calcular el valor de los flujos molares de las corriente  $L_1$  y  $V_2$ , además de la composición de esta última. Pero para ello, antes deben determinarse las entalpías de cada corriente que se emplean en el balance de energía, aplicando lo explicado en el apartado 3.6.1. *Cálculo de las entalpías específicas*. Los resultados se presentan en la Tabla 15. Mencionar que para la corriente  $V_{n+1}$  se debe asumir un primer valor de entalpía para poder realizar el balance de energía a la etapa n. Cuando se apliquen las MESH a la etapa n+1 se corrige dicho valor. En este caso, la tabla ya refleja el valor definitivo.

Tabla 15. Entalpías específicas para la Etapa 1 en kJ/kmol

n = 1	T <sub>condensador</sub> (°C) = 124,34			Temperatura (°C) = 126,04		
	$x_{n-1}$	$h_{n-1}$	$(x \cdot h)_{n-1}$	$x_n$	$h_n$	$(x \cdot h)_n$
Ácido acético	0,848	48972,58	41539,14	0,746	49234,13	36749,36
Anh. acético	0,152	81800,51	12416,24	0,254	82156,06	20833,10
<b>SUMA</b>		<b><math>h_0 =</math></b>	<b>53955,38</b>	<b>SUMA</b>	<b><math>h_1 =</math></b>	<b>57582,46</b>
	Temperatura (°C) = 126,04			Temperatura (°C) = 128,22		
	$y_n$	$H_n$	$(y \cdot H)_n$	$y_{n+1}$	$H_{n+1}$	$(y \cdot H)_{n+1}$
Ácido acético	0,848	72466,04	61466,59	0,765	72804,60	55702,35
Anh. acético	0,152	122563,24	18603,49	0,235	123022,52	28898,76
<b>SUMA</b>		<b><math>H_1 =</math></b>	<b>80070,08</b>	<b>SUMA</b>	<b><math>H_2 =</math></b>	<b>84601,10</b>

Ahora ya es posible resolver el sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas, cuyos resultados se reflejan en la Tabla 16.

Tabla 16. Resultados de aplicar el sistema de ecuaciones de balance

Parámetro	$L_1$ (kmol/h)	$V_2$ (kmol/h)	$y_2$ , ácido acético	$y_2$ , anhídrido acético
<b>Valor</b>	<b>264,19</b>	<b>323,54</b>	<b>0,765</b>	<b>1 - 0,765 = 0,235</b>

Una vez aplicadas todas las MESH y comprobado que los balances a la etapa cierran, se darían por finalizados los cálculos de esta etapa y se pasaría a la siguiente. En la Tabla 17 se resumen los resultados de aplicar la metodología MESH a la primera etapa.

Tabla 17. Resumen de aplicar las MESH en la ETAPA 1

ETAPA 1	$L_0$	$L_1$	$V_2$	$V_1$
<b>Flujo (kmol/h)</b>	<b>283,63</b>	<b>264,19</b>	<b>323,54</b>	<b>342,99</b>
<b>Temperatura (°C)</b>	<b>124,34</b>	<b>126,04</b>	<b>126,04</b>	<b>128,22</b>
<b>x   y ácido acético</b>	<b>0,848</b>	<b>0,746</b>	<b>0,765</b>	<b>0,848</b>
<b>x   y anh. acético</b>	<b>0,152</b>	<b>0,254</b>	<b>0,235</b>	<b>0,152</b>
<b>h   H (kJ/kmol)</b>	<b>53955,38</b>	<b>57582,46</b>	<b>84601,10</b>	<b>80070,08</b>

Este proceso de cálculo etapa a etapa se replica de manera idéntica para el resto de etapas hasta llegar a la etapa por la que se introduce la alimentación de la columna. Esta etapa se alcanza cuando la relación entre las fracciones molares líquidas del componente clave ligero (ácido acético) y clave pesado (anhídrido acético), en dicha etapa, es menor a la correspondiente relación de las fracciones molares en la corriente de alimentación. Se adelanta que dicha condición se cumple por primera vez en la etapa 9, Figura 15. (1)

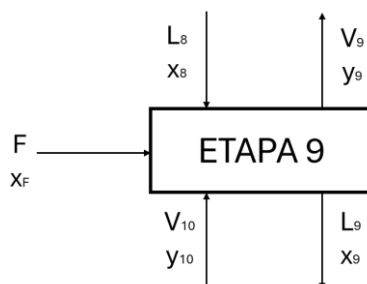


Figura 15. Etapa 9 de equilibrio

Esta etapa cuenta con tres corrientes de entrada, la alimentación F, la corriente líquida L<sub>8</sub> y la de vapor V<sub>10</sub>, y dos salidas V<sub>9</sub> y L<sub>9</sub>. En este caso se conocen tanto caudales como fracciones molares de la corriente de alimentación, como de la L<sub>8</sub> y V<sub>9</sub>, debido a la etapa 8 (al final del apartado se recogen los resultados de aplicar las MESH a cada etapa).

Como las corrientes V<sub>9</sub> y L<sub>9</sub> están en equilibrio por pertenecer a la misma etapa, es posible calcular la composición de L<sub>9</sub> debido a que ya se conocen las de V<sub>9</sub>. Además, dicho cálculo permite estimar la temperatura de la etapa. En la Tabla 18 se presentan los resultados.

Tabla 18. Cálculo de la temperatura de la Etapa 9

ETAPA 9		Temperatura (°C) = 136,13			
	y <sub>9,i</sub>	P <sup>o</sup> <sub>i</sub> (bar)	γ <sub>i</sub>	K = γ <sub>i</sub> (P <sup>o</sup> /P)	x <sub>9,i</sub> = y <sub>9,i</sub> / K
Ácido acético	0,410	1,714	1,005	1,493	0,275
Anh. acético	0,590	0,942	0,996	0,813	0,725
<b>SUMA</b>	<b>1</b>				<b>1</b>

Ahora que ya se conocen las fracciones molares de la corriente líquida de la etapa 9 se demuestra que la condición por la que se introduce la alimentación en dicha etapa se cumple.

$$\frac{x_{\text{ácido acético}}}{x_{\text{anhídrido acético}}} = \frac{\frac{0,284}{0,716} = 0,396}{\frac{0,278}{0,722} = 0,385} > \frac{0,275}{0,725} = 0,379$$

La demostración también muestra la relación para la corriente líquida de la etapa 8, que como se aprecia no cumple la condición.

Por otro lado, se plantea de nuevo el sistema con las Ecuaciones 34, 35 y 42. Con él se podrá estimar el caudal de las corrientes V<sub>10</sub> y L<sub>9</sub>, junto con la composición de V<sub>10</sub>. Pero previo a ello, se calculan las entalpías de cada corriente como ya fue explicado para la etapa 1. Los resultados de las entalpías se tabulan en la Tabla 19.

Tabla 19. Entalpías específicas para la Etapa 9 en kJ/kmol

n = 9	Temperatura (°C) = 135,92			Temperatura (°C) = 136,13		
	$x_{n-1}$	$h_{n-1}$	$(x \cdot h)_{n-1}$	$x_n$	$h_n$	$(x \cdot h)_n$
Ácido acético	0,284	50783,17	14406,03	0,275	50816,35	13957,93
Anh. acético	0,716	84248,94	60349,44	0,725	84293,53	61140,29
SUMA		$h_8 =$	74755,47	SUMA	$h_9 =$	75098,22
	Temperatura (°C) = 136,13			Temperatura (°C) = 136,30		
	$y_n$	$H_n$	$(y \cdot H)_n$	$y_{n+1}$	$H_{n+1}$	$(y \cdot H)_{n+1}$
Ácido acético	0,410	74048,26	30376,53	0,401	74075,40	29736,90
Anh. acético	0,590	124700,71	73545,23	0,599	124737,18	74662,57
SUMA		$H_9 =$	103921,75	SUMA	$H_{10} =$	104399,47

Como la etapa 9 es la que recibe el caudal de la corriente de alimentación no es suficiente con los datos recogidos en la Tabla 19, es necesario conocer la entalpía de la corriente F. El procedimiento de cálculo es el mismo y el resultado se tabula a continuación.

Tabla 20. Valor de la entalpía específica de la corriente de alimentación en kJ/kmol

$x_F$	$h_F$	$(x \cdot h)_F$
0,278	50803,35	14125,38
0,722	84276,06	60843,90
	SUMA	74969,28

Con todo esto ya es posible resolver el sistema de ecuaciones. Los valores de las incógnitas constan en la Tabla 21.

Tabla 21. Resultados de aplicar el sistema de ecuaciones de balance

Parámetro	$L_9$ (kmol/h)	$V_{10}$ (kmol/h)	$y_{10}$ , ácido acético	$y_{10}$ , anhídrido acético
Valor	387,61	263,67	0,401	1 - 0,401 = 0,599

Llegado este punto finalizarían los cálculos para la etapa 9 y se comienza con la primera etapa de la zona de agotamiento de la columna de destilación, es decir, etapa 10. Antes se presenta la Tabla 22 con el resumen de datos de la etapa 10.

Tabla 22. Resumen de aplicar las MESH en la ETAPA 10

ETAPA 9	$L_8$	$L_9$	$V_{10}$	$V_9$	F
Flujo (kmol/h)	205,42	387,61	263,67	264,77	183,30
Temperatura (°C)	135,92	136,13	136,13	136,30	136,05
x   y ácido acético	0,284	0,275	0,401	0,410	0,278
x   y anh. acético	0,716	0,725	0,599	0,590	0,722
h   H (kJ/kmol)	74755,47	75098,22	104399,47	103921,75	74969,28

El procedimiento restante hasta la última etapa es idéntico al descrito hasta ahora, por ello los resultados de aplicar las MESH a las etapas intermedias se recogen en la Tabla 30 al final del apartado como ya se comentó.

El último plato de la columna de destilación corresponde con el número 42, Figura 16.

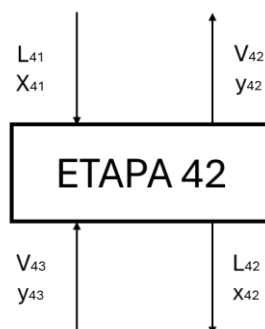


Figura 16. Etapa 42 de equilibrio

Esta etapa cuenta con dos caudales de entrada  $L_{41}$  y  $V_{43}$ , siendo esta última la corriente de vapor de la caldera que regresa a la columna por la parte inferior. Respecto a las salidas, se encontraría la  $V_{42}$  y la  $L_{42}$  que sirve como corriente de entrada líquida a la caldera E-206.

Como el caudal  $L_{42}$  y  $V_{42}$  están en equilibrio, y se conocen los datos relacionados con  $V_{42}$ , se estimó la composición de  $L_{42}$  y la temperatura de la etapa 42. Los resultados se presentan en la Tabla 23.

Tabla 23. Cálculo de la temperatura de la Etapa 42

ETAPA 42		Temperatura (°C) = 142,99			
	$y_{42,i}$	$P_i^o$ (bar)	$\gamma_i$	$K = \gamma_i(P^o/P)$	$x_{42,i} = y_{42,i} / K$
Ácido acético	0,011	2,060	0,977	1,746	0,006
Anh. acético	0,989	1,148	1,000	0,996	0,994
SUMA	1				1

Para calcular los flujos de  $V_{43}$  y  $L_{42}$ , además de la composición de  $V_{43}$ , se vuelve a plantear el sistema con las Ecuaciones 34, 35 y 42. Pero como se vino haciendo hasta ahora, se deben calcular las entalpías de cada corriente para poder proceder con la resolución del sistema. Los valores de entalpías específicas se muestran a continuación en la Tabla 24.

Tabla 24. Entalpías específicas para la Etapa 42 en kJ/kmol

n = 42	Temperatura (°C) = 142,92			Temperatura (°C) = 142,99		
	$x_{n-1}$	$h_{n-1}$	$(x \cdot h)_{n-1}$	$x_n$	$h_n$	$(x \cdot h)_n$
Ácido acético	0,009	51905,05	443,64	0,006	51915,85	312,48
Anh. acético	0,991	85751,56	85018,63	0,994	85765,97	85249,75
SUMA		$h_{41} =$	85462,27	SUMA	$h_{42} =$	85562,23
	Temperatura (°C) = 142,99			Temperatura (°C) = 143,02		
	$y_n$	$H_n$	$(y \cdot H)_n$	$y_{n+1}$	$H_{n+1}$	$(y \cdot H)_{n+1}$
Ácido acético	0,011	75147,76	789,58	0,007	75152,04	494,69
Anh. acético	0,989	126173,15	124847,44	0,993	126178,86	125348,28
SUMA		$H_{42} =$	125637,02	SUMA	$H_{42} =$	125842,97

Los resultados de resolver el sistema se presentan en la Tabla 25.

Tabla 25. Resultados de aplicar el sistema de ecuaciones de balance

Parámetro	$L_{42}$ (kmol/h)	$V_{43}$ (kmol/h)	$y_{43}$ , ácido acético	$y_{43}$ , anhídrido acético
Valor	347,93	223,99	0,007	1 - 0,007 = 0,993

Finalmente se recogen todos los resultados de aplicar la metodología MESH a la etapa 42 en la Tabla 26.

Tabla 26. Resultados de aplicar la metodología MESH a la Etapa 42

ETAPA 42	L <sub>41</sub>	L <sub>42</sub>	V <sub>43</sub>	V <sub>42</sub>
Flujo (kmol/h)	348,22	347,93	223,99	224,277
Temperatura (°C)	142,92	142,99	143,02	142,99
x   y ácido acético	0,009	0,006	0,007	0,011
x   y anh. acético	0,991	0,994	0,993	0,989
h   H (kJ/kmol)	85462,27	85562,23	125842,97	125637,02

Como se puede apreciar, la temperatura de V<sub>43</sub> es 143,02 °C, que coincide con la temperatura de burbuja de la caldera. Esa temperatura fue calculada anteriormente y se refleja en la Tabla 13. Esto significa que la etapa de equilibrio 43 correspondería a la caldera. En la Figura 17 se muestra el esquema de esta última etapa.

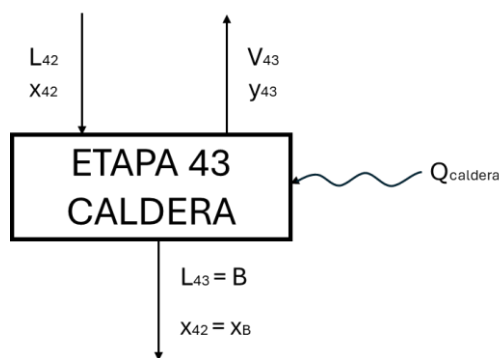


Figura 17. Etapa de equilibrio 43/Caldera

La etapa 43 consta de una entrada de líquido L<sub>42</sub> y dos salidas, una de vapor V<sub>43</sub> y otra de líquidos L<sub>43</sub> o corriente de colas de la columna, B. De estas tres la única desconocida es B, sin embargo al tratarse de la caldera debe tenerse en cuenta el calor que es necesario aportar para vaporizar la corriente, por lo que se plantea un sistema con las siguientes ecuaciones de balance para poder conocer sus valores.

$$L_{42} = B + V_{43} \quad [43]$$

$$L_{42} \cdot h_{42} + Q_{caldera} = B \cdot h_B + V_{43} \cdot H_{43} \quad [44]$$

Como se vino haciendo hasta ahora antes de resolver el sistema, se calculan las entalpías de cada corriente. Los valores se recogen en la Tabla 27.

Tabla 27. Entalpías específicas para la Etapa 43 en kJ/kmol

n = 43	Temp. (°C) = 142,99			Temp. (°C) = 143,02			Temp. (°C) = 143,02		
	x <sub>n-1</sub>	h <sub>n-1</sub>	(x·h) <sub>n-1</sub>	x <sub>n</sub>	H <sub>n</sub>	(x·H) <sub>n</sub>	x <sub>n</sub>	h <sub>n</sub>	(x·h) <sub>n</sub>
Ácido acético	0,006	51915,85	312,48	0,007	75152,04	494,69	0,005	51920,13	247,40
Anh. acético	0,994	85765,97	85249,75	0,993	126178,86	125348,28	0,995	85771,68	85362,97
		<b>h<sub>42</sub> =</b>	<b>85562,23</b>		<b>H<sub>43</sub> =</b>	<b>125842,97</b>		<b>h<sub>D</sub> =</b>	<b>85610,38</b>

Conocidos los valores de entalpía se resuelve el sistema y se obtiene los resultados de la Tabla 28.

Tabla 28. Resultados de resolver el sistema de la Etapa 43

Parámetro	B (kmol/h)	Q <sub>caldera</sub> (kJ/h)	X <sub>B</sub> , ácido acético	X <sub>B</sub> , anhídrido acético
Valor	123,94	9,03·10 <sup>6</sup>	0,005	1 - 0,005= 0,995

Los resultados de aplicar la metodología MESH a la caldera se recopilan en la Tabla 29.

Tabla 29. Resultados de aplicar la metodología MESH a la Etapa 43

ETAPA 42	B	L <sub>42</sub>	V <sub>43</sub>
Flujo (kmol/h)	123,94	347,93	223,99
Temperatura (°C)	143,02	142,99	143,02
x   y ácido acético	0,005	0,006	0,007
x   y anh. acético	0,995	0,994	0,993
h   H (kJ/kmol)	85610,38	85562,23	125842,97

Finalmente se concluye que la columna de destilación contará con un total de 43 etapas teóricas divididas en 42 platos y la caldera. A esto se le añade que la alimentación ingresaría en la etapa 9. En las Figuras 18 y 19 se representan los perfiles de temperatura y composición molar a lo largo de la columna de destilación respectivamente.

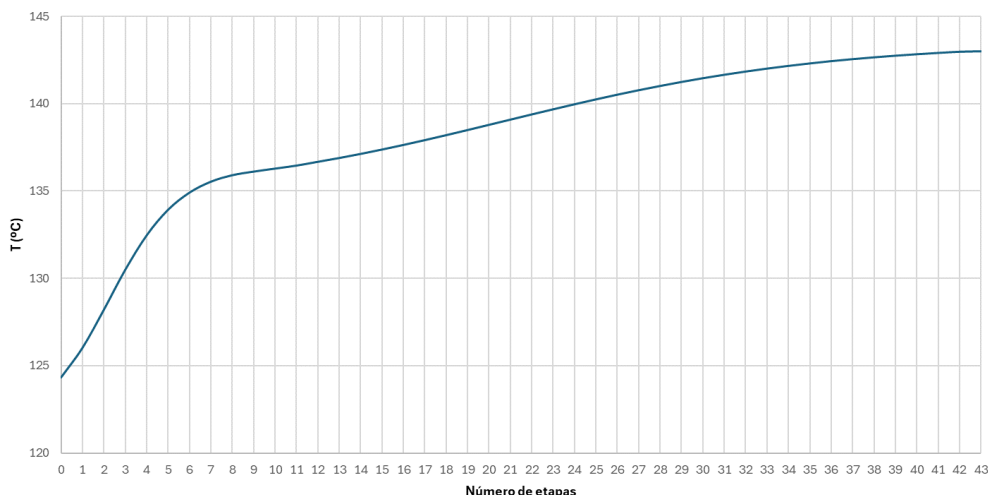


Figura 18. Perfil de temperaturas a lo largo de la columna de destilación

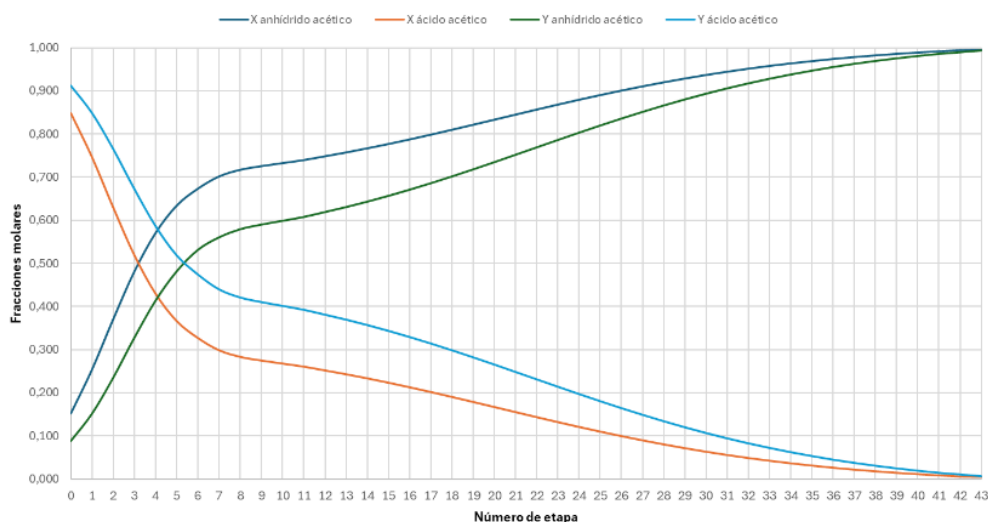


Figura 19. Perfil de composición molar a lo largo de la columna de destilación

Anexo II: Cálculos justificativos. Parte C: Columna de destilación T-202  
 Planta de producción de anhídrido acético por carbonilación de acetato de metilo

Tabla 30. Resumen de aplicar la metodología MESH la columna de destilación T-202, flujos en kmol/h y entalpías en kJ/kmol

n	T (°C)	Ln-1	Ln	Vn+1	Vn	xAnhídrido	xÁcido	yAnhídrido	yÁcido	hn	Hn
<b>0 (D=59,35)</b>	124,34	-	283,63	342,99	-	0,152	0,848	0,089	0,911	53955,38	-
<b>1</b>	126,04	283,63	264,19	323,54	342,99	0,254	0,746	0,152	0,848	57582,46	80070,08
<b>2</b>	128,22	264,19	245,53	304,88	323,54	0,370	0,630	0,235	0,765	61799,75	84601,41
<b>3</b>	130,50	245,53	230,58	289,94	304,88	0,481	0,519	0,328	0,672	65876,44	89653,49
<b>4</b>	132,48	230,58	220,12	279,48	289,94	0,570	0,430	0,414	0,586	69210,69	94334,27
<b>5</b>	133,94	220,12	213,40	272,75	279,48	0,634	0,366	0,481	0,519	71609,14	98028,88
<b>6</b>	134,92	213,40	209,23	268,58	272,75	0,673	0,327	0,531	0,474	72441,59	100842,12
<b>7</b>	135,55	209,23	206,82	266,17	268,58	0,701	0,299	0,560	0,440	74183,23	102315,20
<b>8</b>	135,92	206,82	205,42	264,77	266,17	0,717	0,283	0,579	0,421	74769,09	103338,76
<b>9 (F=138,30)</b>	136,13	205,42	387,61	263,67	264,77	0,725	0,275	0,590	0,410	75098,22	103921,75
<b>10</b>	136,30	387,61	386,44	262,49	263,67	0,732	0,268	0,599	0,401	75366,53	104401,28
<b>11</b>	136,47	386,44	385,09	261,15	262,49	0,739	0,261	0,608	0,392	75636,43	104887,50
<b>12</b>	136,69	385,09	383,73	259,79	261,15	0,748	0,252	0,619	0,381	75975,13	105503,27
<b>13</b>	136,91	383,73	382,25	258,31	259,79	0,757	0,243	0,630	0,370	76316,66	106130,43
<b>14</b>	137,14	382,25	380,69	256,74	258,31	0,767	0,233	0,643	0,357	76682,29	106808,87
<b>15</b>	137,39	380,69	379,05	255,10	256,74	0,777	0,223	0,656	0,344	77070,33	107536,90
<b>16</b>	137,65	379,05	377,35	253,40	255,10	0,787	0,213	0,671	0,329	77478,58	108311,80
<b>17</b>	137,93	377,35	375,60	251,66	253,40	0,798	0,202	0,686	0,314	77904,20	109129,50
<b>18</b>	138,22	375,60	373,82	249,88	251,66	0,810	0,190	0,701	0,299	78343,80	109984,66
<b>19</b>	138,51	373,82	372,03	248,08	249,88	0,821	0,179	0,718	0,282	78793,56	110870,81
<b>20</b>	138,80	372,03	370,23	246,29	248,08	0,833	0,167	0,734	0,266	79249,32	111780,49
<b>21</b>	139,10	370,23	368,46	244,52	246,29	0,845	0,155	0,751	0,249	79706,84	112705,57
<b>22</b>	139,40	368,46	366,73	242,79	244,52	0,856	0,144	0,769	0,231	80161,73	113637,25
<b>23</b>	139,70	366,73	365,04	241,10	242,79	0,868	0,132	0,786	0,214	80609,95	114566,99
<b>24</b>	139,98	365,04	363,42	239,48	241,10	0,879	0,121	0,803	0,197	81047,65	115486,20
<b>25</b>	140,26	363,42	361,87	237,93	239,48	0,890	0,110	0,819	0,181	81471,40	116386,83
<b>26</b>	140,53	361,87	360,40	236,46	237,93	0,900	0,100	0,835	0,165	81878,30	117261,62
<b>27</b>	140,79	360,40	359,02	235,08	236,46	0,910	0,090	0,851	0,149	82265,98	118104,25
<b>28</b>	141,03	359,02	357,73	233,78	235,08	0,920	0,080	0,866	0,134	82632,66	118909,49
<b>29</b>	141,26	357,73	356,52	232,58	233,78	0,928	0,072	0,880	0,120	82977,09	119673,24
<b>30</b>	141,47	356,52	355,41	231,47	232,58	0,937	0,063	0,893	0,107	83298,58	120392,58
<b>31</b>	141,67	355,41	354,39	230,45	231,47	0,944	0,056	0,905	0,095	83596,87	121065,66
<b>32</b>	141,86	354,39	353,46	229,52	230,45	0,951	0,049	0,917	0,083	83872,16	121691,63
<b>33</b>	142,03	353,46	352,61	228,67	229,52	0,958	0,042	0,928	0,072	84124,95	122270,55
<b>34</b>	142,18	352,61	351,84	227,90	228,67	0,963	0,037	0,937	0,063	84356,04	122803,20
<b>35</b>	142,32	351,84	351,14	227,19	227,90	0,969	0,031	0,946	0,054	84566,42	123290,88
<b>36</b>	142,45	351,14	350,52	226,57	227,19	0,974	0,026	0,955	0,045	84763,31	123749,90
<b>37</b>	142,57	350,52	349,95	226,01	226,57	0,978	0,022	0,962	0,038	84934,61	124151,21
<b>38</b>	142,67	349,95	349,44	225,50	226,01	0,982	0,018	0,969	0,031	85089,05	124514,57
<b>39</b>	142,76	349,44	348,99	225,04	225,50	0,986	0,014	0,975	0,025	85227,80	124842,31
<b>40</b>	142,85	348,99	348,58	224,64	225,04	0,989	0,011	0,980	0,020	85352,27	125137,33
<b>41</b>	142,92	348,58	348,22	224,28	224,64	0,991	0,009	0,985	0,015	85463,65	125402,14
<b>42</b>	142,99	348,22	347,94	223,99	224,28	0,994	0,006	0,989	0,011	85562,23	125637,02
<b>43 (B=123,94)</b>	143,02	347,94	-	-	223,99	0,995	0,005	0,993	0,007	85610,38	125842,97

### 3.7. Eficiencia de la columna

En cualquier equipo industrial la realidad siempre se aleja de la idealidad, y es por ello que se precisa aplicar un factor de eficiencia a los platos de la columna. Pues es extremadamente complejo alcanzar el equilibrio en cada etapa. La siguiente Ecuación muestra como calcular la eficiencia de la columna ( $E_0$ ): (1)

$$E_0 = \frac{\text{número de platos ideales}}{\text{número de platos reales}} \quad [45]$$

A su vez, existen diferentes correlaciones para estimar la eficiencia, como por ejemplo la de O'Connell, *Ecuación 46* (1). La eficiencia global de la columna está correlacionada con el producto de la volatilidad relativa del componente clave ligero respecto al clave pesado, y la viscosidad de la corriente de entrada a la temperatura media de la columna.

$$E_0 = 51 - 32,5 \cdot \log(\mu_a \cdot \alpha_a) \quad [46]$$

Donde  $\mu_a$  es la viscosidad en cP y  $\alpha_a$  la volatilidad relativa del ácido acético.

La viscosidad de cada compuesto se calcula empleando la correlación siguiente: (12)

$$\mu_i = \exp\left(C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 \cdot \ln T + C_4 \cdot T^{C_5}\right) \quad [47]$$

Donde T es la temperatura en K,  $C_n$  constantes de la correlación que dependen de cada compuesto y viscosidad  $\mu$  en Pa·s. Dichas constantes se muestran en la Tabla 31.

Tabla 31. Constantes para el cálculo de la viscosidad (12)

	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$C_5$
<b>Ácido acético</b>	-9,030	1212,3	-0,3220	-	-
<b>Anhídrido acético</b>	-20,457	1.638,6	1,3834	-	-

Como se trata de una mezcla de dos compuestos, la viscosidad se calcula despejando  $\mu_m$  de la *Ecuación 48*.

$$\frac{1}{\mu_m} = \frac{x_{F,1}}{\mu_1} + \frac{x_{F,2}}{\mu_2} \quad [48]$$

Donde x hace referencia a las fracciones másicas de alimentación de anhídrido acético (subíndice 1) y ácido acético (subíndice 2).

La volatilidad relativa es el otro parámetro necesario para el cálculo de la eficiencia. La *Ecuación 49* se emplea para su cálculo.

$$\alpha = \frac{P_2^0 \cdot \gamma_2}{P_1^0 \cdot \gamma_1} \quad [49]$$

Se debe calcular la volatilidad relativa para la temperatura de colas y de cabezas. Con ello, se realiza una media geométrica con la *Ecuación 50*. (1)

$$\alpha_a = \sqrt{\alpha_{cabeza} \cdot \alpha_{colas}} \quad [50]$$

Con todo esto, ya es posible calcular la eficiencia. En la Tabla 32 se pueden observar los resultados.

Tabla 32. Resultados del cálculo de la eficiencia

Parámetro	$\alpha_{cabezas}$	$\alpha_{colas}$	$\alpha_a$	$\mu_1$ (cP)	$\mu_2$ (cP)	$\mu_a$ (cP)	$E_0$ (%)
Valor	1,60	1,75	1,67	0,34	0,30	0,31	60,38%

Con el diseño riguroso se calcularon un total de 42 platos teóricos, que al aplicar el factor de efectividad del 60,38% resultan en  $69,56 \approx 70$  platos reales. Debido al incremento de platos, es necesario recalcular en que nueva etapa se introduce la alimentación, *Ecuación 51*.

$$Etapa \ de \ alimentación \ real = \frac{Etapa \ de \ alimentación \ ideal}{N_{platos \ ideales}} \cdot N_{platos \ reales} = \frac{9}{42} \cdot 70 = 15 \quad [51]$$

Una vez aplicada la corrección por eficiencia, se obtiene que la corriente de entrada debe entrar en el plato 15.

## 4. Diseño hidráulico

Una vez se conoce el número de etapas reales de las que constará la columna de destilación, se procede con el diseño hidráulico de esta.

### 4.1. Caudales de líquido y de vapor

Lo primero será dejar constancia de los caudales máximos y mínimos de líquido y de vapor, tanto en la zona de enriquecimiento como en la de agotamiento. Los caudales molares y máximos para ambas fases fueron calculadas en el apartado 3.2 *Balances de materia*. Se decide tomar dichos caudales como los máximos y según bibliografía (1), los mínimos se pueden estimar como el 70% del valor máximo. La Tabla 33 recoge estos valores:

Tabla 33. Caudales de líquido y vapor máximo y mínimo en la zona de enriquecimiento y agotamiento

(kg/s)	Lw max	Lw min	Vw max	Vw min
Enriquecimiento	5,234	3,664	6,329	4,431
Agotamiento	13,214	9,250	9,706	6,795

### 4.2. Propiedades físico-químicas

Para el correcto diseño del equipo es necesario recopilar una serie de propiedades de líquido y vapor. Como se mencionó anteriormente existe una caída de presión en el equipo,  $\Delta P$ , que no podía ser hallada hasta ahora por no conocer el número de etapas de equilibrio, de ahí la

suposición de presión constante a lo largo de la columna. La literatura indica que se puede tomar como primera aproximación una caída de presión por plato de 100 mm de agua. Más tarde se comprobará si esta es válida o no. La *Ecuación 52* permite calcular la  $\Delta P$  total.

$$\Delta P = (\Delta P_{plato} \cdot 10^{-3}) \cdot \rho_{agua} \cdot g \cdot N_{etapas} \quad [52]$$

Donde:

- $\Delta P$  es la caída de presión de la columna en Pa.
- $\Delta P_{plato}$  es la caída de presión por plato en mm de agua.
- $\rho_{agua}$  es la densidad del agua en  $\text{kg/m}^3$ .
- $g$  es la aceleración de la gravedad en  $\text{m/s}^2$ .
- $N_{etapas}$  es el número de etapas de la columna.

Por ende, se obtiene una caída de presión por plato de 981 Pa ( $9,81 \cdot 10^{-3}$ ). Con esto, se puede saber que la presión a la cabeza será de 1,01 bar y en la cola de 1,69 bar.

Otra propiedad a calcular es la tensión superficial,  $\sigma$ , la cual se calcula según la *Ecuación 53*. Al igual que pasaba con la viscosidad, como se trata de una mezcla de dos componentes se aplica la *Ecuación 54*. (12)

$$\sigma = \left[ \frac{P_{ch}(\rho_L - \rho_V)}{M} \right]^4 \cdot 10^{-12} \quad [53]$$

$$\sigma_{mezcla} = \sigma_1 \cdot x_{F,1} + \sigma_2 \cdot x_{F,2} \quad [54]$$

Donde:

- $P_{ch}$  es el paracoro de Sugden.
- $\rho_V$  es la densidad de vapor en  $\text{kg/m}^3$ . Puede ser despreciado, pues su valor es muy pequeño en comparación con la densidad del líquido.
- $\rho_L$  es la densidad de líquido en  $\text{kg/m}^3$ .
- $M$  es la masa molar en  $\text{kg/kmol}$ .
- $x_{F,1}$  y  $x_{F,2}$  son las fracciones molares de alimentación del anhídrido acético y del ácido acético respectivamente.

Finalmente se estimará la densidad de vapor y de líquido en ambas zonas, enriquecimiento y agotamiento. Para la fase líquida se procede según la *Ecuación 55* (12)

$$\rho_{L,i} = \frac{C_1}{C_2 \left( 1 + \left( 1 - \frac{T}{C_3} \right)^{C_4} \right)} \cdot M \quad [55]$$

Donde  $C_n$  son constantes obtenidas por bibliografía (12),  $T$  es la temperatura media de la columna en K y  $M$  la masa molar en  $\text{kg/kmol}$ . La Tabla 34 muestra los valores de las  $C_n$ .

Tabla 34. Constantes para el cálculo de la densidad líquida (12)

Compuesto	C1	C2	C3	C4
Ácido acético	1,44860	0,25892	591,95	0,25290
Anhídrido acético	0,79388	0,24119	606,00	0,29817

En lo que respecta a la densidad de la fase gas, a pesar de que para el cálculo de la tensión superficial puede ser despreciada, se necesitará para futuros puntos en el diseño. Los valores se obtienen empleando la *Ecuación 56*:

$$\rho_{v,i} = \frac{P \cdot M}{R \cdot T} \quad [56]$$

La Tabla 35 recoge todos los valores obtenidos con las ecuaciones para el cálculo de la tensión superficial y densidades.

Tabla 35. Valores de tensión superficial y densidad de mezcla líquida y valor

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
$\sigma$ (N/m)	0,017	0,019
$\rho_L$ (kg/m <sup>3</sup> )	921,69	932,39
$\rho_g$ (kg/m <sup>3</sup> )	1,98	5,10

### 4.3. Espaciado entre platos

La altura total de la columna va a depender principalmente del número de etapas que conformen el equipo y el espaciado que se le dé entre cada una de ellas. El espaciado habitual que se recomienda es entre 0,15 y 1 metro, sin embargo este dependerá del diámetro de la carcasa. Como se estima que el diámetro será igual o mayor a un metro, se puede seleccionar de manera inicial un espaciado entre 0,3 y 0,6 m. En este caso se decide tomar 0,5 m para poder comenzar a diseñar y posteriormente se comprobará si este espaciado y la suposición de diámetro son válidos. (1)

### 4.4. Diámetro de la columna

Estimar el diámetro de la columna dependerá de la velocidad de vapor más alta con la que se pueda trabajar, y que a su vez depende de las condiciones de inundación. La columna se comenzará a diseñar tomando un porcentaje de inundación del 85%, dentro del rango entre 70 y 90% que recomienda la bibliografía. Como cualquier asunción, será comprobada más tarde y en caso de no ser válida se recalculará. La velocidad de inundación se puede calcular con las *Ecuaciones 57 y 58*. (1)

$$u_f = K_1 \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V}} \quad [57]$$

$$u_v = \%inundación \cdot u_f \quad [58]$$

Donde:

- $u_f$  es la velocidad de inundación de diseño expresada en m/s y basada en la sección transversal del área neta  $A_n$ .
- $u_v$  es la velocidad de inundación de operación en m/s.
- $K_1$  es una constante que se obtiene de la Figura 20.
- $\rho_L$  y  $\rho_V$  son las densidades de líquido y de vapor respectivamente.

Los resultados del cálculo de las velocidades se muestran a continuación en la Tabla 36.

Tabla 36. Velocidades de inundación en la zona de agotamiento y de enriquecimiento

(m/s)	Enriquecimiento	Agotamiento
$u_f$	1,903	1,093
$u_v$	1,618	0,929

Como se mencionó, para conocer la constante  $K_1$  se hace uso de la Figura 20. Para la cual se necesita el factor de flujo líquido-vapor  $F_{LV}$ , que se calcula con la Ecuación 59.

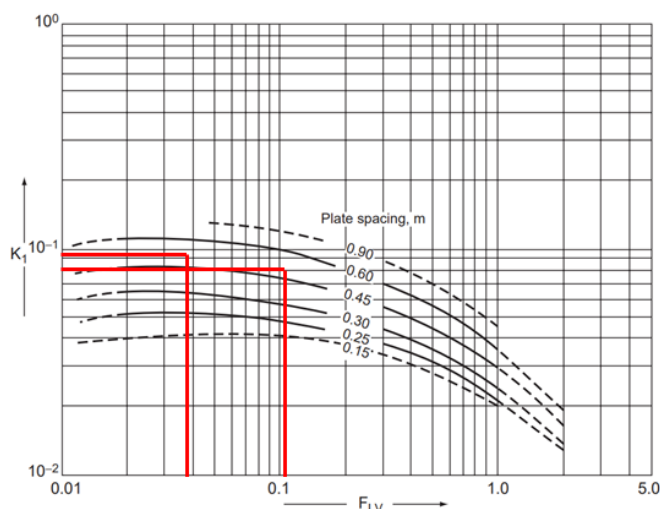


Figura 20. Gráfica para la obtención de la constante  $K_1$  (6)

$$F_{LV} = \frac{L_W}{V_W} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} \quad [59]$$

Como la tensión superficial,  $\sigma$  en la Tabla 35, no es exactamente igual a 0,02 N/m, es necesario corregir el valor de  $K_1$  mediante la Ecuación 60. En la Tabla 37 se recogen los resultados de aplicar la Ecuación 59 y los valores de  $K$  (1)

$$K_{1,corregida} = K_1 \left[ \frac{\sigma}{0,02} \right]^{0,2} \quad [60]$$

Tabla 37. Valores del factor de flujo líquido-vapor y de la constante  $K_1$ .

	Enriquecimiento	Agotamiento
$F_{LV}$	0,0383	0,1007
$K_1$	0,0910	0,0820
$K_{1,corregida}$	0,0882	0,0810

Para conocer el diámetro interno de la carcasa  $D_c$ , en metros, Ecuación 61, se precisa conocer también el área de la columna, conocido como  $A_c$  en  $m^2$ , Ecuación 62. Simultáneamente, para su cálculo se determina el caudal volumétrico de vapor máximo  $Q_{v,max}$  en  $m^3/s$ , Ecuación 63, y el área neta,  $A_n$  en  $m^2$ , Ecuación 64, en cada zona de la columna.

$$D_c = \sqrt{\frac{4A_c}{\pi}} \quad [61]; \quad A_c = \frac{A_n}{1 - \%bajante} \quad [62]$$

$$Q_{v,max} = \frac{V_{w,máx}}{\rho_v} \quad [63]; \quad A_n = \frac{Q_{v,máx}}{u_v} \quad [64]$$

Los resultados de aplicar estas ecuaciones se encuentran en la Tabla 38.

Tabla 38. Resultados para el cálculo del diámetro de la columna de destilación

	Enriquecimiento	Agotamiento
$Q_{v,max}$ (m <sup>3</sup> /s)	3,20	1,90
$A_n$ (m <sup>2</sup> )	1,98	2,05
$A_c$ (m <sup>2</sup> )	2,25	2,33
$D_c$ (m)	1,693	1,722

Con respecto a los resultados de esta tabla, comentar que, para emplear la Ecuación 62, la bibliografía (1) indica que se puede tomar una estimación del 12% para el porcentaje de la bajante. Además se comparan los diámetros en la zona de enriquecimiento y de agotamiento, y como la diferencia entre ellos es menor al 20%, se decide tomar el valor mayor, es decir 1,722m para todo el largo de la columna.

#### 4.5. Patrón de flujo

Los platos de flujo cruzado son el tipo de dispositivo de contacto más utilizado en columnas de destilación. En estos el líquido fluye a través de la parte superior del plato mientras que el vapor lo hace ascendiendo a través de los orificios. En la Figura 21, se puede apreciar la disposición de este tipo de patrón.

Seguidamente se comprobará con qué tipo de patrón cuenta la columna de destilación que se está diseñando. Para ello se hace uso de la Figura 22.

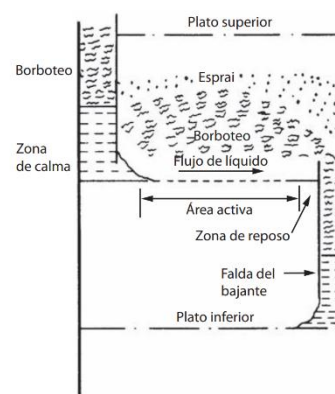


Figura 21. Plato perforado de flujo cruzado (2)

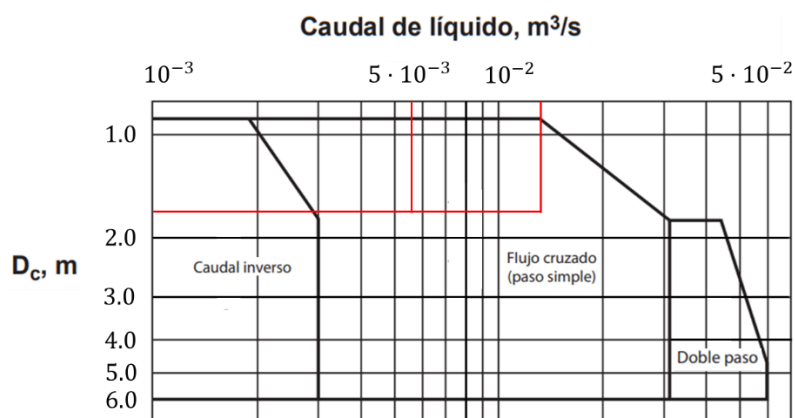


Figura 22. Gráfico para conocer el patrón de flujo (Adaptado de (2))

Conociendo el diámetro interno de la columna y el flujo volumétrico máximo del líquido en m<sup>3</sup>/s, calculado con la *Ecuación 65*, se obtiene que el flujo de la columna T-202 es flujo cruzado con paso simple. La Tabla 39 recoge los resultados.

$$Q_{L,max} = \frac{L_{w,máx}}{\rho_L} \quad [65]$$

Tabla 39. Valores de flujo volumétrico líquido máximo

(m <sup>3</sup> /s)	Enriquecimiento	Agotamiento
<b>Q<sub>L,max</sub></b>	0,0057	0,0142

#### 4.6. Construcción del plato

En el apartado 2.4. *Selección del tipo de dispositivo de contacto*, se concluyó que la mejor opción para esta torre era el uso de platos. No obstante, se distinguen 4 tipos de platos: platos perforados, de campana de burbujeo, de válvula sencilla y de válvula fija, estos se pueden apreciar en la Figura 23.

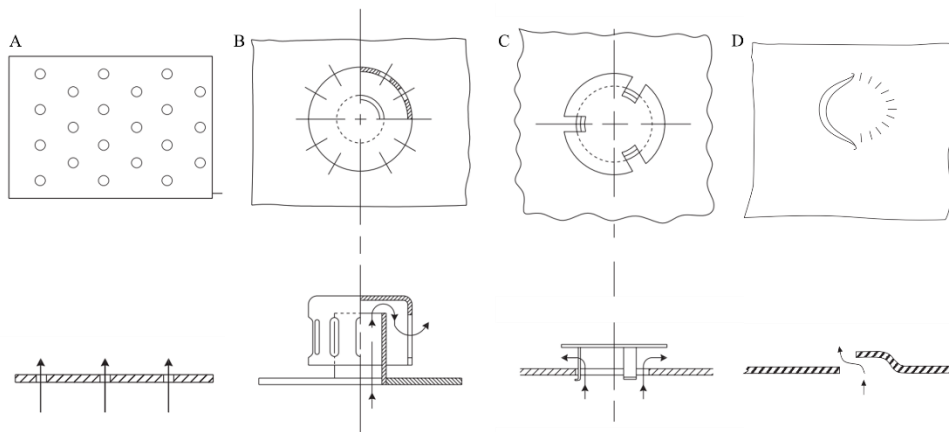


Figura 23. Tipos de platos (2)

Seleccionar uno u otro dependerá de las condiciones de operación tales como la presión y factores económicos. En este caso, debido a que la presión de operación de la columna no es demasiado elevada y que el coste de fabricación es mucho menor para los platos perforados, se decide seleccionar este tipo.

La estructura del plato se define mediante una serie de áreas (en m<sup>2</sup>) y alturas (en m) que en su conjunto, dimensionan el plato: (1)

- A<sub>c</sub>: Área de la sección transversal de la columna.

Despejando de la *Ecuación 61* el valor de A<sub>c</sub>, se obtiene la *Ecuación 66*.

$$A_c = \frac{\pi \cdot D_c^2}{4} \quad [66]$$

- $A_d$ : Área de la bajante

Corresponde a la zona del plato por la que cae el líquido. La literatura consultada (1) indica que se puede estimar como un porcentaje del área de la sección transversal de la columna, *Ecuación 67*. En el apartado 4.4. *Diámetro de la columna* se estimó en un 12% del área mencionada. Por lo que se continuará el procedimiento con ese valor.

$$A_d = A_c \cdot \%_{bajante} \quad [67]$$

- $A_n$ : Área neta disponible

Se trata de la parte del plato disponible para sobre las que fluye el líquido. Para platos de paso simple se calcula según la *Ecuación 68*.

$$A_n = A_c - A_d \quad [68]$$

- $A_a$ : Área activa o área de borboteo, *Ecuación 69*.

$$A_a = A_c - 2A_d \quad [69]$$

- $A_p$ : Área perforada

Se puede estimar como un porcentaje del área activa. Se comenzará suponiendo un 10% de este, debido a que si se estima otro, la constante  $K_1$  debe volver a corregirse siguiendo lo que se muestra en la Tabla 40.

Tabla 40. Factor de corrección de  $K_1$  dependiendo del %perforado (1)

% perforado	Factor de corrección de $K_1$
10	1,0
8	0,9
6	0,8

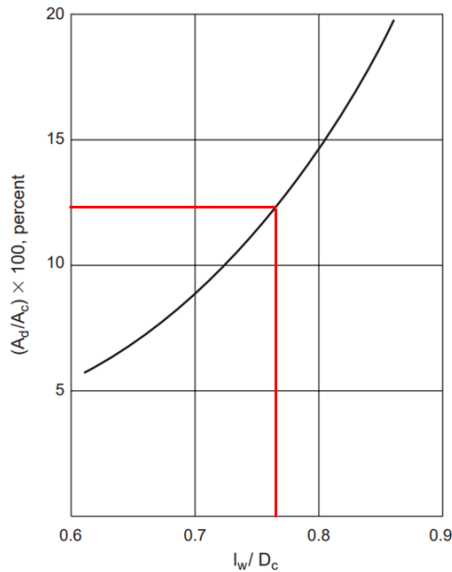
En la Tabla 41 se recogen los valores de las diferentes áreas involucradas.

Tabla 41. Valores de las áreas del plato

Área	$A_c$	$A_d$	$A_n$	$A_a$	$A_p$
Valor en $m^2$	2,33	0,279	2,05	1,77	0,177

- $l_w$ : longitud del rebosadero

Por su parte, la longitud del rebosadero depende de la relación que haya entre el área de la bajante y el de la sección transversal de la columna y el diámetro interno del equipo. Mediante la Figura 24 y la *Ecuación 70* se puede dar a conocer.



$$\frac{A_d}{A_c} \cdot 100 = \frac{0,279}{2,33} \cdot 100 = 12\% \quad [70]$$

Figura 24. Gráfica para calcular la longitud del rebosadero (2)

El gráfico proporciona un valor de  $l_w/D_c$  de 0,76. Como se conoce el diámetro de la columna,  $D_c=1,722$  m se obtiene una longitud del rebosadero de  $l_w=1,31$  m.

- $h_w$ : Altura del rebosadero

La altura del rebosadero determinará el volumen de líquido en el plato. Cuanta más altura la eficiencia por plato se verá favorecida, en cambio la caída de presión por este se incrementa. Para las columnas que operan a una presión cercana a la atmosférica, el valor de la altura del rebosadero ronda entre los 40 y 90 mm pero el rango recomendado está entre los 40 y 50 mm. Para este caso se tomarán 40 mm. (1)

- $d_0$ : Diámetro de los agujeros

Este suele rondar entre valores de 2,5 y 12 mm, pero el valor de preferencia son 5 mm. Grandes dimensiones de agujero provocan que parte del agua desborde por ellos, lo que empeoraría la eficiencia del plato. Mientras que diámetros muy pequeños aumentan la resistencia al flujo de vapor lo que podría reducir la velocidad de vapor. (1)

- $t$ : Espesor de plato

Para un material de construcción como aceros al carbono se puede tomar un espesor de 5 mm y para aceros inoxidables 3 mm. El diámetro de los orificios depende del espesor, pues para aceros al carbono el diámetro de los agujeros se recomienda que sea igual al espesor del plato; sin embargo, para aceros al carbono, el diámetro de las perforaciones recomendado es aquel que sea aproximadamente el doble que el espesor. Por lo que si se tomó 5 mm de diámetro perforado, 3 mm para el espesor es aproximadamente la mitad y la estimación se daría por válida. (1)

#### 4.7. Comprobación de la velocidad de goteo

La velocidad de goteo es aquella que implica que el caudal de líquido a través de los orificios del plato no se vuelva excesiva. Básicamente es la velocidad mínima de vapor que debe haber a través de los agujeros para asegurar el correcto funcionamiento de la columna de destilación. Existen varias correlaciones que proponen su cálculo pero en este caso se empleará de la Eduljee, Ecuación 71. (1)

$$u_h = \frac{[K_2 - 0,90(25,4 - d_0)]}{(\rho_v)^{1/2}} \quad [71]$$

Donde  $u_h$  es la velocidad mínima de vapor en m/s,  $d_h$  es el diámetro de las perforaciones en mm,  $\rho_v$  la densidad de vapor y  $K_2$  es una constante que se obtiene mediante la Figura 25 y depende de la profundidad del líquido sobre el plato. Esta se calcula como la suma de la altura del rebosadero  $h_w$ , y la altura del líquido en el rebosadero  $h_{ow}$ . Este último parámetro resulta de la Ecuación 72.

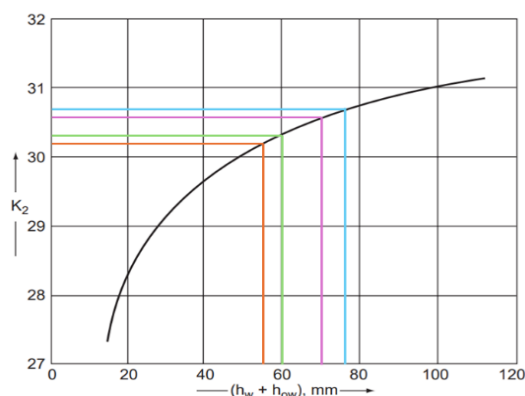


Figura 25. Gráfica para obtener el valor de la constante  $K_2$  (2)

$$h_{ow} = 750 \left[ \frac{L_w}{\rho_L l_w} \right]^{\frac{2}{3}} \quad [72]$$

Donde  $L_w$  es el caudal mínimo de líquido en kg/s calculado en el apartado 4.1 Caudales de líquido y de vapor como el 70% del caudal másico máximo,  $l_w$  es la longitud del rebosadero en m y  $\rho_L$  es la densidad del líquido en kg/m<sup>3</sup>.

Llegado este punto, se debe calcular la velocidad de goteo real y compararla con la mínima, es decir, comparar los resultados de las Ecuaciones 71 y 73.

$$u_{h,real} = \frac{V_{w,min}/\rho_g}{A_p} \quad [73]$$

Tabla 42. Resultados de la comprobación de la velocidad de goteo

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
$u_h$ (m/s)	8,41	5,39
$how_{max}$ (mm)	19,95	36,71
$how_{min}$ (mm)	15,73	28,94
$(hw+how)_{max}$ (mm)	59,95 ( $K_2=30,32$ )	76,71 ( $K_2=30,68$ )
$(hw+how)_{min}$ (mm)	55,73 ( $K_2=30,18$ )	68,94 ( $K_2=30,54$ )
$u_{h,real}$ (m/s)	12,67	7,53

Se observa que la velocidad de vapor real es mayor a la mínima, por lo que a priori no debería existir goteo y las dimensiones supuestas para las perforaciones se dan por válidas. Si el valor real fuera menor sería necesario reducir el diámetro de los agujeros y recalcular.

#### 4.8. Comprobación de la caída de presión

En el apartado 4.2 de *propiedades físico-químicas*, se mencionó que la caída de presión supuesta debía ser comprobada. Los dos motivos principales que la provocan son el flujo de vapor a través de los agujeros y la carga de líquido sobre el plato.

Para calcular la caída de presión por plato se emplea un modelo de predicción que suma la caída de presión en el plato seco  $h_d$ , la profundidad del líquido ( $h_w+h_{ow}$ ) y un término  $h_r$  que recoge otras posibles pérdidas de presión, todas ellas recogidas en las *Ecuaciones 74-78*. (1)

$$\Delta P_t = g \cdot 10^{-3} \cdot h_t \cdot \rho_L \quad [74] \quad u_h = \frac{(V_{w,max}/\rho_V)}{A_p} \quad [77]$$

$$h_t = h_d + (h_w + h_{ow}) + h_r \quad [75] \quad h_r = \frac{12,5 \cdot 10^3}{\rho_L} \quad [78]$$

$$h_d = 51 \cdot \left[ \frac{u_h}{C_0} \right]^2 \cdot \frac{\rho_V}{\rho_L} \quad [76]$$

Donde  $u_h$  es la velocidad máxima de vapor a través de los agujeros del plato en m/s,  $C_0$  es el coeficiente del orificio, se obtiene empleando la Figura 26, y  $\Delta P_t$  es la caída de presión por plato. El valor de  $12,5 \cdot 10^3$  mm de agua en la *Ecuación 78* se selecciona por las recomendaciones bibliográficas (1).

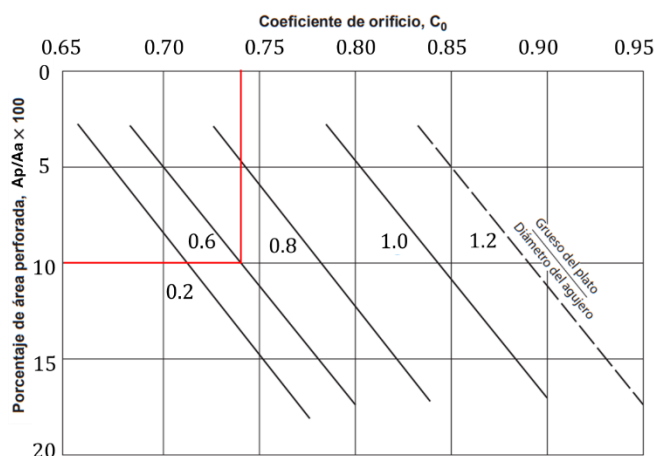


Figura 26. Gráfica para obtener el valor del coeficiente de orificio  $C_0$  (Adaptado de (2))

Para usar la Figura 26 se debe conocer la relación entre el espesor del plato y el diámetro del agujero y la relación porcentual entre el área perforada frente al área activa. Las relaciones se calculan con los datos del apartado 4.6 *Construcción del plato*, y se obtiene que para  $t/d_0$  el valor es 0,6 y para  $A_p/A_a$  uno del 10%. Con esto se concluye que el coeficiente  $C_0$  debe tener un valor de 0,74.

La Tabla 43 recoge los resultados de aplicar las ecuaciones del presente apartado.

Tabla 43. Resultados de comprobar la caída de presión

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
$u_h$ (m/s)	18,10	10,76
$h_r$ (mm)	13,56	13,41
$h_d$ (mm)	65,41	58,93
$h_{t,calculada}$ (mm)	138,92	149,05
$h_{t,asumida}$ (mm)	108,50	107,25
$\Delta P_t$ (Pa)	1256,11	1363,33

Los valores de  $h_{t,asumida}$  se calcularon despejando la Ecuación 74 el valor de  $h_t$  y tomando  $\Delta P$  igual a 100 mm de agua (981 Pa). Se observa que los valores asumidos son menores que los calculados. Se podría recalculer suponiendo otros valores de diámetro para las perforaciones o un nuevo espesor del plato. En cambio, fuentes bibliográficas (1) indican que errores menores o aproximados al 30% no suponen un problema debido a que el impacto sobre las propiedades físicas apenas afecta al diseño del plato.

#### 4.9. Comprobación del retorno de la bajante

El área de retorno de la bajante y el espaciado entre platos debe asegurar ser suficiente para que el nivel de líquido en el plato no supere la altura del rebosadero del plato anterior, pues esto significaría que la columna estaría inundada. El retorno del líquido en la bajante es causado por la caída de presión en el plato y por la propia resistencia del flujo en la bajante. (1)

Con el fin de poder comprender mejor a qué se refieren los términos que se presentarán en las ecuaciones posteriores, en la Figura 27 se muestran los parámetros que se abarcan este apartado.

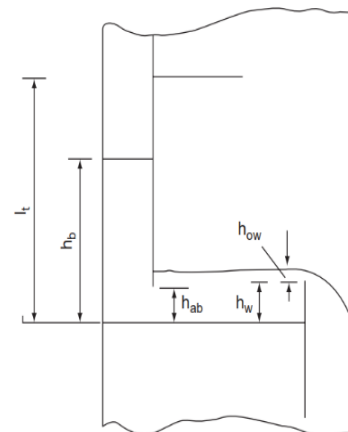


Figura 27. Alturas de la bajante del plato (2)

La altura del retorno de la bajante se puede conocer utilizando la Ecuación 79.

$$h_b = (h_w + h_{ow}) + h_t + h_{dc} \quad [79]$$

$h_{dc}$  es la pérdida de carga en la bajante en mm. Se puede estimar con la Ecuación 80.

$$h_{dc} = 166 \cdot \left[ \frac{L_{wd}}{\rho_L \cdot A_m} \right]^2 \quad [80]$$

Donde  $L_{wd}$  es el flujo másico de la bajante en kg/s, que se asume para el diseño igual al flujo másico de máximo de la columna, y  $A_m$  es el valor más pequeño entre el área de la bajante  $A_d$  y el área libre por debajo de la bajante  $A_{ap}$ .

$A_d$  fue calculada en el apartado 4.6 *Construcción del plato*, y  $A_{ap}$  se puede calcular mediante la *Ecuación 81*.

$$A_{ap} = h_{ab} \cdot l_w \quad [81]$$

Donde  $h_{ab}$  es la altura entre la placa y el final de la bajante del plato anterior. Dicha altura se suele asumir normalmente entre 5 y 10 mm por debajo de la altura del rebosadero  $h_w$ . Se asumirán 10 mm por debajo en la *Ecuación 82* y se comprobará si la suposición es válida.

$$h_{ab} = h_w - (5 \text{ a } 10 \text{ mm}) \quad [82]$$

Con todo esto, se calcularía  $h_b$  y se comprobaría que se cumple la *Ecuación 83* para garantizar un diseño seguro.

$$h_{ab} < \frac{1}{2}(l_t + h_w) \quad [83]$$

La recopilación de resultados aparece en la Tabla 44 a continuación.

Tabla 44. Resultados de la comprobación del retorno de la bajante

Parámetro	$h_{dc}$ (mm)	$A_m$ (m <sup>2</sup> )	$A_d$ (m <sup>2</sup> )	$A_{ap}$ (m <sup>2</sup> )	$h_{ap}$ (mm)	$h_b$ (mm)	$1/2 (l_t+h_w)$
Valor	21,63	0,04	0,28	0,04	30	237,27	270

Se concluye que como la *Ecuación 83* se cumple por ser  $237,27 < 270,00$ , el espaciado entre platos asumido de 0,5 m y la suposición del cálculo de  $h_{ab}$  son aceptables.

#### 4.10. Verificación del tiempo de residencia

Un tiempo de residencia satisfactorio es aquel que permita el suficiente contacto entre la fase líquida y vapor y con el que se alcance la separación. Si el tiempo de residencia no es adecuado, el vapor podría provocar arrastre de líquido, lo que perjudicaría al sistema. La *Ecuación* para su cálculo es la siguiente: (1)

$$t_r = \frac{A_d \cdot h_{bc} \cdot \rho_L}{L_{wd}} \quad [84]$$

La bibliografía (1) indica que el tiempo de residencia sea de al menos 3 segundos por plato. Los resultados de la Tabla 45 dejan constancia de que el tiempo de residencia por plato es aceptable por seguir la recomendación bibliográfica.

Tabla 45. Tiempos de residencia

(s)	Enriquecimiento	Agotamiento
$t_r$	4,62	4,68

#### 4.11. Diseño hidráulico del plato

Los requerimientos básicos para los dispositivos de contacto son: (1)

- Asegurar un contacto íntimo entre el líquido y el vapor.

- Proporcionar una buena retención del líquido para favorecer la transferencia de materia
- Contar con suficiente área y espaciado para mantener el arrastre y la caída de presión en límites aceptables
- Tener suficiente área de bajante para que el líquido fluya de manera adecuada entre plato y plato.

En el apartado actual se diseñarán los platos perforados para que satisfagan los requerimientos mencionados de la mejor manera posible. Además, comentar que para que la operación sea satisfactoria empleando este tipo de dispositivos, los caudales de líquido y vapor deberán encontrarse entre cierto límites para evitar problemas como inundación o excesivo arrastre, Figura 29.

Anteriormente ya se calcularon o estimaron algunos de los parámetros que conciernen al diseño hidráulico del plato. La longitud del rebosadero y el diámetro del plato se calcularon y tienen un valor de 1,310 m y 1,722 m respectivamente. Conociéndolos es posible averiguar las dimensiones de otras zonas del plato. Mediante ellos y la Figura 28 se conocerán el ángulo subtendido por el borde del plato,  $\theta_c$ , y la altura del arco,  $l_h$ .

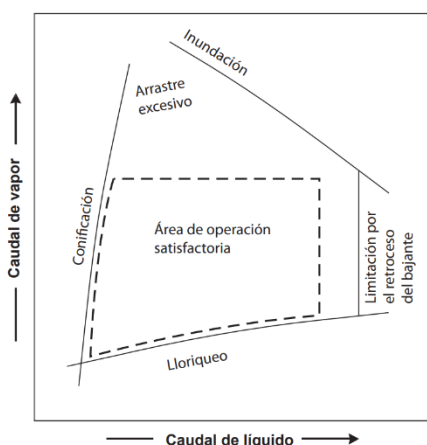


Figura 29. Diagrama de rendimiento de los platos (2)

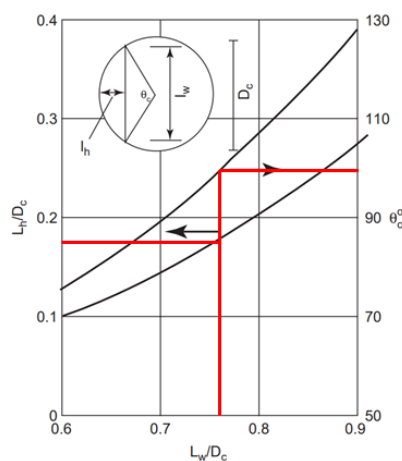


Figura 28. Relación entre el ángulo subtendido por el borde, la altura del borde y la longitud del borde (6)

En la Tabla 46 se reúnen los resultados de emplear la Figura 28.

Tabla 46. Datos de la Figura 28

Parámetro	$L_w/D_c$	$\theta_c$ (°)	$L_h/D_c$	$L_h$ (m)
Valor	0,76	100	0,18	0,31

Conociendo  $\theta_c$  se calcula el ángulo subtendido por el borde de la placa  $\theta_s$ , Ecuación 85.

$$\theta_s = 180 - \theta_c \quad [85]$$

Por su parte, los platos cuentan con un anillo que rodea la zona perforada del cual se puede tomar su ancho en 50mm,  $l_a$  (1). Con esto es posible proceder con el cálculo de la longitud media de los bordes sin perforar  $l_{np}$  y su área  $A_{np}$ , usando las Ecuaciones 86 y 87.

$$l_{np} = (D_c - l_a) \cdot \pi \cdot \frac{\theta_s}{180} \quad [86]$$

$$A_{np} = l_a \cdot l_{np} \quad [87]$$

Asimismo se calcula la longitud de la zona de calma  $l_{zc}$  y su área  $A_{zc}$ . Se aplican las Ecuaciones 88 y 89.

$$l_{zc} = l_w + l_a \quad [88]$$

$$A_{zc} = 2l_a \cdot (l_w - 2l_a) \quad [89]$$

Llegado este punto, es posible conocer el área disponible para las perforaciones empleando la Ecuación 90.

$$A_{dp} = A_a - A_{np} - A_{zc} \quad [90]$$

Conocido el área disponible para perforación, y el área perforada supuesta en el apartado 4.6 Construcción del plato, se calcula la distancia que tendrán las perforaciones de centro a centro,  $l_p$ . Esta dependerá de la disposición o *pitch* de los agujeros y la bibliografía (1) indica que no debe ser menor a 2 veces el diámetro de un agujero y que el rango habitual se encuentra entre 2,5 a 4 veces el diámetro de una perforación. La disposición suele ser cuadrada o triangular, pero la triangular es la más empleada por lo que será la seleccionada para este caso. La distancia  $l_p$  puede ser calculada haciendo uso de la Figura 30.

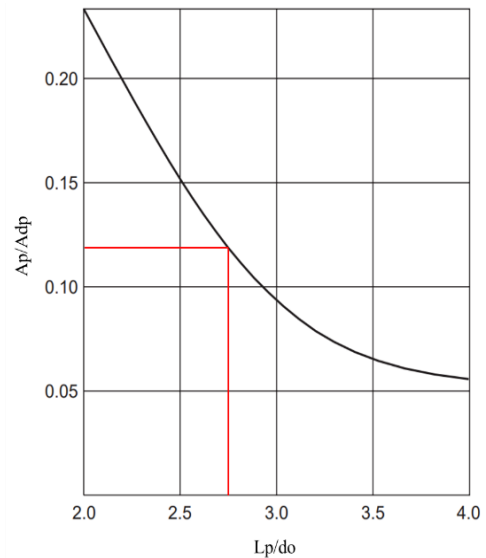


Figura 30. Relación entre el área del agujero y el pitch (2)

La relación área perforada con área disponible para perforación  $A_p/A_{dp}$  es igual a 0,12, por lo que la relación  $l_p/d_0$  es de 2,75, es decir, entra dentro del rango mencionado que recomienda la bibliografía consultada. A su vez, como se conoce el diámetro de las perforaciones, la distancia entre centros será de 13,75mm. Este resultado se obtiene mediante un método gráfico que siempre tiene una incertidumbre mayor que si se calculara analíticamente. Por ello se utilizará la Ecuación 91 para comprobar si el valor se considera válido.

$$\frac{A_p}{A_{dp}} = 0,9 \left[ \frac{d_0}{l_p} \right]^2 \quad [91]$$

Despejando la variable  $l_p$  de la Ecuación 91 se obtiene un valor de 14 mm. Como el error entre resultado gráfico y analítico es inferior al 2% se puede afirmar que el procedimiento gráfico es correcto. Por motivos de diseño y precisión se usará el *pitch* de 14 mm.

Para conocer el número de agujeros por plato se aplica la *Ecuaciones 92 y 93*.

$$N^{\circ}_{\text{agujeros}} = \frac{A_p}{A_{\text{agujero}}} ; A_{\text{agujero}} = \pi \cdot \frac{d_o^2}{4} \quad [92, 93]$$

Todos los resultados del diseño hidráulico del plato aparecen recogidos en la Tabla 47.

Tabla 47. Resultados del diseño hidráulico del plato

Parámetro	$\theta_s$ (°)	$l_{np}$ (m)	$A_{np}$ (m <sup>2</sup> )	$l_{zc}$ (m)	$A_{zc}$ (m <sup>2</sup> )	$A_{dp}$ (m <sup>2</sup> )	$l_p$ (mm)	$N^{\circ}_{\text{Agujeros}}$
Valor	80	2,33	0,12	1,36	0,12	1,53	14	9013

#### 4.12. Comprobación de la inundación y del arrastre

Hasta ahora el procedimiento seguido para el diseño fue el de prueba y error, en el que se suponían valores y más tarde se comprobaba si la suposición se puede dar por válida. Para el caso de la inundación, en el apartado 4.4. *Diámetro de la columna*, se supuso que la velocidad de inundación de operación  $u_v$  sería un 85% de la de diseño  $u_f$ . Se procede a evaluar si el porcentaje asumido se puede dar por válido o si en su caso se debe recalcular el diseño. Para ello se hace uso de las *Ecuaciones 94 y 95*.

$$\%_{\text{inundación}} = \frac{u_{v,real}}{u_f} ; u_{v,real} = \frac{Q_{v,max}}{A_n} \quad [94, 95]$$

Donde  $u_{h,real}$  es el valor real de la velocidad de inundación basada en el área neta del plato en m/s,  $A_n$  es el área neta ya conocida en m<sup>2</sup>,  $Q_{v,max}$  es el caudal volumétrico de vapor máximo en m<sup>3</sup>/s. En la Tabla 48, se muestra el resultado de aplicar las *Ecuaciones 94 y 95*.

Tabla 48. Resultados de comprobar la inundación

Parámetro	Enriquecimiento	Agotamiento
$u_{v,real}$ (m/s)	1,56	0,93
$u_f$ (m/s)	1,90	1,09
$Q_{v,max}$ (m <sup>3</sup> /s)	3,20	1,90
$\%_{\text{inundación}}$	82	85

El porcentaje de inundación supuesto había sido de del 85% y los nuevos valores calculados son de un 83% y un 85% para la zona de enriquecimiento y agotamiento respectivamente. Este valor debe ser menor o igual al supuesto, por lo que se da por válida la suposición y por ende los cálculos que los que depende. Mencionar que si el valor real está muy por debajo se podría traducir como un mal aprovechamiento del equipo, mientras que si está por encima la columna estaría sobre inundada lo que repercute en la operación y en la eficiencia.

Por el otro lado estaría el arrastre, que depende del porcentaje de inundación y del factor de flujo líquido-vapor. Ambas variables son conocidas, y junto con la Figura 31 se conoce el arrastre. En la Tabla 49 se presentarán los resultados.

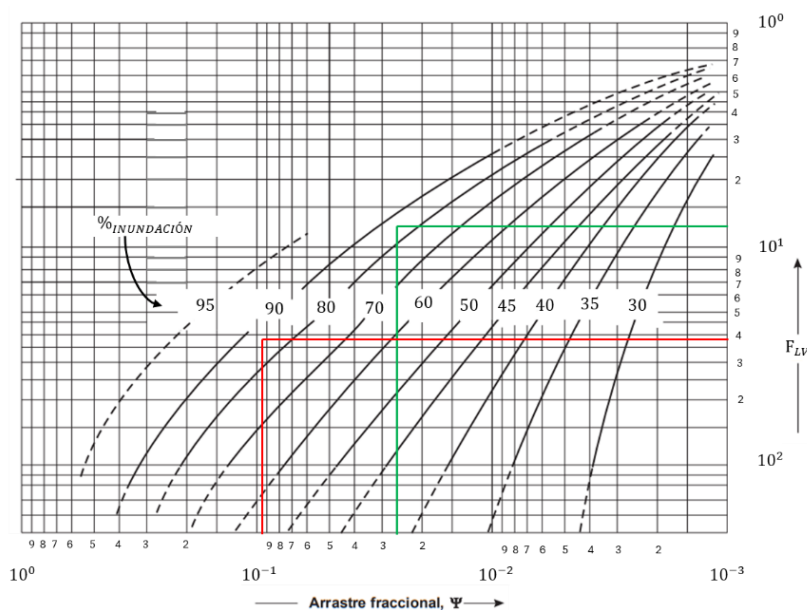


Figura 31. Gráfica para comprobar el arrastre (Adaptado de (2))

Tabla 49. Resultados de comprobar el arrastre

	<b>Enriquecimiento</b>	<b>Agotamiento</b>
$\Psi$	0,094	0,025

Los valores resultantes son admisibles por ser menores a 0,1, que es el máximo recomendado por la bibliografía. (1)

## 5. Diseño mecánico

El diseño mecánico de la columna de destilación T-202 se realiza en base al código de diseño *ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Sección V III, División 1*, ya que se diseña como un recipiente cilíndrico y vertical a presión.

En la *Parte A: Diseño mecánico* del presente *Anexo II: Cálculos Justificativos*, se explican los procedimientos y consideraciones a seguir para proceder con el diseño mecánico de equipos. Por ello, en este apartado se hará referencia a las Ecuaciones y Figuras empleadas anteriormente y se presentarán los resultados.

### 5.1. Selección del material de construcción

En el apartado 2. *Selección de material* de la Parte A, se indicaba que se aplica la metodología de Ashby para seleccionar el material de construcción.

En la Tabla 1 se presentaban los requerimientos a seguir para el diseño de recipientes de este tipo, y por los cuales se aplicaba el criterio de Vertido antes de ruptura (“*leak before break*”). La función del equipo es llevar a cabo la operación consiguiendo contener la presión de forma segura, por lo que se precisa de un material capaz de ello.

Los materiales que pueden satisfacer los requerimientos son aquellos que cuenten con la capacidad de absorber energía de rotura antes de sufrir una, es decir, materiales tenaces. Debido a esto se ve necesario maximizar el índice del material de la *Ecuación 1*. Por otra parte y como en todo, el factor económico juega un papel fundamental y cuanto menor sea el espesor de la carcasa del equipo, menor cantidad de material hay que usar en su construcción y a su vez, menor costo. Se buscarán materiales con elevado límite elástico que maximicen el índice de material de la *Ecuación 3*.

Con todo esto y empleando el Diagrama de Ashby de la Figura 1, se encuentra que los materiales que mejor satisfacen los requerimientos de diseño bajo el criterio establecido son los aceros de baja aleación y los aceros inoxidable.

En la Tabla 2 de la Parte A, se analizó la compatibilidad química de estos materiales en presencia de los compuestos presentes en el proceso. Se concluyó que los mejores materiales para la construcción de la columna de destilación eran el monel y el acero inoxidable 316.

La Tabla 3 presentaba las diferencias de precio por kilo de ambos materiales y la diferencia era notable. Por ende, se decide que el material de construcción del equipo será el acero inoxidable 316.

## 5.2. Temperatura de diseño

La temperatura de diseño se calcula aplicando la *Ecuación 6* de la Parte A del Anexo II, que resulta en la siguiente expresión.

$$T_d = 289,43 + 50 = 339,43 \text{ } ^\circ F = 170,79 \text{ } ^\circ C$$

289,43 °F (143,02 °C) corresponde con la temperatura máxima de operación en la columna, y se refleja en el apartado de Diseño riguroso mediante metodología MESH.

## 5.3. Presión de diseño

En este caso, para conocer la presión de diseño se hace uso de las *Ecuaciones 4 y 5* del Diseño mecánico. Los resultados para la presión máxima de operación de 1,69 bar, se muestran a continuación.

$$P_d = 1,72 + 1,69 = 3,41 \text{ bar}$$

$$P_d = 1,1 \cdot 1,69 = 1,86 \text{ bar}$$

Como  $3,41 > 1,86$ , la presión de diseño que se considera es la de 3,41 bar.

## 5.4. Espesor de la carcasa

Como se mencionó, se buscará el mínimo espesor de carcasa que logre satisfacer los requerimientos establecidos. El código ASME establece que como mínimo, sin tener en cuenta

el factor de corrección por corrosión, el espesor debe ser de 1,5 mm. Sabiendo esto, se aplican las Ecuaciones 7 y 8, con las que se calcula el espesor para tensión radial y longitudinal. Para su cálculo se necesitan conocer varios términos que se recogen a continuación.

El valor del esfuerzo máximo permisible S, se obtiene mediante la Figura 3 de la Parte A del Anexo II. Para la temperatura de diseño se obtiene un valor de S de 1044,32 bar.

Por su parte, también es necesario dar valor a la eficiencia de soldadura E. Esta depende del tipo de unión y del grado de examen radiográfico como bien se muestra en la Tabla 5 de la Parte A. Se decide que el tipo de unión será la de soldadura doble a tope por permitir realizar un examen radiográfico de categoría 100%. Es por esto que el valor de E será de 1.

En el diseño hidráulico se calculó el diámetro interno del recipiente y su valor es de 1,722 m, por lo que las expresiones de cálculo de espesor quedarían del siguiente modo.

$$t_{radial} = \frac{3,41 \cdot 1,722}{2 \cdot 1044,32 \cdot 1 - 1,2 \cdot 3,41} = 0,00282 \text{ m} = 2,82 \text{ mm} > 1,5 \text{ mm}$$

$$t_{longitudinal} = \frac{3,41 \cdot 1,722}{4 \cdot 1044,32 \cdot 1 - 0,8 \cdot 3,41} = 0,00141 \text{ m} = 1,41 \text{ mm} < 1,5 \text{ mm}$$

Como se aprecia en los resultados, el espesor calculado para tensión radial supera el mínimo establecido por el código de diseño. Sin embargo, para tensión longitudinal esto no sucede. Como se diseña el equipo para el mayor espesor, se continuará utilizando 2,82 mm.

El factor de corrección por corrosión se consideró de 4 mm, por los motivos ya mencionados en la Parte A. Por ende, el espesor de la carcasa después de la corrección queda en 6,82 mm. A pesar de que el código establezca el espesor mínimo en 1,5 mm, también indica una serie de espesores recomendados dependiendo del diámetro del recipiente. Estos aparecen reflejados en la Tabla 4 de la Parte A, y como siguiendo lo estipulado el espesor mínimo recomendado sería de 9 mm, que es superior a los 6,82 mm calculados. Con todo esto, se decide que el espesor de la carcasa de la columna de destilación T-202 será de 9 mm.

## 5.5. Cabezales

Los cabezales se colocan en los extremos de la columna y como se explicó en la Parte A de diseño mecánico existen diferentes tipos dependiendo de su forma. Para columnas de destilación que operan a una presión menor de 15 bar, como es el caso de la columna T-202, los más habituales son los torisféricos. Independientemente, se calcula el espesor mínimo para los cuatro tipos citados en la primera parte del Anexo II. Los resultados se tabulan a continuación (la corrección se ha hecho en base al espesor mínimo según código de 1,5mm, y añadiendo el factor de corrosión de 4mm):

Tabla 50. Resultados de los cálculos de cabezales

Tipo de cabezal	t (m)	t (mm)	t <sub>corregida</sub> (mm)
Hemisférico	0,00141	1,41	5,41
Elíptico	0,00282	2,82	6,82
Toriférico	0,00500	5,00	9,00
Plano	0,05395	53,95	57,95

Entre los resultados resalta el elevado espesor del cabezal plano, es por ello que se decide descartarlo, pues su construcción supone una elevada cantidad de material. Entre los tres restantes, pese a ser el de mayor espesor, se decide seleccionar el toriférico debido a ser el recomendado para presiones bajas y porque su proceso de fabricación no conlleva un costo tan elevado como lo suponen el elíptico y el hemisférico. (1)

Según el código de diseño ASME, las dimensiones de este tipo de cabezal, Figura 32, se pueden calcular siguiendo las Ecuaciones 96-99.

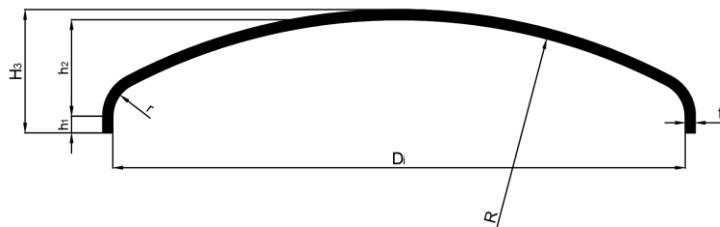


Figura 32. Cabezal toriférico (Elaboración propia adaptado de (13))

$$R = D_i + 2 \cdot t \quad [96] \quad h_2 = R - \sqrt{(R - r)^2 - \left(\frac{D_i}{2 - r}\right)^2} \quad [98]$$

$$r = 0,06 \cdot R \quad [97] \quad H_3 = h_2 + h_1 + t \quad [99]$$

Donde:

- Di: Diámetro interno
- t: Espesor
- R y r: Radio esférico y de reborde interior respectivamente
- h<sub>1</sub> y h<sub>2</sub>: Pestaña cuyo valor se toma de 50 mm y flecha respectivamente
- H<sub>3</sub>: Altura total exterior

Los resultados de aplicar las Ecuaciones 96-99 se presentan en la Tabla 51:

Tabla 51. Dimensiones del cabezal toriférico

Parámetro	R	r	h <sub>1</sub>	h <sub>2</sub>	H <sub>3</sub>
Valor (m)	1,740	0,104	0,050	0,290	0,349

## 5.6. Altura de la columna

Conociendo el número de platos de la columna de destilación, junto con el espaciado entre ellos y su espesor, es posible conocer la altura de la columna sin cabezales usando la Ecuación 100.

$$H_1 = (N_{etapas} - 1) \cdot (I_t + t_{plato}) = 70 \cdot (0,5 + 0,003) = 35,21 \text{ m} \quad [100]$$

Además entre cuerpo y cabezales se necesita dejar una separación para asegurar un nivel de líquido en colas y evitar el arrastre de líquido en cabezas. Según heurísticas (3), este espaciado dependerá del diámetro de la torre. Por lo que para una de 1,722 m, la altura entre cabezales y cuerpo es de 2,30 m en cabezas  $L_{cabeza}$ , y 3,44 m para colas,  $L_{cola}$ .

$$H_2 = L_{cabezas} + L_{colas} = 2,30 + 3,44 = 5,74 \text{ m} \quad [101]$$

Por último, faltaría añadir la altura correspondiente a los cabezales superior e inferior. En la Tabla 51 se mostraba el valor de la altura  $H_3$ , y con la *Ecuación 102* se calcula la altura total de la columna  $H$ .

$$H = H_1 + H_2 + 2 \cdot H_3 = 35,21 + 5,74 + 2 \cdot 0,349 = 41,65 \text{ m} \quad [102]$$

La altura total de la columna de destilación T-202 sería entonces de 41,65 metros. Las heurísticas (3) indican que las columnas de destilación no deben superar los 53 metros debido a las cargas por viento y a las consideraciones de cimentación. Adicionalmente, indica que la relación altura/diámetro debe tener un valor entre 20 y 30. Se comprueba con la *Ecuación 103*.

$$\frac{H}{D} = \frac{41,65}{1,722} = 24,19 \quad ; \quad 20 < 24,19 < 30 \quad [103]$$

### 5.7. Aislante térmico

La temperatura de operación tiene un valor próximo a los 200 °C, lo que supone un riesgo de seguridad a considerar. Por ello, y para evitar pérdidas de calor que puedan afectar a la operación, se instalará un aislante que cubra la superficie del cuerpo de la columna de destilación.

Se supondrá una temperatura ambiente de 20 °C para los cálculos que conciernen al aislante. Por su parte, se precisa conocer el material aislante, debido a que un parámetro clave para calcular el espesor de este es la conductividad térmica. Después de evaluar las diferentes opciones de varias marcas comerciales, se decide optar por el aislante *Rock wool* de la compañía ROCKWOOL FRANCE S.A.S.. La conductividad térmica de este es de 0,034 W/(m·K). (14)

Los diferentes radios desde el centro de la columna se muestran en la Figura 33 y sus respectivos valores en la Tabla 52.

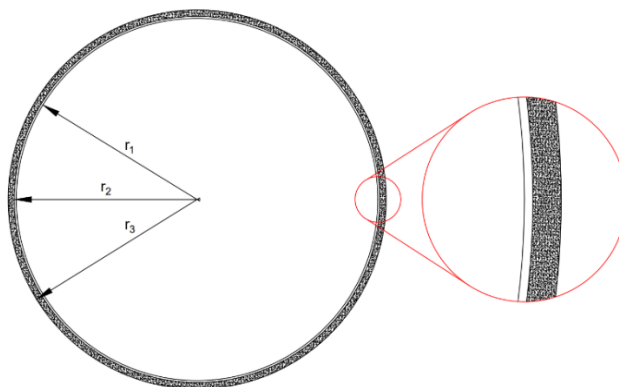


Figura 33. Esquema con los diferentes radios de la columna de destilación (Elaboración propia)

Tabla 52. Valores de los radios

Radios	r1	r2	r3
Valor	0,861	0,870	0,900

Para el cálculo se propone un circuito térmico, Figura 34, donde se muestran las resistencias presentes en el sistema. La primera de ellas corresponde a la conducción por la pared de acero inoxidable 316 de la carcasa de la columna, después la conducción por el aislante y finalmente la convección generada por el viento.

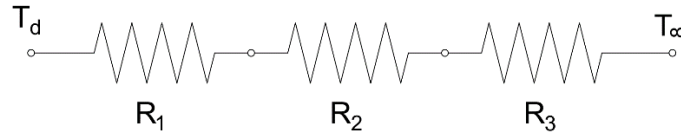


Figura 34. Circuito térmico desde el interior de la columna hasta el exterior (Elaboración propia)

$$R_1 = \frac{\ln(r_2/r_1)}{k_{acero316}2\pi H} \quad R_2 = \frac{\ln(r_3/r_2)}{k_{aislante}2\pi H} \quad R_3 = \frac{1}{h_\infty 2\pi r_3 H} \quad [104], [105] \text{ y } [106]$$

Por su parte, la resistencia total se calcula como la suma de las tres, *Ecuación 107*.

$$R_{total} = R_1 + R_2 + R_3 \quad [107]$$

Además, el calor intercambiado con el exterior se calcula según la *Ecuación 108*.

$$Q(W) = \frac{T_d - T_\infty}{R_{total}} \quad [108]$$

La conductividad térmica del acero inoxidable 316 es 17,22 W/(m·K), la altura de la columna H en metros y el coeficiente de convección h<sub>∞</sub>, W/(m<sup>2</sup>·K), en se calcula utilizando la *Ecuación 109*.

$$h_\infty = \frac{Nu \cdot k_{aire}}{D_{ext.}} \quad [109]$$

Donde k<sub>aire</sub> es la conductividad térmica del aire con un valor de 0,0263 W/(m·K), D<sub>ext</sub> es el diámetro interno en m y Nu es el número de Nusselt calculado con la correlación de Churchill y Bernstein, *Ecuación 110*. Esta solo se cumple si el producto entre el número de Prandtl Pr, *Ecuación 111*, y el número de Reynolds Re<sub>D</sub>, *Ecuación 112*, es superior a 0,2. (15)

$$Nu_D = 0,3 + \frac{0,62 \cdot Re_D^{1/2} \cdot Pr^{1/3}}{\left(1 + \left(\frac{0,4}{Pr}\right)^{2/3}\right)^{1/4}} \cdot \left(1 + \left(\frac{Re_D}{282000}\right)\right)^{4/5} \quad [110]$$

$$Pr = \left(\frac{Cp \cdot \mu}{k}\right)_{aire} \quad [111]$$

$$Re_D = \left(\frac{\rho \cdot v \cdot D_{ext}}{\mu}\right)_{aire} \quad [112]$$

Los resultados de empelar las ecuaciones mencionadas en el presente apartado se recogen en la Tabla 53. Se asume que la velocidad del viento es de 11,11 m/s, que equivale a los 40 km/h tomados como valor máximo en la zona de la planta. (16)

Tabla 53. Datos para el cálculo del aislante

$\rho_{\text{aire}}$ (kg/m <sup>3</sup> )	$C_{p,\text{aire}}$ (kJ/kg·K)	$\mu_{\text{aire}}$ (Pa·s)	$k_{\text{aire}}$ (W/(m·K))	Pr	Re <sub>D</sub>	Re <sub>D</sub> ·Pr	$h_{\infty}$ (W/(m <sup>2</sup> ·K))	Nu
1,16	1007,00	$1,85 \cdot 10^{-5}$	$2,63 \cdot 10^{-2}$	0,71	$1,25 \cdot 10^6$	$8,88 \cdot 10^5$	21,84	1494,54

Con esto ya es posible conocer los valores del sistema de resistencias. Aplicando las correspondientes ecuaciones de dicho sistema se obtienen los valores recogidos en la Tabla 54.

Tabla 54. Resultados del aislante térmico

$T_{\text{max}}$ (°C)	$T_{\text{inf}}$ (°C)	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>t</sub>	Q (W)
170,79	20,00	$2,31 \cdot 10^{-6}$	$3,81 \cdot 10^{-3}$	$1,94 \cdot 10^{-4}$	$4,01 \cdot 10^{-3}$	37630,40

Se ha probado con diferentes espesores de aislante para analizar que tanto porcentaje de pérdidas de calor hacia el exterior se consigue reducir. Cabe destacar que la heurística consultada (3) establece que el espesor óptimo de aislante para equipos que operen hasta 200 °C es de 24,5 mm. Sin embargo, bajo condiciones de aire superiores a los 12,1 km/h, como es el caso, se debe aumentar entre un 10-20% dicho espesor. Por otro lado, la casa comercial mencionada cuenta con diferentes espesores que varían entre 30 y 220 mm. En la gráfica de la Figura 35 se representan las pérdidas de calor hacia el exterior frente al espesor del aislante.

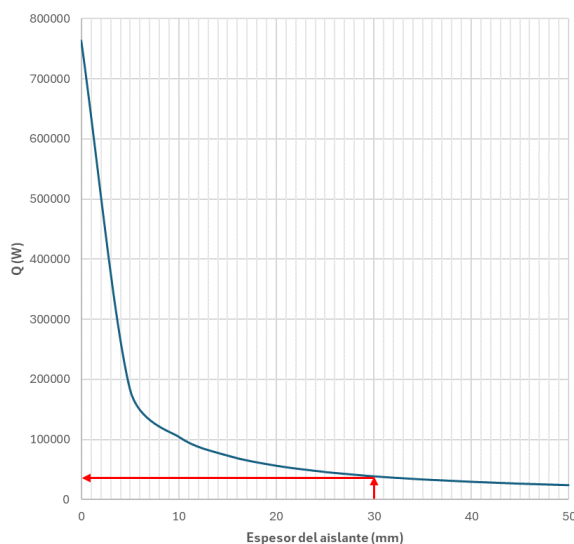


Figura 35. Calor intercambiado con el exterior frente a diferentes espesores de aislante térmico

Como se observa en la Figura 35, inicialmente la pérdida de calor era de casi 800kW, pero empleando 30 mm de espesor de aislante se consiguen reducir considerablemente las pérdidas, concretamente en un 95% hasta aproximadamente 40kW. Por lo que se selecciona este espesor para el aislante térmico de la torre T-202.

## 5.8. Cargas

Como se comentó en la primera parte del presente Anexo, son varias las cargas que deben ser consideradas en el diseño de equipos de este calibre. La principal carga es el propio peso del recipiente  $W_v$ , que se calcula la *Ecuación 13* de la Parte A. Otra carga a considerar es la del peso de los internos de la columna, en este caso los platos que se calculan haciendo uso de la *Ecuación 113*.

$$W_{\text{platos}}(N) = 1,2 \cdot \pi \cdot \frac{D_i^2}{4} \cdot N_{\text{etapas}} \quad [113]$$

La siguiente carga que se considera es la del peso del aislante, que se calcula con las *Ecuaciones 114 y 115*.

$$W_{\text{aislante}}(N) = V_{\text{aislante}} \cdot (2 \cdot \rho_{\text{aislante}}) \cdot g \quad [114]$$

$$V_{\text{aislante}}(m^3) = \pi \cdot H_2 \cdot (r_3^2 - r_2^2) \quad [115]$$

La densidad del aislante es de  $100 \text{ kg/m}^3$  (17) y la zona que se pretende cubrir con él es la altura entre tangentes de la columna, es decir,  $H_2$ . Cabe destacar que la densidad del aislante se toma como el doble a la real debido a que el aislante está expuesto a la atmósfera, y corre riesgo de captar humedad, y al sellado entre aislante y columna.

Finalmente, se asumirá una carga de prueba hidráulica  $W_{ph}$ , la cual consiste en estimar el peso de la columna de destilación si estuviera completamente llena de agua. Se calcula utilizando la *Ecuación 116*.

$$W_{ph}(N) = \pi \cdot \frac{D_i^2}{4} \cdot H_2 \cdot \rho_{\text{agua}} \cdot g \quad [116]$$

Con todo esto, la carga total a la que está sometida la torre T-202 se estima como la suma de las calculadas individualmente. En la Tabla 55 se muestran todos los resultados.

Tabla 55. Valores de las cargas de la columna de destilación T-202

Cargas	$W_v$	$W_p$	$W_a$	$W_{ph}$	$W_{\text{total}}$
Valor (N)	186533,44	195630,00	13402,85	935576,04	1331142,33

- **Carga por viento**

Para equipos de altura considerable como es la columna de destilación T-202 con cerca de los 50 metros, es crucial considerar esta carga. En la *Parte A: Diseño mecánico del Anexo II* aparecen recogidas todas las ecuaciones (*Ecuaciones 15-19*) que se emplearán para su cálculo. En la Tabla 56 se muestran los resultados.

Tabla 56. Resultados de carga por viento

Parametro	$U_w$	$P_w$	Def	$W$	$x$	$M_x$
	km/h	N/m <sup>2</sup>	m	N/m	m	N·m
Valor	100	500	1,80	900	45,30	923396,30

Como fue mencionado en la Parte A, para el cálculo de la carga por viento se toma la altura de la columna desde el suelo, por lo que se ha tenido en cuenta la altura del soporte, de la columna entre tangentes y la del cabezal superior, en total toma el valor de 45,30 m de la Tabla 56. Toda la información relacionada con el soporte se tratará en el apartado 5.11 *Soporte*.

### 5.9. Análisis de esfuerzos y tensiones

El equipo debe ser diseñado para soportar la peor combinación de cargas en cualquier punto del mismo, por ende se lleva a cabo el análisis de esfuerzos y tensiones.

Lo primero será calcular los esfuerzos primarios debidos a la presión interna del recipiente, es decir, esfuerzos radial  $\sigma_r$  y longitudinal  $\sigma_l$  mediante las Ecuaciones 20 y 21 de la Parte A respectivamente.

$$\sigma_r = \frac{(3,41 \cdot 10^5) \cdot 1,722}{2 \cdot 0,009} = 32684421 \frac{N}{m^2}$$

$$\sigma_l = \frac{(3,41 \cdot 10^5) \cdot 1,722}{4 \cdot 0,009} = 16342211 \frac{N}{m^2}$$

Seguidamente se calcula el esfuerzo directo  $\sigma_w$ , debido al propio peso de la columna. Su valor es negativo debido a que se trata de un esfuerzo de compresión y se calcula con la Ecuación 22 de la parte de diseño mecánico.

$$\sigma_w = \frac{-1331142,33}{\pi \cdot (1,722 + 0,009) \cdot 0,009} = -27197880 \frac{N}{m^2}$$

Como último tipo de esfuerzo primario se encontrarían los de flexión  $\sigma_b$ , provocados por las cargas de viento debidas a la altura de la columna. Su valor será positivo si se trata de un esfuerzo extensivo o negativo si compresivo, y se calcula unificando las Ecuaciones 23 y 24.

$$\sigma_b = \pm \frac{923396,30}{\left(\frac{\pi}{64} \cdot ((1,722 + 2 \cdot 0,009)^4 - 1,722^4)\right)} \cdot \left(\frac{1,722}{2} + 0,009\right) = \pm 43822994 \frac{N}{m^2}$$

Conocidos los valores de los esfuerzos primarios se calculan los esfuerzos principales se pueden calcular mediante las Ecuaciones 25-28 de la Parte A.

Estos esfuerzos principales dependen del esfuerzo radial y longitudinal total  $\sigma_z$ , el primero ya fue calculado y el segundo se puede dar a conocer de la siguiente manera.

$$\sigma_z = 16342211 - 27197879,51 + 43822993,99 = 32967325 \frac{N}{m^2}$$

$$\sigma_z = 16342211 - 27197879,51 - 43822993,99 = -54678663 \frac{N}{m^2}$$

Ahora ya es posible calcular los esfuerzos principales  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  y  $\sigma_3$ . Los resultados se recogen en la Tabla 57.

Tabla 57. Valores de los esfuerzos principales

(N/m <sup>2</sup> )	+σ <sub>b</sub>	-σ <sub>b</sub>
σ <sub>1</sub>	32967325	32684421
σ <sub>2</sub>	32684421	-54678663
σ <sub>3</sub>		-170825

En consonancia con lo mencionado, el máximo esfuerzo permisible en cualquier punto del recipiente será aquel cuyo resultado sea el mayor de aplicar las Ecuaciones 29,30 y 31 de la Parte A: Diseño mecánico. Para el cálculo del espesor de la carcasa y de los cabezales se seleccionó un esfuerzo máximo permisible S, el cual debe ser mayor a calculados con las ecuaciones mencionadas en este párrafo, pues en caso contrario se debe recalcularse el espesor. Los resultados se muestran a continuación en la Tabla 58.

Tabla 58. Comprobación de esfuerzo máximo permisible

(N/m <sup>2</sup> )	+σ <sub>b</sub>	-σ <sub>b</sub>	(N/mm <sup>2</sup> )	+σ <sub>b</sub>	-σ <sub>b</sub>
σ <sub>1</sub> - σ <sub>2</sub>	282904	87363084	σ <sub>1</sub> - σ <sub>2</sub>	0,28	87,36
σ <sub>1</sub> - σ <sub>3</sub>	33138149	32855246	σ <sub>1</sub> - σ <sub>3</sub>	33,14	32,86
σ <sub>2</sub> - σ <sub>3</sub>	32855246	-54507839	σ <sub>2</sub> - σ <sub>3</sub>	32,86	-54,51
S	104432099		S	104,43	

Como se aprecia, ningún resultado de esfuerzo máximo permisible es superior al seleccionado inicialmente, por lo que a priori se podría dar por válido el espesor de diseño.

Por último, como el esfuerzo axial resultante es compresivo, es decir, negativo, puede producirse pandeo debido a inestabilidad elástica, por ende se comprueba que el esfuerzo máximo de compresión (σ<sub>w</sub> + σ<sub>b</sub>) sea menor al esfuerzo crítico de compresión σ<sub>c</sub>, pues si esta condición se cumple no se provocaría pandeo. Se usan las Ecuaciones 32 y 33 de la Parte A.

$$\sigma_c = 2 \cdot 10^4 \cdot \left( \frac{0,009}{1,722 + 2 \cdot 0,009} \right) = 103448276 \frac{N}{m^2} = 103,45 \frac{N}{mm^2}$$

$$\sigma_w + \sigma_b = 27197880 + 43822994 = 16625114 \frac{N}{m^2} = 16,63 \frac{N}{mm^2}$$

Se cumple la restricción, por lo que a priori no debería haber pandeo y se puede concluir que el diseño es satisfactorio.

## 5.10. Aberturas y conexiones

La columna de destilación T-202 contará principalmente con cinco aberturas. Tres de ellas para corrientes de entrada, una para introducir la alimentación, y las otras dos para la corriente de reflujo y la corriente de vapor que ingresa al equipo por colas. Por otro lado, consta de una boquilla para la salida del líquido por colas y otra para la de vapor por cabezas.

En el apartado 3.7 de la Parte A de diseño mecánico se explicaba la necesidad de contar con compensaciones de tipo asiento soldado en las aberturas y que para su cálculo se aplicaba el

‘método de áreas iguales’. En este caso, la compensación en todas las aperturas será de 9 mm por ser el espesor tanto de la carcasa como de los cabezales.

Además de los orificios mencionados, se deben tener en cuenta la abertura para la válvula de alivio colocada en la parte superior, las destinadas a poder instalar los sistemas de control del sistema y las bocas de hombre, las cuales

### 5.11. Soporte

En la *Parte A: Diseño Mecánico* ya se adelantaba que se selecciona una falda recta de acero inoxidable 316 como soporte de la columna de destilación. Además, la falda contará con una altura de 4 metros, dentro del rango recomendado por las heurísticas de entre 3 a 5 m, lo que hace que la torre tenga una altura total desde el suelo de 45,30 metros, todavía menor a los 53 m que establecen las heurísticas como máximo. (3)

Sabiendo esto, se procede a calcular el espesor de la falda, que como es evidente, debe ser capaz de soportar las tensiones que se crean sobre él. Con las *Ecuaciones 35-38* de la *Parte A* se calculan los esfuerzos de tensión y compresión. Cabe destacar que para aplicar dichas ecuaciones se debe suponer un valor inicial de espesor y comprobar si se cumple las *Ecuaciones 39 y 40*. En caso de no ser válido, se seguirá el proceso iterativo hasta encontrar el espesor mínimo que satisfaga las restricciones. Se comenzó probando con el espesor mínimo de soporte recomendado por la bibliografía (1), 6 mm, como no satisfacía las *Ecuaciones 39 y 40* se iteró hasta que llegar a los 7,2 mm, valor mínimo con el que sí ocurría. Sin embargo, por el principio de prevención se considera un sobredimensionamiento de 4mm, lo que quedaría en un espesor de 11,2 mm que se aproxima a los 12 mm por razones de diseño. En la *Tabla 59* se recogen los resultados y en la *60* se comprueban las restricciones.

Tabla 59. Espesor mínimo de soporte

$t_{sk,min}$ bibliográfico = 6,0 mm				
$D_s$ (m)	$\sigma_{bs}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{ws}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{tensión}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{compresión}$ (N/mm <sup>2</sup> )
1,722	65,85	40,87	24,98	106,72
$t_{sk,min} = 7,2$ mm				
$D_s$ (m)	$\sigma_{bs}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{ws}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{tensión}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{compresión}$ (N/mm <sup>2</sup> )
1,722	54,84	34,03	20,81	88,87
$t_{sk,real} = 12,0$ mm				
$D_s$ (m)	$\sigma_{bs}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{ws}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{tensión}$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{compresión}$ (N/mm <sup>2</sup> )
1,722	32,81	20,36	12,45	53,18

Tabla 60. Comprobación de restricciones de soporte

$t_{sk}$ (mm)	$\sigma_{tensión} < S E \text{ sen}\theta$ (N/mm <sup>2</sup> )	$\sigma_{compresión} < 0,125 \cdot E_Y \cdot \left(\frac{t_{sk}}{D_s}\right) \cdot \text{sen}\theta$ (N/mm <sup>2</sup> )
6,0	24,98 < 93,36	106,72 > 75,15
7,2	20,81 < 93,36	88,87 < 90,18
12,0	12,45 < 93,36	53,18 < 150,30

A modo resumen, se selecciona un soporte tipo falda recta de 4 m de altura para la columna de destilación T-202, pues se ha comprobado que este tipo de soporte con un espesor de 12 mm es capaz de soportar las tensiones generadas. Por otro lado, mencionar que debido a la gran altura del equipo, será necesaria la instalación de una estructura alrededor de toda su longitud, que asegure mayor estabilidad y mejor accesibilidad al personal de mantenimiento.

## 6. Válvula de alivio

En el apartado de aperturas y conexiones se mencionó que una de ellas iría destinada a instalar una válvula de alivio, PSV-229, para garantizar la seguridad del equipo y de la planta en caso de sobrepresiones. Su diseño y dimensionamiento se llevará a cabo utilizando la normativa API RP 520: *Sizing, Selection, and Installation of Pressure-Relieving Devices in Refineries*. (18)

Se diseña una válvula de alivio para corrientes en fase vapor que se colocará en el cabezal superior, pues por ese lugar es por donde abandona la corriente en fase gas  $V_1$  el equipo. Lo primero será comprobar si se trabaja en condiciones de flujo crítico calculando la relación de presión de flujo crítico con la *Ecuación 117*.

$$\frac{P_{cf}}{P_1} = \left[ \frac{2}{k+1} \right]^{\frac{k}{k-1}} \quad [117]$$

Donde  $P_{cf}$  es la presión crítica del flujo a través de la boquilla,  $P_1$  es la presión de entrada a la válvula que se calcula con la *Ecuación 118* con la presión de diseño y la atmosférica, y  $k$  es la relación de calores específicos para cualquier gas ideal,  $C_p/C_v$ , y se ha obtenido mediante la simulación en *Aspen HYSYS*.

$$P_1 = P_d \cdot 1,1 + P_{atm} \quad [118]$$

Los resultados de aplicar las *Ecuaciones 116* y *117* se presentan en la Tabla 61. La conclusión a la que se llega es que efectivamente se trata de un sistema de flujo crítico por ser  $P_{cf}$  mayor que la presión atmosférica.

Tabla 61. Presiones relacionadas con la válvula de alivio

$P_d$ (bar)	$P_1$ (bar)	$k$	$P_{cf}$ (bar)
3,416	4,771	1,104	2,786

El código estipula que para el cálculo del área de descarga de válvulas de flujo crítico se emplea la *Ecuación 119*. (18)

$$A_d = \frac{13160 \cdot W}{C \cdot K_d \cdot P_1 \cdot K_b \cdot K_c} \cdot \sqrt{\frac{T \cdot Z}{M_M}} \quad [119]$$

En la *Ecuación 119*,  $W$  es el flujo másico en kg/h que atravesará la válvula, que en este caso se diseña para un caudal igual al de la corriente  $V_1$ . En su caso,  $C$  es un coeficiente que se calcula mediante la *Ecuación 120*,  $K_d$  es el coeficiente de efectividad de descarga que tendrá un

valor de 0,975 cuando se instalan válvulas de alivio y 0,62 para discos de rotura. Otro término es  $K_b$ , un factor de corrección de capacidad que para válvulas convencionales no aplica por lo que su valor es 1. Por su parte,  $K_c$  es otro factor de corrección para válvulas de alivio con disco de rotura, y como esta válvula no cuenta con ese tipo de dispositivo el valor será igual a la unidad. Por último T es la temperatura de la corriente en K, Z es un factor de compresibilidad de vapor que indica la desviación de la idealidad y M la masa molar de la mezcla en kg/kmol.

$$C = 520 \cdot \sqrt{k \cdot \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k+1}{k-1}}} \quad [120]$$

Los datos y resultados se tabulan en la Tabla 62.

Tabla 62. Datos y resultados del cálculo del dimensionamiento de la válvula de alivio

W (kg/h)	C	Kd	Kb	Kc	P1 (bar)	T (K)	Z	M <sub>M</sub> (kg/kmol)	Ad (mm <sup>2</sup> )
22785,53	327,18	0,975	1	1	4,77	444,08	1	69,86	4967,14

Una vez conocido el área de descarga es momento de seleccionar un dispositivo de alivio con un área igual o mayor al calculado. En la Figura 36 se presenta el catálogo de válvulas cargadas por resorte de Crosby, y como ninguna válvula cuenta con un área efectiva igual a la calculada, se seleccionan las de 7129 mm<sup>2</sup>, en concreto la tipo JOS/JBS por emplearse específicamente para corrientes de gas y vapor. (19)

Orifice Designation and Effective Area Sq. In. (Sq. mm)	Series BP Fixed Blowdown Balanced Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Liquid 3/4" x 1", 1" x 1"	Style JOS, JBS Closed Bonnet Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam 1 D 2 to 8 T <sub>2</sub> , 10	Style JLT-JOS/JBS Closed Bonnet Pressure Relief Valve Liquid 1 D 1 to 8 T <sub>2</sub> , 10	Style JOS-H Open Bonnet Pressure Relief Valve Steam 1 D 2 to 8 T <sub>2</sub> , 10	Style JOUB Closed Bonnet Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam 10 V 14 to 20 BB, 24	Series 800 Adjustable Blowdown Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam 3/4" x 1" to 1-1/2" x 2-1/2"	Series 900 OMNI-TRIM Fixed Blowdown Pressure Relief Valve Gas, Vapor, Steam, Liquid 1/2" x 1" to 1-1/2" x 2-1/2"
-	0.074 (47.7)	*					*
D	0.110 (71.0)	*	*	*	*	*	*
E	0.196 (126)		*	*	*	*	*
F	0.307 (198)		*	*	*	*	*
G	0.503 (325)		*	*	*	*	*
H	0.785 (506)		*	*	*		
J	1.287 (830)		*	*	*		
K	1.838 (1186)		*	*	*		
L	2.853 (1841)		*	*	*		
M	3.600 (2323)		*	*	*		
N	4.340 (2800)		*	*	*		
P	6.379 (4116)		*	*	*		
Q	11.05 (7129)		*	*	*		
R	16.00 (10323)		*	*	*		
T	26.00 (16774)		*	*	*		
T <sub>2</sub>	27.87 (17982)		*	*	*		
V	42.19 (27219)					*	
W	60.75 (39193)					*	
Y	82.68 (53342)					*	
Z	90.95 (58677)					*	
Z <sub>2</sub>	108.86 (70232)					*	
AA	136.69 (88187)					*	
BB	168.74 (108864)					*	
BB <sub>2</sub>	185.00 (119355)					*	
Crosby Catalog No.		310	310	310	307	902	902

Figura 36. Selección del tipo de válvula de alivio

## 7. Hoja de especificaciones de la columna de destilación

<i>Planta de producción de anhídrido acético por carbonilación de acetato de metilo</i>			
<b>COLUMNA DE DESTILACIÓN DE PLATOS</b>			
Nombre del equipo		Columna de destilación	
Etiqueta del equipo		T-202	
Código de diseño		ASME BPV Sección VIII Div. 1	
Diámetro máximo (incluido aislante)	mm	1800	
Altura total (desde el suelo)	m	45,30	
<b>DATOS DEL PROCESO</b>			
Número de etapas de equilibrio		71 (70 platos + caldera)	
Enriquecimiento	Caudal de vapor máximo	kg/s	6,33
	Caudal de líquido máximo	kg/s	5,23
	Temperatura de operación	°C	124,34
	Presión de operación	bar	1,01
	Densidad de la mezcla vapor	kg/m <sup>3</sup>	1,98
	Densidad de la mezcla líquida	kg/m <sup>3</sup>	921,69
	Tensión superficial	N/m	0,017
Agotamiento	Caudal de vapor máximo	kg/s	9,71
	Caudal de líquido máximo	kg/s	13,21
	Temperatura de operación	°C	143,02
	Presión de operación	bar	1,69
	Densidad de la mezcla vapor	kg/m <sup>3</sup>	5,10
	Densidad de la mezcla líquida	kg/m <sup>3</sup>	932,39
	Tensión superficial	N/m	0,019
Alimentación	Caudal	kg/h	16569,27
	Temperatura de operación	°C	136,05
	Presión de operación	bar	1,15
<b>CONSTRUCCIÓN Y MATERIALES</b>			
Material del recipiente		Acero inoxidable 316	
Diámetro interno del recipiente	mm	1722	
Diámetro externo del recipiente (sin aislante)	mm	1740	
Altura de la carcasa cilíndrica	m	40,95	
Altura del equipo con cabezales incluidos	m	41,65	
Temperatura de diseño del recipiente	°C	170,79	
Presión de diseño del recipiente	bar	3,41	
Número de platos		70	
Tipo de plato		Perforado	
Material de los platos		Acero inoxidable 316	
Número de perforaciones por plato		9013	
Diámetro de las perforaciones	mm	5,00	
<i>Pitch</i> de las perforaciones	mm	14,00	
Espesor del plato	mm	3,00	
Espaciado entre platos	m	0,50	
Longitud del rebosadero	m	1,31	
Altura del rebosadero	mm	40,00	
Caída de presión por plato	bar	9,81 · 10 <sup>-3</sup>	
Caída de presión total en el recipiente	bar	0,68	
Carga total del equipo	N	1331142,33	
<b>NOTAS</b>			
<ul style="list-style-type: none"> <li>• La columna cuenta con dos cabezales toriesféricos en las partes superior e inferior.</li> <li>• Se emplea como aislante 30 mm de lana de roca, que rodean la zona entre tangentes.</li> <li>• El soporte del equipo es de tipo falda recta y tiene una altura de 4 m.</li> </ul>			

## 8. Bibliografía

1. **COULSON, J. M., SINNOTT, R. T. y RICHARDSON, J. F.** *Chemical Engineering*. Oxford : Pergamon Press, 1983. Vol. 6. ISBN 0-08-022969-7.
2. **SINNOTT, R. K. y TOWLER, G.** *Diseño en Ingeniería Química*. 5ª ed. Barcelona : Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
3. **TURTON, R., y otros.** *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 3º ed. Boston : Pearson Education, Inc., 2009. ISBN 978-0-13-512966-1.
4. **KIRK, R. E. y OTHMER, D. F.** *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*. 4ª ed. New York : John Wiley & sons, 1991. Vol. 1. ISBN 0-471-52669-X .
5. **GERHARTZ, W. y ULLMANN, F.** *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 5ª ed. Deerfield Beach : Advisory Board, 1985. Vol. A1. ISBN 0-89573-151-7.
6. **SINNOTT, R. K.** *Chemical Engineering Design*. 4ª ed. Oxford : Coulson & Richardson's, 2005. ISBN 0-7506-6538-6.
7. **SMITH, J. M., VAN NESS, H. C. y ABBOTT, M. M.** *Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química*. 7ª ed. Ciudad de México : McGraw-Hill Interamerica, 2007. ISBN 0-07-310445-0.
8. **POLING, B., PRAUNSNITZ, J. y O'CONNELL, J.** *The properties of Gases and Liquids*. New York : McGraw Hill, 2001. ISBN 0071499997.
9. *Solid-Liquid Equilibrium for Binary Systems Containing Carboxylic Acids and Acetic Anhydride Obtained by Differential Scanning Calorimetry*. **HE, J., y otros.** 2020, Journal of Chemical & Engineering data, págs. 532-539.
10. *Vapor-Liquid Equilibria for Eight Binary Mixtures*. **HOWARD, J. E.** 1, Wilmington : Journal of Chemical and Engineering Data, Enero de 1962, Vol. 7. ISSN 0021-9568.
11. **P. C., WANKAT.** *Ingeniería de procesos de separación*. 2ª ed. s.l. : PEARSON Education, 2008. pág. 768. ISBN 978-970-26.
12. **GREEN, D. W. y SOUTHARD, M.** *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 9ª ed. New York : McGraw-Hill Education, 2019. ISBN 978-0-07-183409-4.
13. **FONDEYUR.** Fondeyur. [En línea] [Citado el: 20 de Mayo de 2024.] <https://fondoyur.com/fondos/fondo-flanged-dished-asm/>.

14. **ACERMI**. Association pour la CERTification des Matériaux Isolants. [En línea] 8 de Febrero de 2024. [Citado el: 3 de Junio de 2024.] <https://www.acermi.com/en/certified-insulation-products/certificate/20-015-1483/#resistances-simple>.

15. **INCROPERA, FRANK P., y otros**. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. s.l. : John Wiley & Sons, 2007. 978-0-471-45728-2.

16. **METEOBLUE**. Meteoblue. [En línea] [Citado el: 3 de Marzo de 2024.] [https://www.meteoblue.com/es/tiempo/historyclimate/climatemodelled/tarragona\\_espa%c3%b1a\\_3108288](https://www.meteoblue.com/es/tiempo/historyclimate/climatemodelled/tarragona_espa%c3%b1a_3108288).

17. **ROCKWOOL TECHNICAL INSULATION**. Rockwool. *ProRox® PS 960*. [En línea] 4 de Abril de 2018. [Citado el: 30 de Abril de 2024.] <https://rti.rockwool.com/products/industrial/prorox-ps-960/>.

18. **AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE**. Sizing, Selection, and Installation of Pressure-Relieving Devices in Refineries. *Part I-Sizing and Selection*. [En línea] [Citado el: 12 de Junio de 2024.] [https://www.usb.ac.ir/FileStaff/5658\\_2018-10-22-13-55-26.pdf](https://www.usb.ac.ir/FileStaff/5658_2018-10-22-13-55-26.pdf).

19. **CROSBY VALVE INC**. *Crosby® Pressure Relief Valve Engineering Handbook*. Estados Unidos : s.n., 1997. Technical Document No. TP-V300.

---

**PARTE D:**  
**Dimensionamiento  
básico de los equipos**

---

## Índice

1.	Introducción.....	1
2.	Bombas.....	1
2.1.	Bomba P-101 A/B.....	1
2.2.	Bomba P-102 A/B.....	2
2.3.	Bomba P-203 A/B.....	3
2.4.	Bomba P-204 A/B.....	3
3.	Compresores.....	4
3.1.	Compresor C-101.....	4
4.	Intercambiadores de calor.....	5
4.1.	Intercambiadores de calor sin cambio de fase.....	7
4.2.	Evaporador parcial.....	7
4.3.	Calderas.....	9
4.4.	Condensadores.....	10
5.	Válvulas.....	12
5.1.	Válvula VLV-201.....	12
5.2.	Válvula VLV-202.....	12
5.3.	Válvula VLV-203.....	13
6.	Tanques.....	13
6.1.	Tanque de mezcla TM-101.....	13
6.2.	Separador flash V-201.....	15
7.	Columna de destilación.....	16
8.	Tuberías.....	18
9.	Bibliografía.....	20

## 1. Introducción

Para llevar a cabo la realización del presupuesto de la planta de producción de anhídrido acético es necesario conocer determinados parámetros característicos para cada uno de los equipos utilizados. A continuación, se procederá a la realización de un dimensionado básico de las válvulas, compresores, intercambiadores, bombas, columnas y tanques utilizados en la planta. Cabe destacar, que no se llevará a cabo el dimensionamiento para el reactor R-101 y para la columna de destilación T-202, ya que ya han sido diseñados en detalle en el *Anexo II. Cálculos justificativos*.

## 2. Bombas

Las bombas son dispositivos empleados para transportar líquidos a través de las tuberías y equipos del proceso. Las bombas se dividen en dos grupos principales: centrífugas y de desplazamiento positivo. Las primeras son las más empleadas en la industria, a excepción de en algunos casos concretos.

### 2.1. Bomba P-101 A/B

El trabajo que ha de ser suministrado a la bomba se calculó en el *Anexo I. Balances de materia y energía*. A partir de ese dato se puede calcular la carga total,  $h_w$  (m), que necesita la bomba mediante la *Ecuación 1*. Utilizando este parámetro y el caudal volumétrico que entra a la bomba se pueden determinar las características del rodete del dispositivo así como la eficiencia.

$$h_w = W/g \quad [1]$$

Tras plantear distintas posibilidades se ha seleccionado el modelo NPE/ 3ST de la empresa *Hidrotécnica Nacional de Monterrey* de tamaño 1½ x 2 -6. La bomba seleccionada utiliza un rodete de 5¾ pulgadas y tendrá una eficiencia del 54%. Las características de la bomba se muestran en la Tabla 1 y se han obtenido a partir de la curva característica de la misma en la Figura 1. (1)

Tabla 1. Características de la bomba P-101 A/B

Bomba P-101 A/B	
Modelo	NPE / 3ST
Tamaño	1½ x 2 -6
Diámetro de rodete (in)	5¾
Velocidad (rpm)	2900
Frecuencia (Hz)	50
W (J/kg)	202,32
Carga total (m)	20,64
Caudal volumétrico (m³/h)	9,87

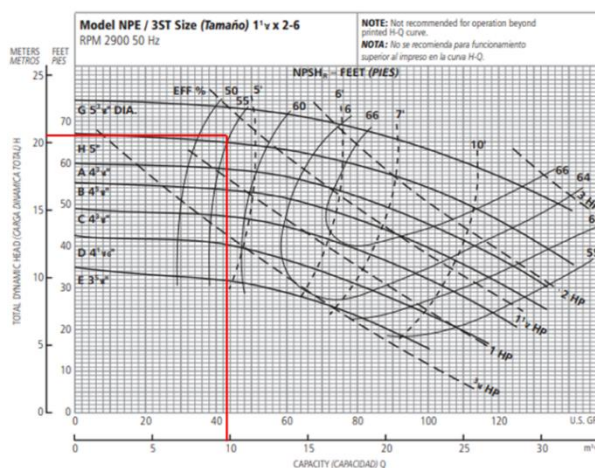


Figura 1. Curva característica de P-101 A/B (1)

Mediante la eficiencia se calcula la potencia que debe suministrar que es de 0,95 kW, los cálculos utilizados fueron explicados en el *Anexo I. Balances de materia y energía*.

## 2.2. Bomba P-102 A/B

En el caso de esta bomba, la presión de salida deseada no puede ser alcanzada con una centrífuga de una única etapa, por lo que se ha escogido una bomba centrífuga multietapa. Se ha decidido seleccionar el modelo Multitec 50 3.1 1.4408 de la empresa *KSB*, que tiene unas revoluciones de 2900 rpm y un diámetro del rodete de 170 mm. (2)

Para este tipo de bombas, dependiendo del caudal y de la carga total necesaria, se selecciona el número de etapas que se debe tener. Los datos de la bomba P-102 A/B se muestran en la Tabla 2 y el número de etapas se decide mediante la Figura 2.

Tabla 2. Características de la bomba P-102 A/B

W (kJ/kg)	Carga total (m)	Caudal volumétrico (m <sup>3</sup> /h)	Número de etapas
4,36	444,61	25,08	13

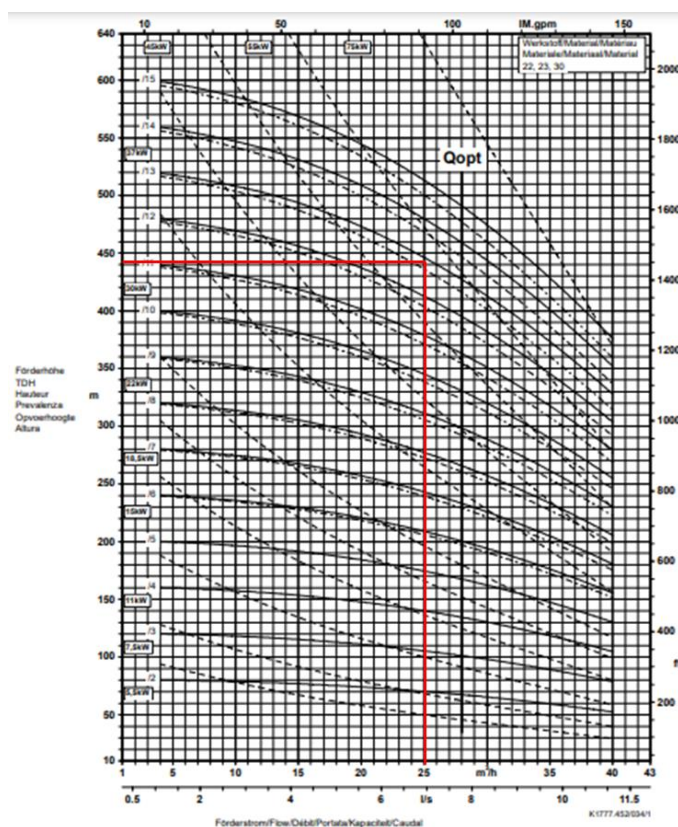


Figura 2. Curva característica de la bomba multietapa P-102 (2)

Finalmente se determina la eficiencia mediante la Figura 3, cuyo eje vertical representa la carga total entre el número total de etapas que puede tener la bomba, en este caso 15. Se obtiene que tiene una eficiencia del 62 %.

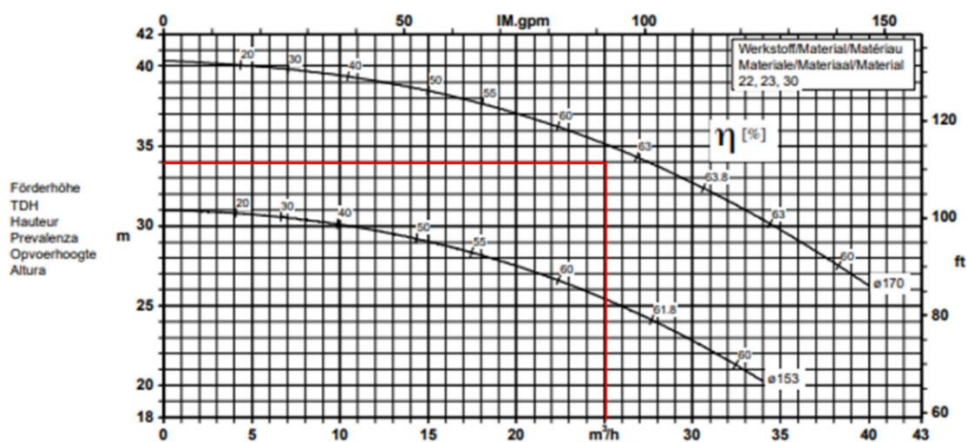


Figura 3. Curva característica para la eficiencia de la bomba P-102 (2)

Mediante esta eficiencia se calcula la potencia que debe suministrar que es de 55,45 kW.

### 2.3. Bomba P-203 A/B

Para la bomba de recirculación P-203 A/B se ha escogido el modelo NPE / 1ST de la empresa *Hidrotécnica Nacional de Monterrey* de tamaño 1 x 1¼ -6. La bomba seleccionada utiliza un rodete de 5 3/16 pulgadas y tendrá una eficiencia de 51,3 %. Las características de la bomba se muestran en la Tabla 3 y se han obtenido a partir de la curva característica de la misma, Figura 4. (1)

Tabla 3. Características de la bomba P-203 A/B

Bomba P-203 A/B	
Modelo	NPE / 1ST
Tamaño	1 x 1¼ -6
Diámetro de rodete (in)	5 3/16
Velocidad (rpm)	2900
Frecuencia (Hz)	50
W (J/kg)	159,95
Carga total (m)	16,32
Caudal volumétrico (m³/h)	7,27

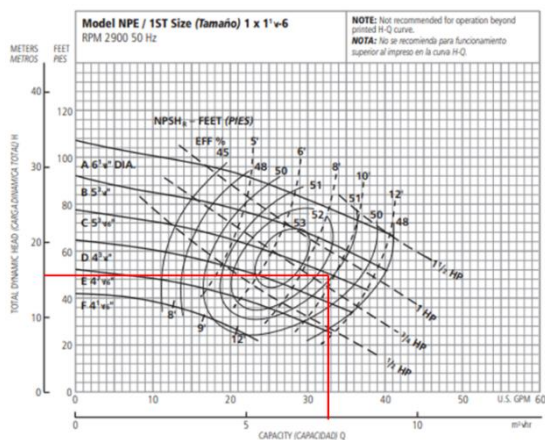


Figura 4. Curva característica de la bomba P-203 A/B (1)

Finalmente, a partir de la eficiencia se obtiene una potencia de 1,01 kW.

### 2.4. Bomba P-204 A/B

Para esta bomba se ha seleccionado el mismo modelo que para la bomba P-203 A/B, pero en este caso se emplea una velocidad y una frecuencia distinta. La bomba seleccionada utiliza un rodete de 5 ¾ pulgadas y tendrá una eficiencia de 47 %. Las características de la bomba se muestran en la Tabla 4 y se han obtenido a partir de la curva característica de la misma en la Figura 5. (1)

Tabla 4. Características de la bomba P-204 A/B

Bomba P-204 A/B	
Modelo	NPE / 1ST
Tamaño	1 x 1 1/4 -6
Diámetro de rodete (in)	5 3/4
Velocidad (rpm)	3500
Frecuencia (Hz)	60
W (J/kg)	354,83
Carga total (m)	36,21
Caudal volumétrico (m <sup>3</sup> /h)	4,21

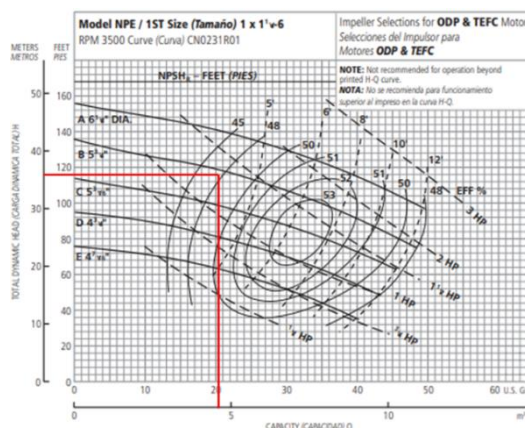


Figura 5. Curva característica de P-204 A/B (1)

Empleando la eficiencia se determina que la potencia es de 0,83 kW.

### 3. Compresores

Para el transporte de gases se ha optado por la utilización de compresores, debido a los caudales que se tratan y las presiones a las que se trabaja.

En la industria se trabaja principalmente con tres tipos de compresores: centrífugos, de pistón y de flujo axial. Los primeros se emplean para caudales elevados y para diferencias de presión elevadas, los segundos permiten trabajar en un amplio rango de presiones y caudales y los últimos se emplean para caudales altos y presiones diferenciales moderadas. Cabe destacar que se prefiere seleccionar los compresores de pistón frente a los centrífugos sólo cuando se trabaja con presiones elevadas y caudales bajos.

En la Tabla 5 se muestran los rangos de aplicación de estos compresores.

Tabla 5. Franjas de aplicación de distintos compresores (3)

Tipo	Caudal máximo (m <sup>3</sup> /h)	Presión diferencial-Etapa simple (bar)
Centrífugos	170.000	-
De pistón	85.000	3,5
De flujo axial	170.000	3,5

#### 3.1. Compresor C-101

El compresor C-101 se emplea para la recirculación de la corriente gas que sale del reactor R-101. Se emplea para aumentar la corriente 11 de 48,13 bar a 51,06 bar. Las características de la corriente a la entrada se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6. Condiciones del compresor C-101

	Caudal volumétrico (m <sup>3</sup> /h)	Presión diferencial (bar)	Razón de compresión
Corriente 11	115,97	2,93	1,06

Como se observa se tiene un caudal volumétrico y una presión diferencial que no supera ningunos de los parámetros indicados en la Tabla 5 para todos los compresores. Por esa razón, se seleccionará un compresor de pistón (reciprocante) ya que es el indicado para operar con caudales bajos.

Un parámetro fundamental de los compresores es la eficiencia, que se puede estimar gráficamente mediante la Figura 6. El valor se encuentra fuera del rango, por lo que se ha extrapolado. La eficiencia isoentrópica es aproximadamente del 63 %.

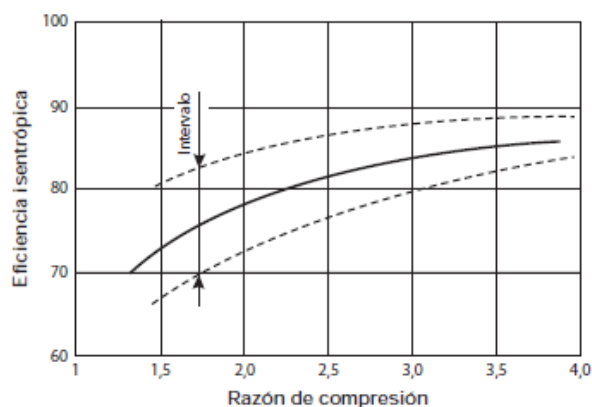


Figura 6. Eficiencia de los compresores de pistón (3)

Mediante este valor se puede determinar la potencia del compresor, que ha sido determinada en el Anexo I. *Balances de materia y energía* y se ha obtenido que se requiere una potencia de 13,39 kW.

#### 4. Intercambiadores de calor

En el Anexo I. *Balances de materia y energía* se determinó la cantidad de calor que es necesario aportar o retirar en cada uno de estos equipos y las temperaturas de entrada y salida del fluido y del fluido de servicio. Con esos datos se puede calcular el área de transferencia de materia,  $A_t$ , utilizando la Ecuación 2.

$$Q = U \cdot A_t \cdot \Delta T_m \quad [2]$$

Siendo  $Q$  el calor intercambiado en W,  $U$  el coeficiente global de transferencia de calor en  $W/(m^2 \cdot ^\circ C)$  y  $\Delta T_m$  la diferencia de temperatura promedio en  $^\circ C$ .

El valor del coeficiente global de transferencia de calor puede ser estimado de distintas formas dependiendo del tipo de fluido que se quiere calentar o enfriar y del tipo de fluido de servicio. En este caso, se tomarán valores medios de rangos dados por bibliografía para distintos sistemas de intercambio de calor. Se indican en la Tabla 7.

Tabla 7. Coeficientes globales de transferencia de calor (Elaboración propia a partir de (3))

Sistema	Fluido caliente	Fluido frío	U (W/(m <sup>2</sup> ·K))	U <sub>medio</sub> (W/(m <sup>2</sup> ·K))
<b>Calentador</b>	Vapor de agua	Disolventes orgánicos	500-1000	750
	Vapor de agua	Gases	30-300	165
<b>Enfriador</b>	Disolventes orgánicos	Agua	250-750	500
<b>Evaporador</b>	Vapor de agua	Orgánicos ligeros	900-1200	1050
<b>Condensador</b>	Vapores orgánicos	Agua	700-1000	850

La obtención del  $\Delta T_m$  depende de si se trabaja en un intercambiador de calor de doble tubo o en un intercambiador de calor de carcasa y tubo. Para intercambiadores de doble tubo con flujo en contracorriente la diferencia de temperatura promedio es igual a la temperatura media logarítmica,  $\Delta T_{ml}$ , que se calcula con las temperaturas terminales de los fluidos del intercambiador utilizando la *Ecuación 3*.

$$\Delta T_m = \Delta T_{ml} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \left( \frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1} \right)} \quad [3]$$

Siendo  $T_1$  la temperatura de entrada del fluido caliente (°C o K),  $T_2$  la temperatura de salida del fluido caliente (°C o K),  $t_1$  la temperatura de entrada del fluido frío (°C o K) y  $t_2$  la temperatura de salida del fluido frío (°C o K).

En cambio, para intercambiadores de carcasa y tubo con flujo en contracorriente, el  $\Delta T_m$  se determina multiplicando la temperatura media logarítmica por un factor de corrección,  $F_t$ , para tener en cuenta las desviaciones que se tengan de un flujo contracorriente ideal. Se determina con la *Ecuación 4*.

$$\Delta T_m = F_t \cdot \Delta T_{ml} \quad [4]$$

Para determinar ese factor de corrección se emplean dos relaciones adimensionales que se indican en la *Ecuación 5* y en la *Ecuación 6* y se lee el valor obtenido en la Figura 7. Cabe destacar que, cuando se produce un cambio de fase en uno de los dos fluidos que intervienen, el factor de corrección es igual a la unidad.

$$R = \frac{(T_1 - T_2)}{(t_2 - t_1)} \quad ; \quad S = \frac{(t_2 - t_1)}{(T_1 - t_1)} \quad [5, 6]$$

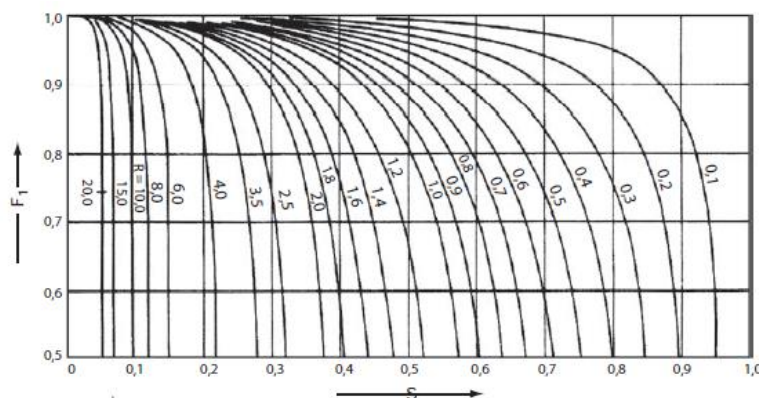


Figura 7. Factor de corrección para un intercambiador de carcasa y tubos con un paso por carcasa (3)

Para este factor se consideran deseables valores superiores o iguales a 0,85. En caso de que los valores no sean superiores a 0,75 se escogerá un intercambiador con otro número de pasos. En estos casos, se utiliza la Figura 8 para intercambiadores de carcasa y tubo con dos pasos por carcasa.

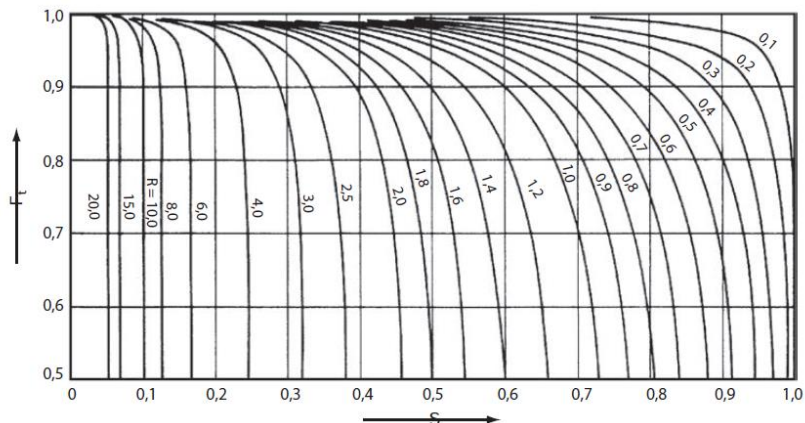


Figura 8. Factor de corrección para un intercambiador de carcasa y tubos con dos pasos por carcasa (3)

#### 4.1. Intercambiadores de calor sin cambio de fase

En este apartado se realizan los cálculos explicados anteriormente para aquellos intercambiadores del sistema donde no suceda un cambio de fase. Los datos empleados y los resultados obtenidos para el área de transferencia de calor se indican en la Tabla 8.

Tabla 8. Área de transferencia de calor de los intercambiadores sin cambio de fase

	Q (kW)	T <sub>1</sub> (°C)	T <sub>2</sub> (°C)	t <sub>1</sub> (°C)	t <sub>2</sub> (°C)	R	S	F	U (W/(m <sup>2</sup> ·K))	ΔT <sub>ml</sub> (m)	A <sub>t</sub> (m <sup>2</sup> )
E-101	1464,72	185,00	162,00	65,64	175,00	0,21	0,92	0,92	750,00	38,12	55,69
E-102	140,91	185,00	162,00	108,53	175,00	0,14	0,87	0,97	165	30,10	29,25
E-207	78,96	154,80	117,00	26,00	45,00	-	-	-	500,00	100,11	1,58
E-208	850,00	143,02	27,00	26,00	45,00	6,11	0,16	0,99	500,00	21,16	81,16

#### 4.2. Evaporador parcial

El intercambiador de calor E-201 se utiliza para evaporar y aumentar la temperatura de la corriente líquido/vapor que va a entrar al separador V-201. Su objetivo es calentar la mezcla de 134,95 °C a 154,80 °C.

Para el cálculo del área necesaria se tendrá que dividir la transferencia de calor en dos etapas. La primera etapa se corresponde al calor empleado para aumentar la temperatura de la mezcla líquido/vapor hasta su temperatura de ebullición y la segunda etapa se corresponde al calor utilizado en evaporar parte del líquido. Esto se muestra de manera detallada en la Figura 9.

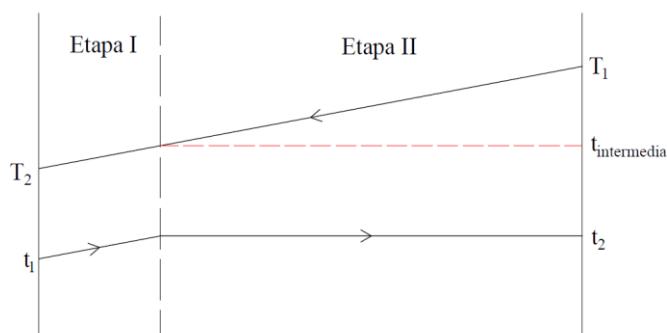


Figura 9. Diagrama de temperaturas (Elaboración propia)

El calor de la primera etapa se calculará sumando los calores correspondientes al aumento de temperatura para el vapor, para el líquido que no se evapora y para el líquido que se evapora. Es decir, se emplea la Ecuación 7.

$$Q_I = m_{14} \cdot \psi_{v_{14}} \cdot C_{p,v} \cdot (T_{15} - T_{14}) + m_{14} \cdot (1 - \psi_{v_{14}}) \cdot C_{p,l} \cdot (T_{15} - T_{14}) \quad [7]$$

Donde  $\psi_{v_{14}}$  se corresponde con la fracción másica de vapor en la corriente 14,  $C_{p,v}$  con el calor específico del vapor (kJ/(kg·K)) y  $C_{p,l}$  con el calor específico del líquido (kJ/(kg·K)).

El valor de esta calor y los datos empleados se muestran en la Tabla 9.

Tabla 9. Determinación del calor transferido en la Etapa I del evaporador

$m_{14}$ (kg/h)	$\psi_{v_{14}}$	$C_{p,v}$ (kJ/(kg·K))	$T_{14}$ (°C)	$T_{15}$ (°C)	$C_{p,l}$ (kJ/(kg·K))	$Q_I$ (kW)
31829,60	0,27	0,92	134,95	154,80	2,03	304,21

Posteriormente será necesario calcular la temperatura media logarítmica de la etapa. Para ello será necesario determinar la correspondiente temperatura del vapor cuando empieza la etapa de evaporación, temperatura que se indica como  $t_{intermedia}$  en la Figura 9. Para calcular esta temperatura se llevará a cabo un balance de energía a la primera etapa respecto al vapor de media presión, Ecuación 8. La cantidad de fluido calefactor,  $m_{mps}$ , fue calculada en el Anexo I. *Balances de materia y energía.*

$$Q_I = m_{mps} \cdot C_{pmps} \cdot (t_{intermedia} - T_2) \quad [8]$$

En la Tabla 10 se indica los datos empleados así como los resultados obtenidos para el área de transferencia de calor de la primera etapa.

Tabla 10. Área de transferencia de la Etapa I del intercambiador E-202

$m_{mps}$ (kg/s)	$C_{pmps}$ (kJ/(kg·K))	$t_{intermedia}$ (°C)	$T_2$ (°C)	$t_1$ (°C)	$t_2$ (°C)	R	S	F	U (W/(m <sup>2</sup> ·K))	$\Delta T_{ml}$ (m)	$A_I$ (m <sup>2</sup> )
34,43	3,02	164,92	162,00	134,95	154,80	0,15	0,66	0,98	750,00	17,22	24,03

Para la segunda etapa, el calor se calcula según la *Ecuación 9*.

$$Q_{II} = m_{15} \cdot (1 - \psi_{v_{14}} - \psi_{l_{15}}) \cdot \lambda \quad [9]$$

Donde  $\psi_{v_{14}}$  se corresponde con la fracción másica de vapor en la corriente 14,  $\psi_{l_{15}}$  con la fracción másica de líquido en la corriente 15 y  $\lambda$  con el calor de vaporización másico (kJ/kg).

A continuación, se determina la diferencia de temperatura promedio en esta etapa haciendo uso de la temperatura intermedia del vapor de media presión calculada con la *Ecuación 8*.

El resultado del área obtenida y los datos empleados para su determinación se muestran en la Tabla 11. Finalmente, se calcula el área total, sumando el área de la primera etapa y la segunda, y se aplicara un factor de corrección del 10%, ya que al ser un flujo bifásico los coeficientes de calor estimados pueden no ser del todo correctos.

Tabla 11. Área de la etapa de vaporización y área de transferencia de calor final del intercambiador E-201

$\psi_{l_{16}}$	$\lambda$ (kJ/kg)	$Q_{II}$ (kW)	$T_1$ (°C)	$t_{intermedia}$ (°C)	$t_1 = t_2$ (°C)	$U$ (W/(m <sup>2</sup> ·K))	$\Delta T_{ml}$ (m)	$A_{II}$ (m <sup>2</sup> )	$A_{total}$ (m <sup>2</sup> )	$A_{final}$ (m <sup>2</sup> )
0,11	383,11	2090,84	185,00	164,92	154,80	1050,00	18,37	108,42	132,45	145,70

### 4.3. Calderas

Las calderas E-204 y E-206 se emplean para aumentar la temperatura y evaporar parte de las corrientes de colas de las columnas de destilación. Esto se hace con el fin de volver a introducir parte de la mezcla al equipo en fase vapor, favoreciendo el contacto entre fases.

Para determinar el área de transferencia se emplea la misma metodología que para el evaporador parcial, siguiendo lo indicado en la Figura 9. Por tanto, el calor en la primera etapa se determina empleando la *Ecuación 10* y el calor de la segunda etapa se determina empleando la *Ecuación 11*. Mencionar que el índice L hacer referencia a la corriente líquida que sale por colas en la torre y V a la corriente vapor que entra por colas a la torre.

$$Q_I = m_L \cdot \overline{C_p} \cdot (t_2 - t_1) \quad ; \quad Q_{II} = m_V \cdot \lambda_{vaporización} \quad [10, 11]$$

A continuación, se determina la temperatura intermedia del vapor de media presión indicada en la Figura 9, necesaria para calcular la diferencia de temperatura promedio en cada etapa. Se emplea para ello la *Ecuación 8*, donde las cantidades de vapor de media presión correspondientes a cada equipo se han obtenido en el *Anexo I. Balances de materia y energía*.

Tras determinar la  $\Delta T_m$  correspondiente para cada etapa, ya se puede determinar el área de transferencia de calor en cada una de ellas y, mediante su suma, el área total.

En la Tabla 12 se indican los resultados del calor de la primera etapa y de la temperatura intermedia del vapor.

Tabla 12. Calor aportado en la primera etapa

	$m_L$ (kg/h)	$C_p$ (kJ/(kg·K))	$t_2$ (°C)	$t_1$ (°C)	$Q_I$ (kW)	$m_{mps}$ (kg/s)	$C_{pmps}$ (kJ/(kg·K))	$t_{intermedia}$ (°C)	$T_2$ (°C)
<b>E-204</b>	50022,63	1,32	136,05	133,65	38,79	59,51	3,02	162,22	162,00
<b>E-206</b>	35430,43	1,33	142,99	143,02	0,35	36,06	3,02	162,003	162,000

A continuación se indica el área de transferencia de calor de la primera etapa, Tabla 13.

Tabla 13. Área de transferencia de la Etapa I de ambas calderas

	$t_{intermedia}$ (°C)	$T_2$ (°C)	$t_1$ (°C)	$t_2$ (°C)	$R$	$S$	$F$	$U$ (W/(m <sup>2</sup> ·K))	$\Delta T_{ml}$ (m)	$A_I$ (m <sup>2</sup> )
<b>E-204</b>	162,22	162,00	133,65	135,76	0,10	0,07	1	750,00	27,39	1,89
<b>E-206</b>	162,003	162,000	142,99	143,02	0,12	0,00	1	750,00	19,00	0,02

Por último en la Tabla 14 se presenta el calor aportado y el área de transferencia de la segunda etapa. Asimismo, se indica el área total.

Tabla 14. Área de la etapa de vaporización y área de transferencia de calor final de las calderas

	$m_v$ (kg/h)	$\lambda$ (kJ/kg)	$Q_{II}$ (kW)	$T_1$ (°C)	$t_{intermedia}$ (°C)	$t_1 = t_2$ (°C)	$U$ (W/(m <sup>2</sup> ·K))	$\Delta T_{ml}$ (m)	$A_{II}$ (m <sup>2</sup> )	$A_{total}$ (m <sup>2</sup> )
<b>E-204</b>	36672,92	402,58	4101,01	185,00	162,22	135,76	1050	36,67	106,51	108,39
<b>E-206</b>	22804,05	395,95	2507,61	185,00	162,003	143,02	1050	28,98	82,40	82,43

#### 4.4. Condensadores

El intercambiador de calor E-202 se emplea para condensar la corriente 18 para que entre a la torre de destilación T-201 como líquido saturado. Su objetivo es enfriar la mezcla de 154,80 °C hasta su temperatura de ebullición, 78,47 °C, y condensar completamente el vapor de entrada.

Por otro lado, los condensadores E-203 y E-205 de las torres de destilación se emplean para condensar completamente la corriente de vapor que abandona el equipo por cabezas.

Para el cálculo del área necesaria se tendrá que dividir la transferencia de calor en dos etapas. La primera etapa se corresponde al calor empleado para disminuir la temperatura del vapor hasta su temperatura de ebullición y la segunda etapa se corresponde al calor utilizado en condensar completamente el vapor. Esto se muestra de manera detallada en la Figura 10.

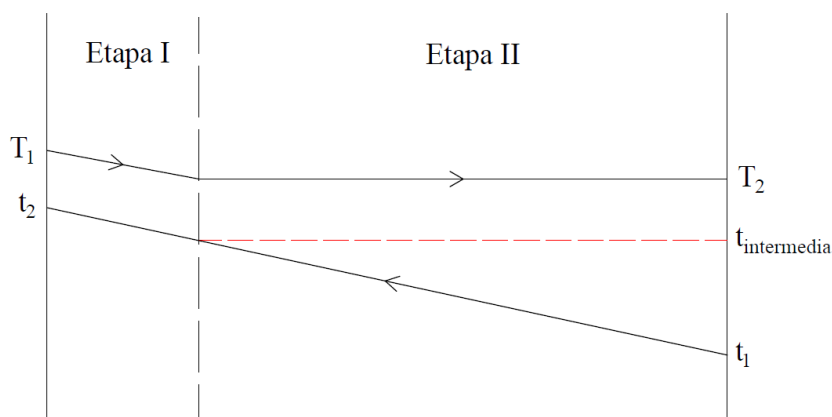


Figura 10. Diagrama de temperaturas en condensador (Elaboración propia)

Por tanto el calor de la primera etapa se calcula mediante la Ecuación 12 y el calor de la segunda etapa mediante la Ecuación 13.

$$Q_I = m_i \cdot C_p \cdot (T_1 - T_2) \quad ; \quad Q_{II} = m_i \cdot \lambda_{\text{vaporización}} \quad [12, 13]$$

Posteriormente será necesario calcular la temperatura media logarítmica de ambas etapas. Para ello será necesario determinar la correspondiente temperatura del fluido refrigerante cuando empieza la etapa de condensación, temperatura que se indica como  $t_{\text{intermedia}}$  en la Figura 10. Para calcular esta temperatura se llevará a cabo un balance de energía a la primera etapa respecto al agua de refrigeración, Ecuación 14. La cantidad de *cooling water*,  $m_{\text{cw}}$ , fue calculada en el Anexo I. Balances de materia y energía para cada uno de los equipos.

$$Q_I = m_{\text{cw}} \cdot C_{p_{\text{cw}}} \cdot (t_2 - t_{\text{intermedia}}) \quad [14]$$

Tras obtener este valor ya se pueden calcular las temperatura medias logarítmicas de cada una de las etapas como se explicó con la Ecuación 3. Ahora ya se puede obtener el área para cada etapa y, sumándolas, obtener la total.

En la Tabla 15 se indican los resultados del calor de la primera etapa y de la temperatura intermedia del agua de refrigeración.

Tabla 15. Calor retirado en la primera etapa

	<b>m</b> (kg/h)	<b>C<sub>p</sub></b> (kJ/(kg·K))	<b>T<sub>2</sub></b> (°C)	<b>T<sub>1</sub></b> (°C)	<b>Q<sub>I</sub></b> (kW)	<b>m<sub>cw</sub></b> (kg/s)	<b>C<sub>pcw</sub></b> (kJ/(kg·K))	<b>t<sub>intermedia</sub></b> (°C)	<b>t<sub>2</sub></b> (°C)
<b>E-202</b>	28229,50	0,81	78,47	154,80	481,85	46,30	4,18	42,51	45,00
<b>E-203</b>	46641,42	0,74	46,37	49,05	25,56	41,99	4,18	44,85	45,00
<b>E-205</b>	22785,53	1,55	124,34	126,04	16,64	31,78	4,18	44,87	45,00

A continuación se indica el área de transferencia de calor de la primera etapa, Tabla 16.

Tabla 16. Área de transferencia de la Etapa I de los condensadores

	$t_{intermedia}$ (°C)	$t_2$ (°C)	$T_1$ (°C)	$T_2$ (°C)	R	S	F	U (W/(m <sup>2</sup> ·K))	$\Delta T_{ml}$ (m)	$A_I$ (m <sup>2</sup> )
<b>E-202</b>	42,51	45,00	154,80	78,47	30,66	0,02	1,00	500,00	66,15	14,57
<b>E-203</b>	44,85	45,00	49,05	46,37	0,14	0,82	0,92	500,00	2,58	21,55
<b>E-205</b>	44,87	45,00	126,04	124,34	0,09	0,19	1,00	500,00	80,25	0,41

Por último en la Tabla 17 se presenta el calor retirado y el área de transferencia de la segunda etapa. Asimismo, se indica el área total.

Tabla 17. Área de la etapa de condensación y área de transferencia de calor final de los condensadores

	$\lambda$ (kJ/kg)	$Q_{II}$ (kW)	$t_1$ (°C)	$t_{intermedia}$ (°C)	$T_1 = T_2$ (°C)	U (W/(m <sup>2</sup> ·K))	$\Delta T_{ml}$ (m)	$A_{II}$ (m <sup>2</sup> )	$A_{total}$ (m <sup>2</sup> )
<b>E-202</b>	407,50	3195,42	26,00	42,51	78,47	850,00	43,69	86,04	100,61
<b>E-203</b>	255,43	3309,33	26,00	44,85	46,37	850,00	7,25	536,66	558,22
<b>E-205</b>	396,12	2507,15	26,00	44,87	124,34	850,00	88,57	33,30	33,72

## 5. Válvulas

Las válvulas no se dimensionarán, sino que se comprarán para que se puedan ajustar a la utilización que se le quiere dar el en proceso.

### 5.1. Válvula VLV-201

La válvula VLV-201 se utiliza para reducir la presión de la corriente 13 que sale del reactor R-101 que se encuentra a 51,39 bar a una presión de 3,01 bar. Esta válvula produce una caída de presión importante que lleva asociada un cambio de temperatura de 175 °C a 134,95 °C y donde se produce un cambio de fase. Por tanto, se ha de comprar una válvula que trabaje a altas presiones, en un rango de temperatura óptimo y que se apta para caudales elevados.

Finalmente, se ha optado por la utilización de la válvula BV25066 ASA 600# de la compañía BVALVE. En concreto se ha seleccionado una con un diámetro nominal de 65 mm. Está válvula es de acero inoxidable y soporta temperaturas entre los -60 °C y los 400 °C y la presión máxima está entre los 99,3 y los 58,9 bar. (4)

### 5.2. Válvula VLV-202

La válvula VLV-202 se utiliza para reducir la presión de la corriente 17 que sale del separador V-201 que se encuentra a 2,65 bar a una presión de 1,42 bar, presión para que la corriente llegue a la torre de destilación T-201 con una presión de 1,06 bar. Además, la corriente tiene una temperatura de 154,80 °C. Por tanto, se ha de comprar una válvula que trabaje a bajas presiones, en un rango de temperatura óptimo y que se apta para caudales elevados. En conclusión, será una válvula más económica que la válvula VLV-201.

Finalmente, se ha optado por la utilización de la válvula de globo BV25060 PN16 de la compañía *BVALVE*. En concreto se ha seleccionado una con un diámetro nominal de 250 mm. Esta válvula es de acero inoxidable y soporta temperaturas entre los -10 °C y los 200 °C y la presión máxima es de 16 bar. (5)

### 5.3. Válvula VLV-203

La válvula VLV-203 se utiliza para reducir la presión de la corriente 24 que sale del intercambiador E-207 que se encuentra a 2,52 bar a una presión de 1,26 bar, para que pueda ser recirculada hasta el tanque de mezcla TM-101. Además, la corriente tiene una temperatura de 117 °C. Por tanto, se ha de comprar una válvula que trabaje a bajas presiones, en un rango de temperatura óptimo y que sea apta para caudales medios.

Finalmente, se ha optado por la utilización de la válvula de globo BV25060 PN16 de la compañía *BVALVE*, es decir, la misma válvula que la VLV-202. Pero, en este caso, con un diámetro nominal de 25 mm. (5)

## 6. Tanques

### 6.1. Tanque de mezcla TM-101

El tanque de mezcla TM-101 es necesario para llevar a cabo la disolución del cloruro de carbonilo de rodio y del yoduro de litio en la puesta en marcha del proceso o en caso de que haya pérdidas de estos compuestos en el proceso. Por tanto, se instalará un tanque agitado ya que son los dispositivos más recomendados para preparar disoluciones por disolución de sólidos. (3)

Primero se ha de determinar el volumen del tanque y para ello se calcula el caudal volumétrico en el mismo y se supone un tiempo de residencia,  $t_r$ , de la mezcla de 10 minutos, que es el recomendado por bibliografía. Asimismo, se añade un sobredimensionamiento de un 10% del volumen ocupado por el líquido, para evitar desbordamientos. Este cálculo se indica en la *Ecuación 15*.

$$V = 1,1 \cdot t_r \cdot \frac{m_{total}}{\rho_{mezcla}} \quad [15]$$

Los datos utilizados y el resultado del volumen obtenido se muestran en la Tabla 18. También se indica el diámetro del tanque, que se calcula asumiendo que la altura y el diámetro son iguales.

Tabla 18. Dimensiones del tanque de mezcla TM-101

$m_{total}$ (kg/h)	$\rho_{mezcla}$ (kg/m <sup>3</sup> )	$t_r$ (min)	V (m <sup>3</sup> )	$D_T$ (m)
28375,48	1131,32	10	4,60	2,14

A continuación, se determina cual es el tipo de agitador más adecuado, que depende de las propiedades de la mezcla y del volumen. Como se trabaja con un fluido poco viscoso se recomienda la selección de turbinas de aspas planas, hélices o turbinas de aspas con ángulo de ataque.

En concreto se escogerá una hélice de tres aspas simples con deflectores cuya potencia se puede calcular mediante las correlaciones de la Figura 11.

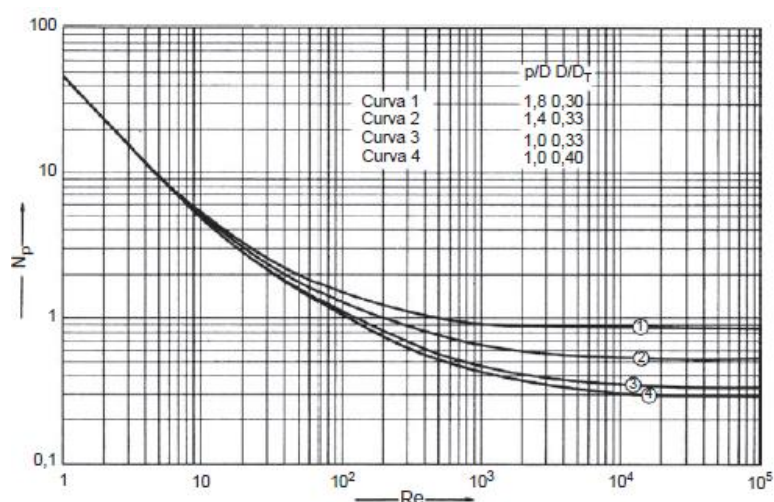


Figura 11. Correlación del número de potencia para hélices de tres aspas simples con deflectores (3)

Para calcular el Reynolds se utiliza la Ecuación 16 y, posteriormente, utilizando la curva 4 de la Figura 11, por ser la que menor potencia emplea, se calcula el número de potencia,  $N_p$ . A partir de este parámetro se determina la potencia del agitador con la Ecuación 17.

$$Re = \frac{D^2 \cdot N \cdot \rho}{\mu} \quad ; \quad N_p = \frac{P}{D^5 \cdot N^3 \cdot \rho} \quad [16, 17]$$

Donde D es el diámetro del rodete (m), que según la Figura 11 es 0,4 veces el diámetro del tanque, N es la velocidad del rodete (rps),  $\mu$  es la viscosidad de la mezcla (N·s/m<sup>2</sup>) y P es la potencia suministrada (W).

Los datos empleados así como los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 19.

Tabla 19. Características del rodete del tanque de mezcla TM-101

D (m)	$\mu$ (N·s/m <sup>2</sup> )	N (rpm)	Re	$N_p$	P (W)	P (kW)
0,86	$3,19 \cdot 10^{-4}$	420	$1,83 \cdot 10^7$	0,3	54050,58	54,05

## 6.2. Separador flash V-201

Para el dimensionamiento del separador flash V-201 es necesario calcular, al igual que se hizo para el reactor R-101, el diámetro mínimo que impedirá que gotas del líquido sean arrastradas por la corriente de gas. Para ello se emplea la *Ecuación 36* de la *Parte B: Reactor R-101 del Anexo II. Cálculos justificativos* para hallar la velocidad de sedimentación y la *Ecuación 37* para el diámetro mínimo.

Los resultados de estos parámetros se muestran en la Tabla 20. Como se obtiene un diámetro pequeño se ha optado por seleccionar uno mayor de 0,5 m.

Tabla 20. Diámetro mínimo en el separador flash V-201

$\rho_L$ (kg/m <sup>3</sup> )	$\rho_V$ (kg/m <sup>3</sup> )	$u_t$ (m/s)	$u_s$ (m <sup>3</sup> )	$v_g$ (m <sup>3</sup> /s)	$D_v$ (m)
892,36	7,38	0,77	0,11	$6,41 \cdot 10^{-3}$	0,27

A partir de este diámetro mínimo se determinan proporciones típicas de las columnas líquido-vapor como se ve en la Figura 3 de la *Parte B: Reactor R-101 del Anexo II. Cálculos justificativos*. Como el valor está por debajo de lo indicado se toman las alturas mínimas establecidas.

A continuación ha de calcularse la altura del líquido en el separador. Para ello primero es necesario calcular el volumen de líquido en el separador, que se determina utilizando la *Ecuación 18*. Según bibliografía, el tiempo de residencia,  $t_r$ , del líquido en el tanque suele estar entre los 5 y 10 minutos. (3)

$$V_l = v_l \cdot t_r \quad [18]$$

Posteriormente se calcula el nivel del líquido,  $N_l$ , utilizando la *Ecuación 19*.

$$V_l = \pi \cdot \frac{D^2}{4} \cdot N_l \quad [19]$$

Finalmente se obtiene que la altura del tanque se corresponde con lo indicado en la *Ecuación 20*. Esta longitud permite calcular el volumen del separador empleando la *Ecuación 19*, pero con la longitud total en vez del nivel del líquido.

$$L = N_l + 0,4 + 1 + 0,6 \quad [20]$$

Los resultados obtenidos de las dimensiones se presentan en la Tabla 21.

Tabla 21. Dimensiones del separador flash V-101

$v_l$ (m <sup>3</sup> /s)	$t_r$ (s)	$V_l$ (m <sup>3</sup> )	$D$ (m)	$N_l$ (m)	$L$ (m)	$V$ (m <sup>3</sup> )
$9,42 \cdot 10^{-3}$	600	0,56	0,5	2,88	4,88	0,96

A continuación, se determinará el espesor del tanque, ya que es necesario para calcular la masa de la carcasa, cuyo valor será utilizado para determinar el coste del equipo. Para ello se sigue el procedimiento indicado en la *Parte A: Diseño Mecánico del Anexo II. Cálculos Justificativos*. Como se obtiene un valor del espesor de 1 mm, se debe seleccionar el mínimo recomendado por la norma *ASME* de 1,5 mm y aplicarle el factor de corrosión.

Tras el cálculo del espesor de la carcasa ya es posible determinar la masa de la carcasa. Pero primero se ha de calcular el volumen del material empleado con la *Ecuación 21* y posteriormente la masa con la *Ecuación 22*.

$$V_{material} = \pi \cdot D \cdot L \cdot t \quad [21]$$

$$m_{carcasa} = V_{material} \cdot \rho_{material} \quad [22]$$

Los datos obtenidos se presentan en la Tabla 22.

Tabla 22. Dimensiones de la carcasa del separador flash V-201

<b>P<sub>a</sub></b> <b>(bar)</b>	<b>S</b> <b>(bar)</b>	<b>E</b>	<b>t</b> <b>(mm)</b>	<b>V<sub>material</sub></b> <b>(m<sup>3</sup>)</b>	<b>ρ<sub>material</sub></b> <b>(kg/m<sup>3</sup>)</b>	<b>m<sub>carcasa</sub></b> <b>(kg)</b>
4,37	1075,86	1	5,5	4,21·10 <sup>-2</sup>	8000	337,11

## 7. Columna de destilación

El procedimiento de cálculo para el dimensionamiento de la columna de destilación T-201 es análogo al de la T-202. Sin embargo, como se trata de un dimensionado básico, solo se estimará la masa de la carcasa del recipiente.

Para conocer dicha masa es necesario calcular la altura, el espesor de la carcasa y el diámetro del recipiente. Como fue mencionado en la *Parte C* del actual *Anexo II*, este equipo fue simulado en *Aspen HYSYS* con un diámetro de 1,5 m y un total de 22 etapas. El diámetro que se usará para los cálculos será el obtenido en la simulación. Por otro lado, la bibliografía (6) indica que esta columna de destilación en el proceso de carbonilación de anhídrido acético cuenta con 20 etapas, por lo que comparando con las 22 obtenidas en *HYSYS* y basándose en el principio de prudencia, se tomarán 22 etapas para el cálculo de la altura (H). Este valor se tomará como la distancia entre tangentes según la *Ecuación 23*.

$$H = (l_t + t_{plato}) \cdot (N - 1) + L_{cabeza} + L_{cola} \approx 11,6m \quad [23]$$

Donde:

- $l_t$  es el espaciado entre platos en m. Se toma de *Aspen HYSYS* como 0,55m.
- $t_{plato}$  es el espesor del plato en m. Se toma el mismo que para los platos de la columna de destilación T-202 por los motivos mencionados en la Parte C, es decir, 3mm.
- N es el número de etapas. 22 etapas.

- $L_{\text{cabeza}}$  y  $L_{\text{cola}}$  es la distancia que se debe dejar entre el cuerpo y los cabezales de la columna en m. Se toman de heurísticas (7) como 2 y 3 m respectivamente.

Para el espesor mínimo ( $t$ ) de la carcasa se hace uso de las Ecuaciones de espesor radial y longitudinal de la *Parte A de Diseño Mecánico*. Los datos y resultados se muestran a continuación en la Tabla 23.

Tabla 23. Datos y resultados para el cálculo de espesor de carcasa de la T-201

$P_d$ (bar)	$S$ (bar)	$E$	$D_i$ (m)	$t_{\text{radial}}$ (mm)	$t_{\text{long.}}$ (mm)	$t_{\text{corregido}}$ (mm)
2,89	1054,26	1	1,5	2,06	1,03	6,06

Se toma el valor mayor entre radial y longitudinal, en este caso 2,06 que con la corrección de 4 mm por corrosión queda en 6,06 mm. Se compara este valor con el recomendado según los datos bibliográficos (8) de la Tabla 4 en la *Parte A: Diseño mecánico*, para columnas con diámetro entre 1 y 2 m con un factor de corrosión de 4 mm. Este valor se toma son 9 mm, por lo que se considera que el espesor será finalmente de 9 mm.

Con la recopilación de estos datos solo faltaría conocer la densidad del material ( $\rho$ ) de construcción. Al igual que la columna T-202 será de acero inoxidable 316, que cuenta con un valor de 8000 kg/m<sup>3</sup>. (9)

La masa de la carcasa puede ser calculada empleando la *Ecuación 24*.

$$M_{\text{carcasa}} = (V_{de} - V_{di}) \cdot \rho_{A316} \quad [24]$$

$$V_{de} = \pi \cdot \frac{d_e^2}{4} \cdot H \quad ; \quad d_e = d_i + 2 \cdot t \quad [25, 26]$$

$$V_{di} = \pi \cdot \frac{d_i^2}{4} \cdot H \quad [27]$$

Donde:  $V_{de}$  y  $V_{di}$  hace referencia al volumen de un cilindro calculado para el diámetro externo,  $d_e$ , e interno,  $d_i$ , del cuerpo del equipo respectivamente.

Otro factor importante en el dimensionamiento es la caída de presión en el equipo. En el diseño detallado de la columna T-202 se mencionaba que la heurística indicaba que la caída de presión por plato se podía considerar como 0,007 bar/plato. Como en este caso el equipo consta de 22 etapas, se obtiene una caída de presión total de 0,154 bar. En la Tabla 24 se presentan recogidos todos los datos de interés del dimensionamiento de la columna de destilación T-202.

Tabla 24. Recopilación de datos del dimensionamiento de la T-201

$D_i$ (m)	$t$ (mm)	Nº de etapas	$t_{\text{plato}}$ (mm)	$\Delta P$ (bar)	$M_{\text{carcasa}}$ (kg)	$H$ (m)
1,5	9,0	22	3,0	0,154	5670,5	11,6

## 8. Tuberías

Es fundamental seleccionar el tamaño óptimo de las conducciones que unen los distintos equipos del sistema, ya que afecta a la caída de presión entre equipos y, por tanto, al coste si se viera necesario implementar sistemas de bombeo.

El precio de una tubería se incrementa cuanto mayor sea su diámetro, sin embargo, el gasto de bombeo se reduce. Para calcular el diámetro óptimo de cada una de las conducciones del proceso se puede utilizar la *Ecuación 28*. (3)

$$d_{i,\text{óptimo}} = 0,33 \cdot \left(\frac{m}{\rho}\right)^{0,5} \quad [28]$$

Estos diámetros calculados deben aproximarse a sus valores estándar, para ello se decide tomar el *Schedule 40* para acero inoxidable. (10)

Pero eso no es todo, asimismo, debe comprobarse que se esté trabajando dentro del rango de velocidades recomendado, este se indica para los distintos fluidos en la Tabla 25. Sino fuera el caso, debe buscarse un diámetro que este dentro de la franja indicada. En esa misma tabla se muestra también una caída de presión estimada para cada uno de los fluidos por metro de tubería.

Tabla 25. Velocidades y caídas de presión típicas para fluidos. (3)

	Velocidad (m/s)	Caída de presión (kPa/m)
<b>Líquidos bombeados</b>	1-3	0,5
<b>Líquidos que fluyen por gravedad</b>	-	0,05
<b>Gases y vapores</b>	15-30	0,02% de la presión de la tubería

Para calcular la sección transversal de las tuberías,  $A$  ( $m^2$ ), se utiliza la *Ecuación 29* y, posteriormente las velocidades,  $u$  (m/s), se calculan con la *Ecuación 30*.

$$A = \pi \cdot \frac{d^2}{4} \quad ; \quad u = \frac{v}{A} \quad [29, 30]$$

Cabe destacar, que para mayor precisión en el cálculo de la potencia de las bombas, que llevan las mezclas al tanque TM-101, se ha decidido calcular la caída de presión mediante un balance de energía mecánica. En concreto se utilizará la *Ecuación 31* para el cálculo de las caídas de presión en las corrientes 4, 26 y 27. En este cálculo se asume que las velocidades de entrada y salida de las conducciones son iguales y que no hay diferencia de altura entre los extremos.

$$\frac{\Delta P}{\rho} - f \cdot \frac{L \cdot u^2}{d \cdot 2} = 0 \quad [31]$$

Donde  $f$  se calcula mediante la *Ecuación 32* si el régimen es laminar o mediante la *Ecuación 33* si es turbulento.

$$f = \frac{64}{Re} \quad ; \quad f = \frac{0,25}{\left[ \log \left( \frac{1}{3,7 \cdot \frac{d}{4,6 \cdot 10^{-5}}} + \frac{5,74}{Re^{0,9}} \right) \right]^2} \quad [32, 33]$$

Por último, se debe determinar si se debe utilizar aislante en las tuberías, ya que si se trabaja con temperaturas elevadas se consigue evitar la pérdida de calor y aumentar la seguridad en la planta. En la Figura 13 se muestran los espesores de aislante recomendados para distintas temperaturas del fluido y distintos diámetros de tuberías. Destacar que estos espesores están diseñados para tener una temperatura de seguridad en la pared de 50 °C para seguridad personal de los operarios de la planta.

Tuberías		°C Temperatura del fluido ≤										
Diámetro nominal		100	150	200	250	300	350	400	450	500	550	600
Di (")	Di (mm)	Espesor de aislamiento (mm)*										
1	34	40	50	60	80	100	120	140	160	200	200	
1 1/2	48	50	60	80	80	100	120	140	160	180	200	220
2	60	50	60	80	100	100	120	140	160	190	210	220
2 1/2	73	60	80	100	100	110	130	140	170	190	210	230
3	89	60	80	100	110	110	130	150	180	200	220	240
4	114	80	80	110	110	120	140	160	180	210	240	250
6	168	80	80	110	120	130	150	170	190	230	260	280
8	219	80	100	120	130	130	160	180	200	240	270	290
10	273	100	100	120	130	140	170	190	210	250	290	310
12	324	100	100	120	130	140	170	200	220	260	300	320
14	356	120	120	130	140	140	180	200	230	260	300	320
16	407	120	120	130	140	150	180	200	230	270	310	330
18	457	120	120	130	140	150	180	210	240	280	320	340
20	508	120	120	130	140	150	190	210	240	280	320	350
22	559	120	130	140	150	150	190	220	250	290	330	350
24	609	130	140	140	150	150	190	220	250	290	330	360

■ TECH Pipe Section MT 4.0\* ■ TECH Pipe Section MT 4.1\* ■ TECH Pipe Section MT 4.1 + TECH Wired Mat MT 3.1 (2 o 3 capas)\*  
 ■ TECH Pipe Section MT 4.1 + TECH Wired Mat MT 4.2 (2 o 3 capas)\* ■ TECH Wired Mat MT 4.2\* ■ TECH Wired Mat MT 5.1\*  
 ■ TECH Wired Mat MT 5.1\*

Figura 12. Espesores de aislamiento recomendado (11)

En la Tabla 26 se presentan los resultados de los cálculos específicos realizados para las corrientes 4, 26 y 27.

Tabla 26. Caídas de presión en las conducciones con mayor longitud

	d	ρ	μ	u	Re	f	L	ΔP	ΔP
	(mm)	(kg/m <sup>3</sup> )	(Pa·s)	(m/s)			(m)	(kPa)	(bar)
4	35,10	929,64	3,73·10 <sup>-4</sup>	2,83	2,48·10 <sup>5</sup>	2,21·10 <sup>-2</sup>	65,00	152,73	1,53
26	35,10	1603,79	3,47·10 <sup>-4</sup>	2,09	3,38·10 <sup>5</sup>	2,19·10 <sup>-2</sup>	107,00	232,73	2,33
27	26,60	936,47	3,40·10 <sup>-4</sup>	2,10	1,54·10 <sup>5</sup>	2,40·10 <sup>-2</sup>	165,00	308,49	3,08

En la Tabla 27 se muestran las dimensiones, velocidades del fluido y caídas de presión obtenidas para cada una de las conducciones del proceso. Estas caídas de presión en cada conducción, a excepción de las comentadas, han sido determinadas siguiendo las heurísticas indicadas en la Tabla 25.

Tabla 27. Diámetros y caídas de presión de las conducciones (10)

Corriente	d <sub>i</sub> (mm)	d <sub>N</sub> (mm)	(in)	t (mm)	d <sub>o</sub> (mm)	u (m/s)	L (m)	ΔP (bar)	P <sub>inicial</sub> (bar)	P <sub>final</sub> (bar)
1	35,1	32	1 ¼	3,56	42,2	2,82	2,50	1,25·10 <sup>-3</sup>	1,01	1,01
2	2,985	4,76	3/16	0,889	4,76	1,05	2,50	1,25·10 <sup>-3</sup>	1,01	1,01
3	35,1	32	1 ¼	3,56	42,2	2,83	1,00	5,00·10 <sup>-4</sup>	1,01	1,01
4	35,1	32	1 ¼	3,56	42,2	2,83	65,00	1,64	2,89	1,25
5	62,7	65	2 ½	5,16	73,0	2,26	10,00	5,00·10 <sup>-3</sup>	1,25	1,25
6	62,7	65	2 ½	5,16	73,0	2,26	7,50	3,75·10 <sup>-2</sup>	50,59	50,55
7	62,7	65	2 ½	5,16	73,0	2,78	41,00	0,21	50,20	50,00
8	40,9	40	1 ½	3,68	48,3	17,90	57,00	0,59	51,50	50,91
9	62,7	65	2 ½	5,16	73,0	15,29	15,00	0,15	50,91	50,76
10	62,7	65	2 ½	5,16	73,0	16,64	41,00	0,41	50,41	50,00
11	40,9	40	1 ½	3,68	48,3	24,52	48,00	0,47	48,59	48,13
12	40,9	40	1 ½	3,68	48,3	23,80	15,00	0,15	51,06	50,91
13	62,7	65	2 ½	5,16	73,0	2,66	39,00	1,95·10 <sup>-2</sup>	51,41	51,39
14	202,7	200	8	8,18	219,1	8,13	2,00	1,20·10 <sup>-3</sup>	3,01	3,01
15	381	400	18	12,70	406,4	9,49	7,50	3,99·10 <sup>-3</sup>	2,66	2,65
16	26,6	25	1	3,38	33,4	2,02	7,50	3,75·10 <sup>-3</sup>	2,90	2,90
17	254,5	250	10	9,27	273,1	20,87	5,00	2,65·10 <sup>-3</sup>	2,65	2,65
18	381	400	16	12,70	406,4	17,48	2,50	7,11·10 <sup>-4</sup>	1,42	1,42
19	62,7	65	2 ½	5,16	73,0	2,20	18,00	9,00·10 <sup>-3</sup>	1,07	1,06
20	35,1	32	1 ¼	3,56	42,2	2,09	5,00	2,50·10 <sup>-3</sup>	1,01	1,01
21	52,5	50	2	3,91	60,3	2,35	35,00	1,75·10 <sup>-2</sup>	1,17	1,15
22	26,6	25	1	3,38	33,4	2,10	5,00	2,50·10 <sup>-3</sup>	1,01	1,01
23	52,5	25	1	3,38	33,4	1,83	15,00	7,50·10 <sup>-3</sup>	1,69	1,68
24	26,6	25	1	3,38	33,4	1,88	50,00	2,50·10 <sup>-2</sup>	2,55	2,52
25	26,6	25	1	3,38	33,4	1,88	10,00	5,00·10 <sup>-3</sup>	1,26	1,25
26	35,1	32	1 ¼	3,56	42,2	2,09	107,00	2,33	3,58	1,25
27	26,6	25	1	3,38	33,4	2,10	165,00	3,08	4,34	1,25
28	52,5	50	2	3,91	60,3	1,83	92,00	4,60·10 <sup>-2</sup>	1,33	1,29

## 9. Bibliografía

1. **HIDROTÉCNICA NACIONAL DE MONTERREY, SA.** Hidrotécnica. *Goulds NPE catalogo 1ST-2ST-3ST*. [En línea] [Citado el: 3 de Junio de 2024.] <https://hidrotecnicanacional.com/descargables/Goulds%20NPE%20catalogo%201ST-2ST-3ST.pdf>.
2. **KSB.** Multitec. *Bomba de cuerpo segmentado*. [En línea] [Citado el: 3 de Junio de 2024.] <https://www.ksb.com/es-mx/lc/productos/bomba/bomba-de-cuerpo-segmentado/multitec/M07A>.
3. **SINNOTT, R. K. y TOWLER, G.** *Diseño en Ingeniería Química*. 5ª ed. Barcelona : Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.
4. **BVALVE.** BVALVE. *Bellows sealed valve*. [En línea] [Citado el: 6 de Junio de 2024.] [https://thebellowssealedvalve.com/wp-content/uploads/2022/01/ESIC-BSV\\_AMA600\\_DS\\_VER\\_01-2021.pdf](https://thebellowssealedvalve.com/wp-content/uploads/2022/01/ESIC-BSV_AMA600_DS_VER_01-2021.pdf).

5. —. BVALVE. *Globe valve*. [En línea] [Citado el: 24 de Junio de 2024.]  
[https://thebellowssealedvalve.com/wp-content/uploads/2022/03/ESIC-Gland\\_packing\\_DS\\_VER\\_01-2022.pdf](https://thebellowssealedvalve.com/wp-content/uploads/2022/03/ESIC-Gland_packing_DS_VER_01-2022.pdf).

6. GERHARTZ, W. y ULLMANN, F. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. 5ª ed. Deerfield Beach : Advisory Board, 1985. Vol. A1. ISBN 0-89573-151-7.

7. TURTON, R., y otros. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 3º ed. Boston : Pearson Education, Inc., 2009. ISBN 978-0-13-512966-1.

8. COULSON, J. M., SINNOTT, R. T. y RICHARDSON, J. F. *Chemical Engineering*. Oxford : Pergamon Press, 1983. Vol. 6. ISBN 0-08-022969-7.

9. ALLOY WIRE INTERNATIONAL®. Alloy wire international®. [En línea] [Citado el: 6 de Junio de 2024.] <https://www.alloywire.es/products/stainless-steel-316/>.

10. STEEL TUBES INDIA. ST STEEL TUBES INDIA. *Schedule 40 Mild Steel Pipe*. [En línea] [Citado el: 1 de Junio de 2024.] <https://www.steeltubesindia.net/schedule-40-mild-steel-pipe.html>.

11. ISOVER. Aislamiento de Tuberías. [En línea] [Citado el: 6 de Junio de 2024.] <https://www.isover.es/documents/documentacion-isover/aislamiento-tuberias-2018.pdf>.

---

# ANEXO III:

## Análisis de viabilidad económica

---

## Índice

1.	Introducción.....	1
2.	Inversión inicial.....	1
3.	Financiación .....	2
4.	Costes de producción.....	3
4.1.	Costes de explotación .....	3
4.1.1.	Costes de materias primas .....	4
4.1.2.	Coste de las utilidades .....	5
4.1.3.	Costes de mano de obra.....	5
4.1.4.	Costes obtenidos por factores.....	6
4.1.5.	Costes de explotación.....	7
4.2.	Costes de gestión .....	7
5.	Ingresos por ventas.....	8
6.	Amortizaciones.....	8
7.	Flujos de caja.....	9
8.	Valor neto actual (VAN).....	11
9.	Tasa interna de retorno (TIR) .....	11
10.	Plazo de recuperación ( <i>Pay-back</i> ).....	11
11.	Análisis de sensibilidad.....	12
11.1.	Variación del precio de venta del $\text{Ac}_2\text{O}$ .....	12
11.2.	Variación del precio de las materias primas.....	13
11.3.	Variación de la inversión inicial.....	13
12.	Conclusión de la viabilidad económica.....	14
13.	Bibliografía .....	14

## 1. Introducción

La evaluación económica es un aspecto fundamental, ya que un proyecto solo se considera aceptable si se obtiene una rentabilidad económica. Este aspecto puede estudiarse a través de determinados parámetros de rentabilidad como el VAN (Valor Actual Neto) y el TIR (Tasa interna de retorno). Además también se estudiará otro parámetro que indica el tiempo en el cual se recupera la inversión del capital inicial, el *pay-back*.

Para poder determinar estos índices de rentabilidad se llevará a cabo la obtención de los costes e ingresos anuales de la planta, que nos permitan calcular los flujos de caja a lo largo de los años de vida de la misma. Asimismo, se debe tener en cuenta la inversión inicial necesaria y se debe indicar el medio de financiación, así como las cuotas e intereses que habrá que pagar para devolver el préstamo.

## 2. Inversión inicial

La inversión inicial es la cantidad de capital necesaria para poder llevar a cabo la puesta en marcha de la planta. En esta inversión se incluyen el capital circulante necesario y los costes fijos, que incluyen el precio de los equipos, tuberías, instalación, electricidad, entre otros.

El valor correspondiente ha sido calculado aplicando un método factorial en el *Documento V. Presupuesto* y se obtuvo un valor de 48.819.883,50 €.

A parte de este valor obtenido hay que tener en cuenta que al inicio se compraron determinadas sustancias que se han ido recirculando a lo largo del proceso y cuyas pérdidas son prácticamente nulas. Estas sustancias son el hidrógeno, el catalizador de rodio, el yoduro de metilo y el yoduro de litio.

El precio de estas sustancias es elevado, por tanto es de vital importancia tener en cuenta su costo inicial. Para ello se ha de conocer la cantidad de cada sustancia que hay en el ciclo, que se puede determinar si se conoce el tiempo que tardan los compuestos en completar un ciclo. Para el cloruro de carbonilo de rodio y el yoduro de litio este tiempo se corresponde prácticamente con el tiempo de residencia en el tanque de mezcla TM-101, en el reactor R-101 y el separador V-201. Por otro lado, para el yoduro de metilo es el tiempo en el mezclador, en el reactor y en la columna de destilación T-201 y para el hidrógeno es prácticamente el tiempo en el reactor. El tiempo final se ha determinado sumando el tiempo en las conducciones y equipos que se presenta en la Tabla 1.

Tabla 1. Tiempo de residencia de un ciclo

Conducciones/Equipos	Tiempo (s)							Total
	TM-101	5+6+7	R-101	13+14+15	17+18+19	T-101	20+26	
LiI y Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	600	22,50	6453,79	15,72	8,55	97,33	53,66	7251,55
Conducciones/Equipos	TM-101	5+6+7	R-101	13+14+15	V-101	16+24+25	Total	
CH <sub>3</sub> I	600	22,50	6453,79	15,72	600	35,58	7727,59	
Conducciones/Equipos	9+10	R-101	11+12	Total				
H <sub>2</sub>	3,45	81,05	2,59	87,09				

En la Tabla 2 se indican los flujos de las sustancias, tiempo que tardan en dar un ciclo, cantidades totales necesarias y coste inicial. Cabe destacar, que debido a la baja cantidad necesaria de hidrógeno se ha optado por la compra de una botella de 50 litros a 200 bar, lo que equivaldría alrededor de 0,8 kilogramos, de la empresa *Carbueros metálicos*. El precio de la botella se indica en la Tabla 2. (1)

Tabla 2. Coste inicial de sustancias del proceso

Sustancia	Flujo (kg/h)	Tiempo (h)	Cantidad necesaria (kg)	Precio (€/kg)	Coste (€)
Yoduro de litio	565,90	2,13	1203,14	60,00	72.188,30
Rh <sub>2</sub> (CO) <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>	9,13	2,13	19,41	619.000,00	12.017.022,80
Yoduro de metilo	8834,89	2,01	17796,29	241,00	4.288.096,52
Hidrógeno	26,17	2,42 · 10 <sup>-2</sup>	0,63	-	130,00

Finalmente, mediante la suma de la inversión en capital fijo y de las sustancias necesarias se determina que se necesita una inversión inicial de 61.985.794,36 €. Además, con este dato se pueden determinar los costes previos a la puesta en marcha, que incluyen la organización y gestión de las obras y las licencias, permisos y pruebas necesarias antes de poner en marcha la planta. Se corresponden al 8 % de la inversión inicial dada en el *Documento V. Presupuesto*. En conclusión, el desembolso inicial, es decir, la suma de la inversión de inmovilizado, costes previos a la puesta en marcha y capital circulante, es de 68.846.734,86 €.

### 3. Financiación

Para empezar el proyecto es necesaria una financiación inicial, por lo que se pide al banco un préstamo que cubra el 80 % del desembolso inicial necesario.

Hay varios tipos de préstamos que se pueden pedir y cada uno de ellos tiene una forma distinta de determinar las cuotas que se han de pagar anualmente. El más empleado en España es el método francés, ya que se caracteriza por tener que pagar la misma cuota anual hasta que se devuelva por completo el préstamo.

Para determinar la cuota anual correspondiente se emplea la *Ecuación 1*, donde  $C_0$  se corresponde con el capital prestado,  $i$  al tipo de interés anual del préstamo y  $j$  al número de cuotas en las que se divide la devolución del préstamo, que en este caso será un número igual a la vida útil de la planta (20 años).

$$Anualidad = C_0 \cdot \left( \frac{i}{1 - (1 + i)^{-j}} \right) \quad [1]$$

Para determinar el valor de los tipos de interés se han utilizado informes del Banco de España, donde se indica que en préstamos de las entidades bancarias de más de un millón de euros hay un tipo de interés fijo medio de un 5 %. (2)

Asimismo, como se trata de una empresa, habrá un ahorro en los impuestos debido a los intereses que se pagan anualmente del 25 %, ya que estos son deducibles fiscalmente. En la Tabla 3, se muestra la amortización del préstamo, es decir, los flujos de caja anuales hasta el pago de la deuda completa. Además, se indican también los interés anuales y el ahorro de impuestos correspondiente.

Tabla 3. Método francés para la financiación de la inversión inicial

Año	Capital vivo	Intereses	Principal	Anualidad	Ahorro de impuestos	Flujos
0	55.077.387,89 €					55.077.387,89 €
1	53.411.705,18 €	2.753.869,39 €	4.419.552,10 €	1.665.682,71 €	688.467,35 €	-3.731.084,75 €
2	51.662.738,34 €	2.670.585,26 €	4.419.552,10 €	1.748.966,84 €	667.646,31 €	-3.751.905,78 €
3	49.826.323,16 €	2.583.136,92 €	4.419.552,10 €	1.836.415,18 €	645.784,23 €	-3.773.767,87 €
4	47.898.087,22 €	2.491.316,16 €	4.419.552,10 €	1.928.235,94 €	622.829,04 €	-3.796.723,06 €
5	45.873.439,48 €	2.394.904,36 €	4.419.552,10 €	2.024.647,74 €	598.726,09 €	-3.820.826,01 €
6	43.747.559,35 €	2.293.671,97 €	4.419.552,10 €	2.125.880,13 €	573.417,99 €	-3.846.134,11 €
7	41.515.385,22 €	2.187.377,97 €	4.419.552,10 €	2.232.174,13 €	546.844,49 €	-3.872.707,61 €
8	39.171.602,38 €	2.075.769,26 €	4.419.552,10 €	2.343.782,84 €	518.942,32 €	-3.900.609,78 €
9	36.710.630,40 €	1.958.580,12 €	4.419.552,10 €	2.460.971,98 €	489.645,03 €	-3.929.907,07 €
10	34.126.609,82 €	1.835.531,52 €	4.419.552,10 €	2.584.020,58 €	458.882,88 €	-3.960.669,22 €
11	31.413.388,21 €	1.706.330,49 €	4.419.552,10 €	2.713.221,61 €	426.582,62 €	-3.992.969,48 €
12	28.564.505,52 €	1.570.669,41 €	4.419.552,10 €	2.848.882,69 €	392.667,35 €	-4.026.884,75 €
13	25.573.178,70 €	1.428.225,28 €	4.419.552,10 €	2.991.326,82 €	357.056,32 €	-4.062.495,78 €
14	22.432.285,53 €	1.278.658,93 €	4.419.552,10 €	3.140.893,16 €	319.664,73 €	-4.099.887,37 €
15	19.134.347,71 €	1.121.614,28 €	4.419.552,10 €	3.297.937,82 €	280.403,57 €	-4.139.148,53 €
16	15.671.513,00 €	956.717,39 €	4.419.552,10 €	3.462.834,71 €	239.179,35 €	-4.180.372,75 €
17	12.035.536,55 €	783.575,65 €	4.419.552,10 €	3.635.976,45 €	195.893,91 €	-4.223.658,19 €
18	8.217.761,27 €	601.776,83 €	4.419.552,10 €	3.817.775,27 €	150.444,21 €	-4.269.107,89 €
19	4.209.097,24 €	410.888,06 €	4.419.552,10 €	4.008.664,04 €	102.722,02 €	-4.316.830,08 €
20	0,00 €	210.454,86 €	4.419.552,10 €	4.209.097,24 €	52.613,72 €	-4.366.938,38 €

## 4. Costes de producción

Para llevar a cabo la viabilidad económica de la planta es fundamental conocer cuáles son los gastos de la empresa anuales. Estos costes se dividen en dos grupos principales: los costes de explotación, que son aquellos enfocados directamente en la manufactura, y los costes de gestión que son aquellos destinados a la mejora y dirección de la empresa.

### 4.1. Costes de explotación

Estos costes, también conocidos como costes de producción directa, incluyen los gastos en materias primas, mano de obra, supervisión y mantenimiento, utilidades, costes de distribución y seguros.

Algunos de estos costes pueden ser calculados directamente mediante los precios del mercado, como por el ejemplo el gasto en materias primas, en utilidades y en el salario de los trabajadores. Por el contrario, otros serán estimados mediante proporciones dadas por bibliografía que se basa en proporciones habituales en plantas industriales.

#### 4.1.1. Costes de materias primas

Como se comentó en el *Documento I. Memoria*, las materias primas del proceso son el acetato de metilo y el monóxido de carbono. Como es evidente, ambos reactivos se consumen en el reactor dependiendo de la conversión en el mismo, por lo que será necesario comprar la cantidad de ambos que reacciona para mantener la capacidad de la planta deseada. Los precios de ambas sustancias fueron indicados en el apartado 6. *Análisis de mercado* del *Documento I. Memoria* y la cantidad necesaria, su precio, y el coste total se indican en la Tabla 4.

Asimismo, también será necesario la compra de ácido acético, que es el disolvente del sistema catalítico. A pesar de no reaccionar, esta sustancia no se puede separar por completo del anhídrido acético. Por tanto, se pierde cierta cantidad que se debe reponer.

Por otro lado, también se adquiere un 5% de la cantidad necesaria en el proceso de yoduro de metilo, cloruro de carbonilo de rodio y yoduro de litio; ya que a pesar de estar recirculándose continuamente pueden producirse pérdidas que deben ser compensadas. Según heurísticas, las pérdidas en un proceso cerrado suelen ser de un 2/3 %, pero, en este caso, se selecciona un 5 % para añadir cierto margen de error. (3)

Por último, se adquiere una botella anual de hidrógeno de 50 litros, para reponer la cantidad anualmente. (1)

Las cantidades y el coste anual de la compra de estas sustancias se muestran en la Tabla 4. Los precios indicados de las sustancias son los mencionados en el apartado 9. *Descripción del proceso, instalación y equipos* del *Documento I. Memoria*.

Tabla 4. Costes anuales de las sustancias

Año	Requerimiento anual (ton)	Precio (€/ton)	Coste (€/año)
Acetato de metilo	72349,59	680,0	49.197.722,53
Monóxido de carbono	27376,97	200,0	5.475.393,76
Ácido acético	258,54	451,5	116.731,85
Yoduro de litio	0,06	60.000,0	3.609,41
Cloruro de carbonilo de rodio	$9,71 \cdot 10^{-4}$	619.000.000,00	600.851,14
Yoduro de metilo	0,89	241.000,0	214.445,33
Hidrógeno	-	-	130

#### 4.1.2. Coste de las utilidades

En el coste de las utilidades se incluye el coste anual del acondicionamiento de los fluidos calefactores y refrigerantes utilizados en los intercambiadores. Asimismo, en este apartado se incluye el coste eléctrico empleado en aquellos equipos que lo necesiten, es decir, en las bombas, compresores y tanques de mezcla.

En la Tabla 5 se indican los equipos que empleen fluidos de servicio, el coste de su tratamiento y el coste por año que supondrá para la planta.

Tabla 5. Coste anual de los fluidos de servicio (4)

Equipo	Fluido de servicio	Cantidad requerida (t/año)	Precio (€/t)	Coste (€/año)
E-101	Vapor de media presión	600285,18	9,73	5.841.606,31
E-102	Vapor de media presión	147579,12	9,73	1.436.149,26
R-101	Agua de refrigeración	685340,66	0,06	41.338,72
E-201	Vapor de media presión	981560,39	9,73	9.551.942,25
E-202	Agua de refrigeración	1320152,40	0,06	79.629,62
E-203	Agua de refrigeración	1197235,99	0,06	72.215,48
E-204	Vapor de media presión	1696611,40	9,73	16.510.379,08
E-205	Agua de refrigeración	906048,45	0,06	54.651,49
E-206	Vapor de media presión	1028048,05	9,73	10.004.331,63
E-207	Agua de refrigeración	28348,48	0,06	1.709,94
E-208	Agua de refrigeración	304860,66	0,06	18.388,74

En la Tabla 6 se recogen la potencia en kW de las bombas, del compresor y del tanque de mezcla que han sido calculadas en el Anexo I. Balances de materia y energía y en la Parte D: Dimensionamiento básico de los equipos del Anexo II. Cálculos justificativos.

Tabla 6. Potencias de los equipos eléctricos de la planta

Equipo	P-101 A/B	TM-101	P-102 A/B	C-101	P-203 A/B	P-204 A/B
Potencia (kW)	0,95	54,05	55,45	13,39	1,01	0,83

Según un boletín estadístico del Ministerio de Industria y Turismo el precio medio de la electricidad para la industria a finales de 2023 era de 0,134 €/kWh. Tras es cálculo correspondiente se obtiene un gasto anual de 133.384,78 € en electricidad. (5)

#### 4.1.3. Costes de mano de obra

Para el cálculo del número de operarios que necesita la planta para un correcto funcionamiento se emplea la Ecuación 2. Donde  $N_{OL}$  es el número de operarios por turno necesario para llevar a cabo el proceso,  $P$  es el número de equipos que se utilizan para sólidos (en este caso ninguno) y  $N_{np}$  es el número de equipos para otros fluidos que se emplean para comprimir, calentar, enfriar, mezclar y para la reacción. (6)

$$N_{OL} = (6,29 + 31,7 \cdot P^2 + 0,23 \cdot N_{np})^{0,5} \quad [2]$$

Por tanto, sabiendo que para los fluidos se cuenta con 22 equipos, se obtiene que se necesitan 3,4 operarios por turno.

Por otro lado, la media de trabajo de un operador es de 48 semanas al año, en los que trabaja 5 turnos de 8 horas al día. Así se estima que un trabajador realiza 240 turnos al año (48 semanas/año · 5 turnos/semana) y, como la planta trabaja 24 h/día, se necesitan 1095 turnos al año (365 días/turno · 3 turnos/día). Posteriormente se obtiene el número de trabajadores que se necesita para cubrir los turnos  $[(1095 \text{ turnos/año}) / (240 \text{ turnos/operador/año})]$  que se corresponde a 4,5 operarios. Finalmente se puede determinar el número total de operarios en la planta multiplicando  $4,5 \cdot N_{OL}$  dando un número de 16 trabajadores en total.

El sueldo de los operarios depende de múltiples factores (posición, longevidad, responsabilidad, etc.). En España, el sueldo medio de los operadores de máquinas en la industria química es de 30.200 €, por lo que el total del coste en mano de obra asciende a los 483.200,0 €. (7)

Además de estos trabajadores que se encargan del control de la planta, debe haber personas que llevan a cabo la supervisión, así como personal de oficina y de limpieza. El coste de esta mano de obra indirecta se corresponde con el 15 % del coste de la mano de obra directa, obteniéndose un importe anual de 72.480,0 €. (4)

#### 4.1.4. Costes obtenidos por factores

En este apartado se calcularán determinados costes de explotación que no pueden ser calculados de manera directa. Entre ellos se encuentran los costes de mantenimiento, de operaciones de abastecimiento, de laboratorio y de los seguros.

Los gastos para mantenimiento y reparación incluyen el capital empleado en la mano de obra, materiales y personal para la supervisión. Se estima que estos gastos varíen entre el 2 y el 10 % del coste del capital inmovilizado dependiendo de si las condiciones de operación son severas o suaves. En este caso, se selecciona un valor medio del 5 %. (4)

Los gastos en operaciones de abastecimiento se refieren a la adquisición de distintos materiales como lubricantes, suministros de limpieza productos químicos de prueba, etc. El coste anual se puede estimar como el 15 % del coste de mantenimiento. (4)

Los gastos de laboratorio incluyen los gastos en el departamento de control de operaciones y en el de calidad. Habitualmente, se estima entre un rango del 10 y el 20 % del coste de mano de obra directa. En este caso, se toma un valor medio del 15%. (4)

Por último, el gasto en los seguros depende directamente del tipo de proceso que se esté llevando a cabo y, normalmente, se estima que se corresponde al 1 % del coste del capital inmovilizado. (4)

#### 4.1.5. Costes de explotación

Finalmente, en la Tabla 7 se recogen los costes de las distintas partidas calculadas anteriormente.

*Tabla 7. Importe de las partidas de los costes de explotación*

<b>Costes de explotación</b>	
<b>Partida</b>	<b>Importe, €</b>
Materias primas y otras sustancias	55.608.884,01
Servicios generales	43.745.727,29
Mano de obra directa	483.200,00
Mano de obra indirecta	72.480,00
Mantenimiento y reparaciones	2.280.377,34
Operaciones de abastecimiento	342.056,60
Gastos de laboratorio	72.480,00
Seguros	619.857,94
<b>Total</b>	<b>103.225.063,19</b>

#### 4.2. Costes de gestión

Entre los costes de gestión se encuentran los costes administrativos, los gastos comerciales y los gastos en investigación.

Los costes administrativos incluyen los salarios de los secretarios, contables, administrativos, entre otros e incluyen los costes relacionados con el material de oficina. Para una estimación se aproxima que se corresponde a un valor entre el 15 y 25 % del coste de mano de obra. Por tanto, se tomará un porcentaje medio de 20%. (4)

Los costes comerciales se refieren a los costes utilizados en el marketing y la distribución, es decir, la cantidad de dinero empleada en vender el producto. Como es evidente, aquí se incluyen los salarios, dispositivos y recursos que necesitan la gente que constituye el departamento de ventas. Se estima en un rango entre el 2 y el 20 % del coste total del producto. Se toma un valor medio de 10%. (4)

Por último, los costes de investigación y desarrollo que incluyen los salarios de científicos y personal destinado a este departamento, así como el coste del equipo y de la maquinaria necesaria. Esto es fundamental ya que una empresa debe estar en constante desarrollo para mejorar y optimizar su proceso. Se estima como un 5 % de los costes de explotación del producto. (4)

En la Tabla 8 se indica el importe de los costes de gestión, calculados a partir de los costes de explotación previamente indicados.

Tabla 8. Costes de gestión de la planta

<b>Costes de gestión</b>	
<b>Partida</b>	<b>Importe, €</b>
Gastos administrativos	111.136,00
Gastos comerciales	10.332.506,32
Investigación	5.161.253,16
<b>Total</b>	<b>15.594.895,48</b>

## 5. Ingresos por ventas

Los beneficios obtenidos en la planta vienen directamente de la venta del anhídrido acético. El precio por el que se vende se mencionó en el *Documento I. Memoria*. Se tomará el último valor obtenido para el año 2023 de 1,36 €/kg y, como se tiene una capacidad de 100.000 toneladas anuales, se obtiene un beneficio anual de 136.000.000,0 €.

## 6. Amortizaciones

El capital inmovilizado sufre una pérdida de valor que bien se produce por el paso del tiempo o por su obsolescencia técnica. A la cuantificación de esta pérdida se le conoce como amortización. Esto supone pérdidas para la empresa, por lo que debe ser calculado para poder reconocer dicha pérdida como un gasto deducible fiscalmente. Por tanto, la cuota de amortización anual se trata de un parámetro fundamental en la viabilidad económica ya que representa la cantidad que compensa dicha pérdida. (8)

En este caso, se empleará un método de amortización lineal en el que las cuotas son constantes a lo largo de la vida útil de la planta. Cabe destacar que se considera que el valor del terreno no se desprecia con el tiempo, por esa razón su valor no puede ser compensado. Se emplea la *Ecuación 3*. (9)

$$\text{Amortización} = \frac{\text{Costes fijos} - \text{Coste parcela}}{\text{Vida útil de la planta}} \quad [3]$$

Se lleva a cabo la amortización lineal, tomando como vida útil de la planta un valor de 20 años. En la Tabla 9 se indican los importes empleados para el cálculo de la amortización, así como la cuota de amortización anual obtenida.

Tabla 9. Cuota anual de amortizado

<b>Amortización</b>	
Costes fijos	61.985.794,36
Coste de la parcela	15.625.737,00
Vida útil	20 años
<b>Cuota de amortización anual</b>	<b>2.318.002,87</b>

## 7. Flujos de caja

Tras el cálculo de los parámetros económicos previos ya se puede pasar al cálculo de los flujos de caja, los cuales representan las entradas y salidas de capital que ocurren en la empresa a lo largo de su vida útil. Sin embargo, se ha de tener en cuenta la inflación a lo largo del tiempo, es decir, como va cambiando el valor del dinero durante la vida de la planta. Por esta razón, se ha establecido una tasa de inflación mediante el IPC del 3,3%, valor medio del año 2024. (10)

Para determinar el aumento de los ingresos y costes anuales con el tiempo se emplea la *Ecuación 4*, donde  $i$  se corresponde a la tasa de inflación y  $j$  al año correspondiente.

$$C_{\text{año } j} = C_{\text{año } 0} \cdot (1 + i)^j \quad [4]$$

Posteriormente se ha de calcular los beneficios antes de impuestos. Se determinan restándoles a los ingresos anuales los pagos totales anuales, es decir, los costes totales de cada año más el interés correspondiente por el préstamo (*Ecuación 5*).

$$\textit{Beneficio Bruto} = \textit{Ingresos} - \textit{Pagos totales} \quad [5]$$

A continuación se ha de determinar la cantidad de impuestos que se ha de pagar. Según la Ley 27/2014, es decir, la Ley del Impuesto sobre Sociedades, se corresponde con el 25 % del beneficio bruto resultante. (11)

$$\textit{Impuestos} = \textit{Beneficio Bruto} \cdot 0,25 \quad [6]$$

Una vez determinados, ya se puede obtener el beneficio neto de la empresa mediante la *Ecuación 7*.

$$\textit{Beneficio neto} = \textit{Beneficio bruto} - \textit{Impuestos} \quad [7]$$

Finalmente, ya se pueden determinar los flujos de caja correspondiente a cada año  $j$ , siendo estos el beneficio neto más la amortización menos el principal del préstamo. Su cálculo se corresponde con la *Ecuación 8*. Por otro lado, también se pueden determinar los flujos de caja acumulados con la *Ecuación 9*, donde  $I_0$  hace referencia a la inversión inicial.

$$FC_j = \textit{Beneficio neto} + \textit{Amortización} - \textit{Principial} \quad [8]$$

$$FCA_j = -I_0 + \sum_{j=1}^j FC_j \quad [9]$$

En la Tabla 10 se muestran los flujos de caja obtenidos para los 20 años de vida útil de la planta de producción de anhídrido acético.

Anexo III: Análisis de viabilidad económica  
 Planta de producción de acético por carbonilación de acetato de metilo

Tabla 10. Flujos de caja de la planta a lo largo de su vida útil

Año	Ingreso anual actualizado (€)	Intereses (€)	Gasto anual actualizado (€)	Coste anual (€)	Beneficio bruto (€)	Impuestos (€)	Beneficio neto (€)	Amortización (€)	Principal (€)	Flujo de caja (€)	Flujo de caja acumulado (€)
0										-68.846.734,86	-68.846.734,86
1	140.080.000,00	2.753.869,39	122.384.557,43	125.138.426,82	14.941.573,18	3.735.393,29	11.206.179,88	2.318.002,87	1.665.682,71	11.858.500,04	-56.988.234,81
2	144.282.400,00	2.670.585,26	126.056.094,15	128.726.679,41	15.555.720,59	3.888.930,15	11.666.790,44	2.318.002,87	1.748.966,84	12.235.826,47	-44.752.408,35
3	148.610.872,00	2.583.136,92	129.837.776,98	132.420.913,89	16.189.958,11	4.047.489,53	12.142.468,58	2.318.002,87	1.836.415,18	12.624.056,26	-32.128.352,08
4	153.069.198,16	2.491.316,16	133.732.910,29	136.224.226,44	16.844.971,72	4.211.242,93	12.633.728,79	2.318.002,87	1.928.235,94	13.023.495,71	-19.104.856,37
5	157.661.274,10	2.394.904,36	137.744.897,60	140.139.801,96	17.521.472,15	4.380.368,04	13.141.104,11	2.318.002,87	2.024.647,74	13.434.459,24	-5.670.397,13
6	162.391.112,33	2.293.671,97	141.877.244,52	144.170.916,50	18.220.195,83	4.555.048,96	13.665.146,87	2.318.002,87	2.125.880,13	13.857.269,62	8.186.872,49
7	167.262.845,70	2.187.377,97	146.133.561,86	148.320.939,83	18.941.905,87	4.735.476,47	14.206.429,40	2.318.002,87	2.232.174,13	14.292.258,14	22.479.130,63
8	172.280.731,07	2.075.769,26	150.517.568,71	152.593.337,98	19.687.393,09	4.921.848,27	14.765.544,82	2.318.002,87	2.343.782,84	14.739.764,85	37.218.895,48
9	177.449.153,00	1.958.580,12	155.033.095,78	156.991.675,89	20.457.477,11	5.114.369,28	15.343.107,83	2.318.002,87	2.460.971,98	15.200.138,72	52.419.034,19
10	182.772.627,59	1.835.531,52	159.684.088,65	161.519.620,17	21.253.007,42	5.313.251,86	15.939.755,57	2.318.002,87	2.584.020,58	15.673.737,85	68.092.772,05
11	188.255.806,42	1.706.330,49	164.474.611,31	166.180.941,80	22.074.864,62	5.518.716,15	16.556.148,46	2.318.002,87	2.713.221,61	16.160.929,72	84.253.701,77
12	193.903.480,61	1.570.669,41	169.408.849,65	170.979.519,06	22.923.961,55	5.730.990,39	17.192.971,16	2.318.002,87	2.848.882,69	16.662.091,34	100.915.793,12
13	199.720.585,03	1.428.225,28	174.491.115,14	175.919.340,41	23.801.244,62	5.950.311,15	17.850.933,46	2.318.002,87	2.991.326,82	17.177.609,51	118.093.402,62
14	205.712.202,58	1.278.658,93	179.725.848,59	181.004.507,53	24.707.695,05	6.176.923,76	18.530.771,29	2.318.002,87	3.140.893,16	17.707.880,99	135.801.283,62
15	211.883.568,66	1.121.614,28	185.117.624,05	186.239.238,33	25.644.330,33	6.411.082,58	19.233.247,75	2.318.002,87	3.297.937,82	18.253.312,79	154.054.596,41
16	218.240.075,72	956.717,39	190.671.152,77	191.627.870,16	26.612.205,56	6.653.051,39	19.959.154,17	2.318.002,87	3.462.834,71	18.814.322,32	172.868.918,73
17	224.787.277,99	783.575,65	196.391.287,35	197.174.863,00	27.612.414,99	6.903.103,75	20.709.311,24	2.318.002,87	3.635.976,45	19.391.337,66	192.260.256,39
18	231.530.896,33	601.776,83	202.283.025,97	202.884.802,80	28.646.093,53	7.161.523,38	21.484.570,15	2.318.002,87	3.817.775,27	19.984.797,74	212.245.054,13
19	238.476.823,22	410.888,06	208.351.516,75	208.762.404,82	29.714.418,40	7.428.604,60	22.285.813,80	2.318.002,87	4.008.664,04	20.595.152,63	232.840.206,77
20	245.631.127,92	210.454,86	214.602.062,26	214.812.517,12	30.818.610,80	7.704.652,70	23.113.958,10	2.318.002,87	4.209.097,24	21.222.863,73	254.063.070,49

## 8. Valor neto actual (VAN)

El valor actualizado neto es un parámetro de rentabilidad que representa la diferencia entre los flujos de caja actualizados que produce una inversión, a una tasa de interés, y las inversiones actualizadas, a esa misma tasa, requeridas para hacer la inversión. Informa de los beneficios de un proyecto en el momento actual. (12)

$$VAN = \sum_{j=1}^j \frac{FC_j}{(1+k)^j} - I_o \quad [10]$$

Donde  $k$  es la tasa de interés o la tasa de descuento aplicada. Este parámetro nos permite determinar cuál es el valor actual del dinero que se recibirá en un futuro. El valor de esta tasa de descuento seleccionada es de 14 %. (13)

Si el VAN resultante es positivo significa que el proceso es rentable. En este caso se obtiene un valor de 25.613.948,06 € lo que significa que el proyecto es rentable y que se recuperará la inversión realizada al inicio del proyecto.

## 9. Tasa interna de retorno (TIR)

El TIR es un parámetro de rentabilidad que indica que tasa de interés iguala el valor actual de los flujos de un proyecto con la inversión inicial, es decir, es la tasa de descuento para la cual el VAN es igual a cero. Se determina mediante la *Ecuación 11*. (12)

$$0 = \sum_{j=1}^j \frac{FC_j}{(1+TIR)^j} - I_o \quad [11]$$

Para analizar el resultado obtenido se debe comparar con la tasa de descuento del proyecto. Si es mayor, significa que el proyecto es viable y por tanto se obtendrán beneficios. Por otro lado, que sea menor significa que el proyecto no es rentable.

En este caso, se ha obtenido una TIR de 19,46 %, valor superior a la tasa de descuento empleada para el VAN que fue del 14 %. Por tanto, el proyecto que se va a llevar a cabo es aceptable y se espera que sea rentable.

## 10. Plazo de recuperación (*Pay-back*)

El *pay-back* no es un parámetro de rentabilidad, pero nos permite conocer cuánto tiempo se tarda en recuperar la inversión inicial. Es decir, en qué momento los flujos de caja acumulados igualan a la inversión inicial. Se determina con la *Ecuación 12*. (14)

$$I_o = \sum_{j=1}^j FCA_j \quad [12]$$

Este parámetro presenta dos desventajas. La primera es que no considera las posibles pérdidas que se pueden producir en los años posteriores a recuperar la inversión. La segunda es que no considera la inflación, es decir, la pérdida de poder adquisitivo con el tiempo. (14)

Aun así, este parámetro se emplea para complementar el estudio de rentabilidad, ya que posteriormente en el apartado 11. *Análisis de sensibilidad* nos permitirá comparar en que situaciones se recupera más rápidamente el capital invertido.

En la Figura 1 se representan los flujos de caja acumulados con respecto al tiempo. Como se observa, el *pay-back* del presente proyecto es de seis años. Por tanto, la inversión inicial se recupera rápidamente, por lo que se reitera la rentabilidad del proyecto.

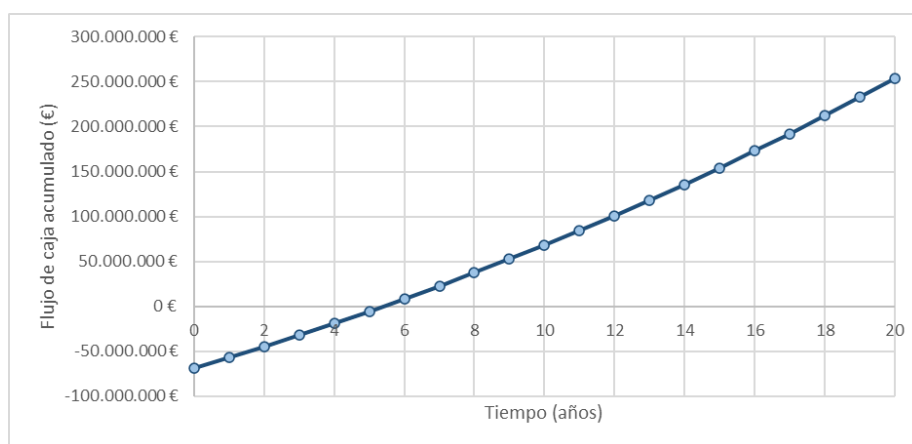


Figura 1. *Pay-back* de la planta de producción de anhídrido acético (Elaboración propia)

## 11. Análisis de sensibilidad

Para realizar una viabilidad económica adecuada se debe estudiar cuales son las variables que tienen un mayor efecto en la rentabilidad. Es decir, se debe conocer si la variación de algún parámetro supone un riesgo para la viabilidad del proyecto.

En este caso se estudiará que pasaría si aumentase o disminuyese el precio de venta del anhídrido acético o el precio de las materias primas. Asimismo, como el presupuesto realizado en el *Documento V. Presupuesto* es una estimación, ya que no se cuentan con diseños detallados, se analizará lo que sucedería si incrementara o disminuyera la cuantía establecida.

### 11.1. Variación del precio de venta del $\text{Ac}_2\text{O}$

Uno de los parámetros más relevantes para la viabilidad de la planta es el precio del producto que se desea comercializar. En el análisis se ha considerado que el precio de anhídrido acético era 1360 € por tonelada. A continuación, se analizará que le sucedería a la rentabilidad si se disminuyese el precio un 10 o 20 % y que pasaría si se aumentase un 10 %. En la Tabla 11 se presentan los parámetros de rentabilidad obtenidos en las situaciones indicadas.

Tabla 11. Análisis de sensibilidad al precio del Ac<sub>2</sub>O

	<b>-20 % del precio base</b>	<b>-10 % del precio base</b>	<b>10 % del precio base</b>
<b>Precio de venta</b>	1088 €/ton	1224 €/ton	1496 €/ton
<b>VAN</b>	-140.301.433,27 €	-57.343.742,61 €	108.571.638,73 €
<b>TIR</b>	-	-	35,43 %
<b>Pay-back</b>	Nunca	Nunca	3 años

Una bajada del precio de venta de un 20 o 10 % haría que el proyecto ya no fuera rentable y no se recuperaría la inversión inicial en ningún momento durante la vida de la planta. Este hecho convierte el precio del anhídrido en un parámetro crítico para la rentabilidad del proyecto. Por otro lado, como era de esperar, un aumento de los precios conlleva mayores beneficios y un plazo de recuperación más rápido.

### 11.2. Variación del precio de las materias primas

Otro parámetro con una gran influencia en la rentabilidad es el precio de compra de las materias primas del proyecto, es decir, el precio del acetato de metilo y del monóxido de carbono. En el análisis se ha considerado que el precio del MeOAc era 690 € por tonelada y del CO de 200 € por tonelada. A continuación se analizará que le sucedería a la rentabilidad si se disminuyese el precio un 10 % y que pasaría si se aumentase un 10 o 30 %. En la Tabla 12 se presentan los parámetros de rentabilidad obtenidos en las situaciones indicadas.

Tabla 12. Análisis de sensibilidad al precio de adquisición de las materias primas

	<b>-10 % del precio base</b>	<b>+10 % del precio base</b>	<b>+30 % del precio base</b>
<b>Precio del MeOAc</b>	612 €/ton	748 €/ton	884 €/ton
<b>Precio del CO</b>	180 €/ton	220 €/ton	260 €/ton
<b>VAN</b>	63.966.071,51 €	-12.738.175,39 €	-89.442.422,29 €
<b>TIR</b>	27,01 %	11,04 %	-
<b>Pay-back</b>	4 años	9 años	Nunca

Como se observa, la bajada provoca un aumento de los beneficios del proyecto y un mejor *pay-back*. En cambio, el aumento provoca una disminución considerable y el proyecto dejaría de ser rentable para los dos casos estudiados, ya que se obtiene un VAN negativo y una TIR por debajo de la tasa de descuento.

### 11.3. Variación de la inversión inicial

Como se indicó en el *Documento V. Presupuesto*, el valor obtenido es una estimación que se encuentra dentro de la Clase IV, lo que significa que la precisión establecida es de  $\pm 30$  %. Por ello, se determinará como afecta a la rentabilidad de la planta si se trabajara con los límites del rango indicado. Los resultados de los parámetros de rentabilidad obtenidos en esas situaciones se presentan en la Tabla 13.

Tabla 13. Análisis de sensibilidad a la inversión inicial

	<b>-30 % del precio base</b>	<b>+30 % del precio base</b>
<b>Inversión inicial</b>	48.192.714,40 €	89.500.755,32 €
<b>VAN</b>	53.974.094,79 €	-2.746.198,67 €
<b>TIR</b>	29,61 %	13,53 %
<b>Pay-back</b>	4 años	8 años

La bajada de la inversión necesaria seguiría resultando en un proyecto rentable, que obtiene un VAN positivo y una TIR por encima de la tasa de descuento. Además, el tiempo de recuperación de la inversión sigue siendo rápido, ya que se recupera en el primer cuarto de vida de la planta. En cambio, un aumento en la estimación de un 30 % provocaría que el proyecto dejara de ser rentable, aunque se seguiría recuperando la inversión inicial. En concreto, para que la estimación del desembolso inicial no resultará en un proyecto no rentable, no se debe superar un error de más del 27 %. Como este porcentaje está cerca del límite superior, esto no se considera un parámetro crítico.

## 12. Conclusión de la viabilidad económica

Para concluir, la planta de producción de anhídrido acético por carbonilación de acetato de metilo se considera un proyecto con una rentabilidad considerable. Se obtiene un VAN positivo, una TIR superior a la tasa de descuento y un *pay-back* muy rápido.

Sin embargo, hay diferentes parámetros críticos que pueden afectar de gran manera a la rentabilidad. El primero de ellos es, sin lugar a dudas, el precio de venta del anhídrido acético, ya que si se produjera una caída del 10 % el proyecto ya no sería rentable. La caída de los precios que podría soportar la planta sería de un 3 %, a partir de ese porcentaje ya no se obtendrían beneficios.

Otro parámetro que afecta de manera considerable a la planta son los precios de las materias primas, cuyo aumento de valor llevaría a que el proyecto dejara de ser rentable. En concreto, solo se puede soportar un aumento de los precios de un 6,5 %.

## 13. Bibliografía

1. **CARBUROS METÁLICOS.** Air products. *Botellas de hidrógeno.* [En línea] [Citado el: 15 de Junio de 2024.] <https://shop.airproducts.com/emea/es/es-ES/products/62242/?b=gas&c=hydrogen>.
2. **BANCO DE ESPAÑA.** *Informe de la Situación Financiera de los Hogares y las Empresas. 2º semestre 2023.* Madrid : s.n., 2023. <https://doi.org/10.53479/35992>.
3. **BROWN, T.** *Engineering Economics and Economic Design for Process Engineers.* Cincinnati : Taylor & Francis Group, 2006. ISBN 978-1-4200-0810-4 .
4. **PETERS, M. S. y TIMMERHAUS, K. D.** *PLANT DESIGN AND ECONOMICS FOR CHEMICAL ENGINEERS.* 5ª ed. Colorado : McGraw-Hill, Inc., 2003. ISBN 0-07-119872-5.

5. **MINISTERIO DE INDUSTRIA Y TURISMO.** Precio Neto de la Electricidad para Uso Doméstico y Uso Industrial. [En línea] 20 de Mayo de 2024. [Citado el: 25 de Mayo de 2024.] [https://www.mintur.gob.es/es-es/IndicadoresyEstadisticas/BoletinEstadistico/Energ%C3%ADa%20y%20emisiones/4\\_12.pdf](https://www.mintur.gob.es/es-es/IndicadoresyEstadisticas/BoletinEstadistico/Energ%C3%ADa%20y%20emisiones/4_12.pdf).

6. **TURTON, R., y otros.** *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 3ª ed. Boston : Pearson Education, Inc., 2009. ISBN 978-0-13-512966-1.

7. **ALMA CAREER.** Paylab España. *Operador de máquinas Industria Química*. [En línea] [Citado el: 12 de Mayo de 2024.] <https://www.paylab.com/es/salarios/industria-quimica/operador-de-maquinas?lang=es>.

8. **PLANGENERALCONTABLE.** PlanGeneralContable. *Amortización del inmovilizado*. [En línea] 2005. [Citado el: 26 de Abril de 2024.] <https://www.plangeneralcontable.com/?tit=amortizacion-de-inmovilizado&name=Manuales&fid=el0adaa#:~:text=La%20amortizaci%C3%B3n%20contable%20del%20inmovilizado,bien%20sea%20material%20o%20inmaterial..>

9. —. PlanGeneralContable. *Amortización de inmovilizado- Método lineal o de cuotas fijas*. [En línea] 2005. [Citado el: 26 de Abril de 2024.] <https://www.plangeneralcontable.com/?tit=amortizacion-de-inmovilizado-metodo-lineal-o-de-cuotas-fijas&name=Manuales&fid=el0bcac>.

10. **DATOSMACRO.** Expansion / Datosmacro.com. [En línea] Abril de 2024. [Citado el: 25 de Mayo de 2024.] <https://datosmacro.expansion.com/ipc-paises/espana>.

11. **MINISTERIO DE LA PRESIDENCIA, JUSTICIA Y RELACIONES CON LAS CORTES.** Agencia Estatal Boletín Oficial del Estado. [En línea] 20 de Febrero de 2024. [Citado el: 26 de Mayo de 2024.] <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-2014-12328>.

12. **JUNTA DE EXTREMADURA.** Extremadura empresarial. *El TIR VAN una herramienta para analizar proyecto*. [En línea] 13 de Septiembre de 2023. [Citado el: 25 de Mayo de 2024.] [https://www.extremaduraempresarial.es/blog\\_escuela/el-tir-van-una-herramienta-para-analizar-proyecto/#:~:text=Si%20el%20VAN%20es%20positivo,para%20evaluar%20proyectos%20de%20inversi%C3%B3n..](https://www.extremaduraempresarial.es/blog_escuela/el-tir-van-una-herramienta-para-analizar-proyecto/#:~:text=Si%20el%20VAN%20es%20positivo,para%20evaluar%20proyectos%20de%20inversi%C3%B3n..)

13. **VÁZQUEZ BURGUILLO, R.** Economipedia. [En línea] [Citado el: 11 de Junio de 2024.] <https://economipedia.com/definiciones/tasa-descuento.html>.

14. **VELAYOS MORALES, V.** Economipedia. [En línea] [Citado el: 11 de Junio de 2024.] <https://economipedia.com/definiciones/payback.html>.

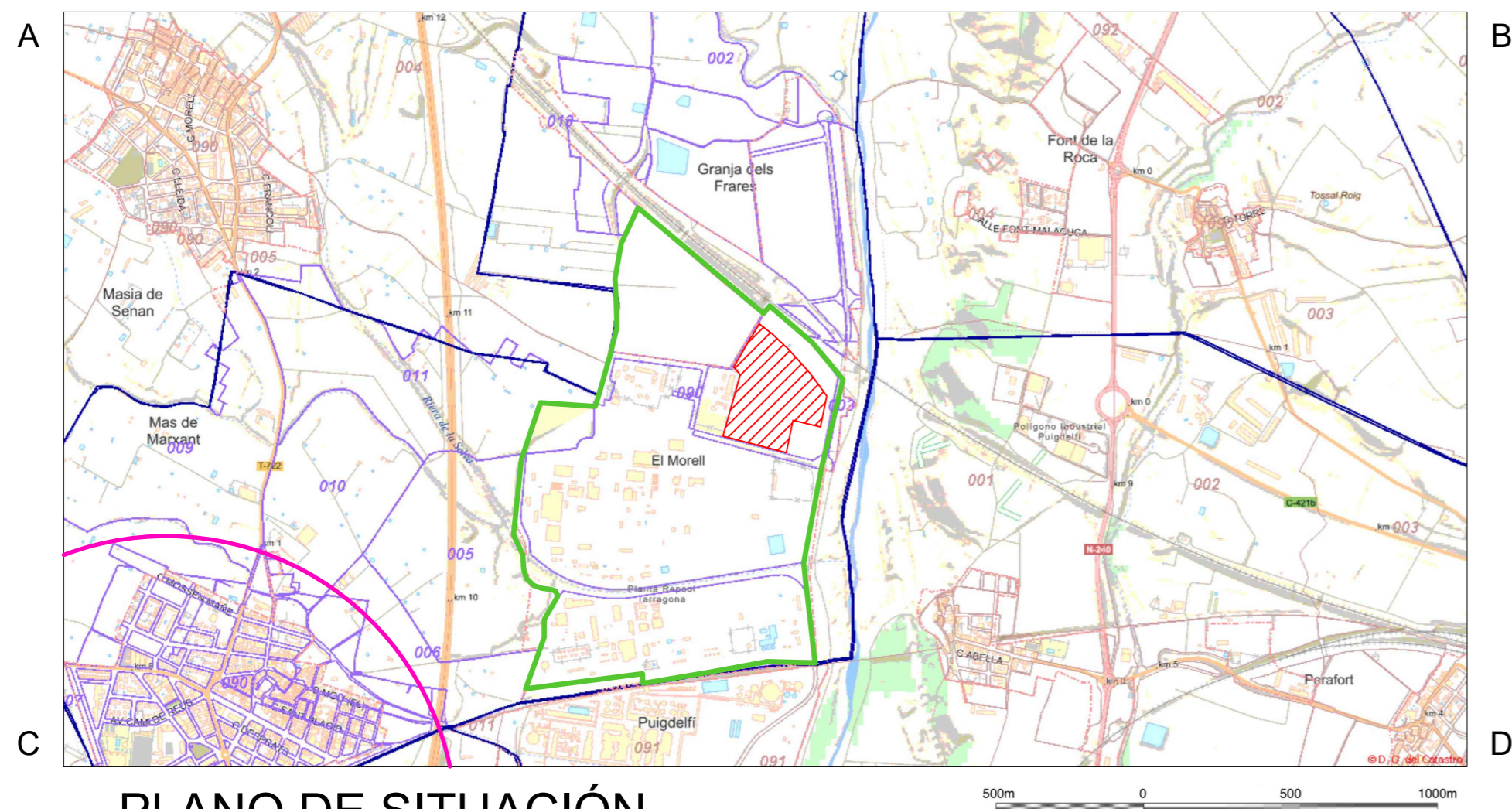
---

DOCUMENTO II:  
PLANOS

---

## ÍNDICE

1. Plano de situación y emplazamiento
2. Plano de implantación
3. Diagrama de flujo
4. Diagrama de tuberías e instrumentación de la sección 100 (P&ID 1)
5. Diagrama de tuberías e instrumentación de la sección 200 (P&ID 2)
6. Reactor R-101
7. Columna de destilación T-202



**PLANO DE SITUACIÓN**  
E : 1/20000



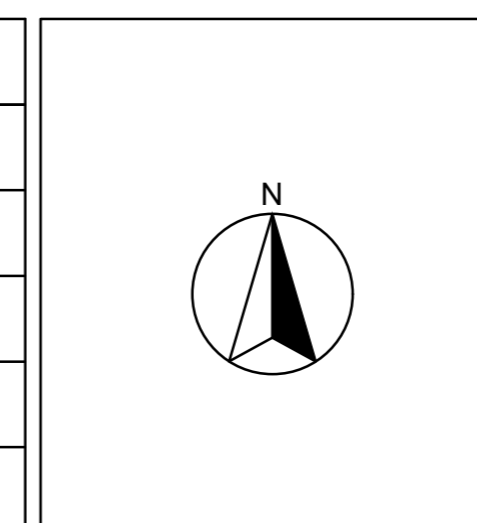
**PLANO DE EMPLAZAMIENTO**  
E : 1/5000

Coordenadas Plano de Situación			
A	[349,106 ; 4,563,987]	B	[353,906 ; 4,563,987]
C	[349,106 ; 4,561,387]	D	[353,906 ; 4,561,387]

Coordenadas Plano de Emplazamiento			
A	[350,926 ; 4,562,991]	B	[352,126 ; 4,562,991]
C	[350,926 ; 4,562,341]	D	[352,126 ; 4,562,341]

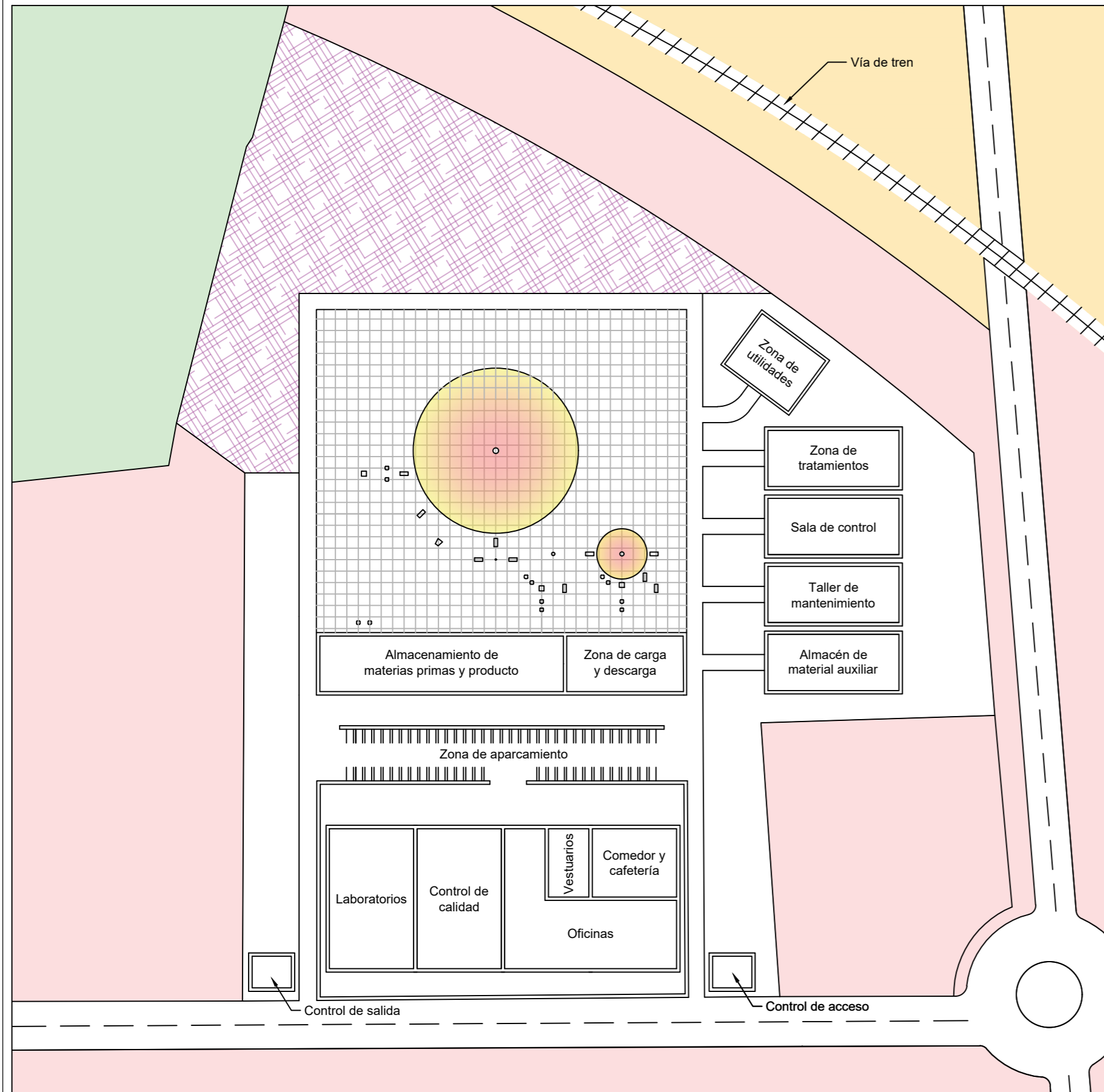
MUNICIPIO	El Morell
PROVINCIA	Tarragona (Cataluña)
POLÍGONO	Polígono industrial del Morell
Nº DE POLÍGONO	90
Nº DE PARCELA	3
SUPERFICIE	102.129 m <sup>2</sup>

LEYENDA	
	Parcela seleccionada
	El Morell
	Polígono industrial
	Parcelas ocupadas
	Parcela sin ocupar



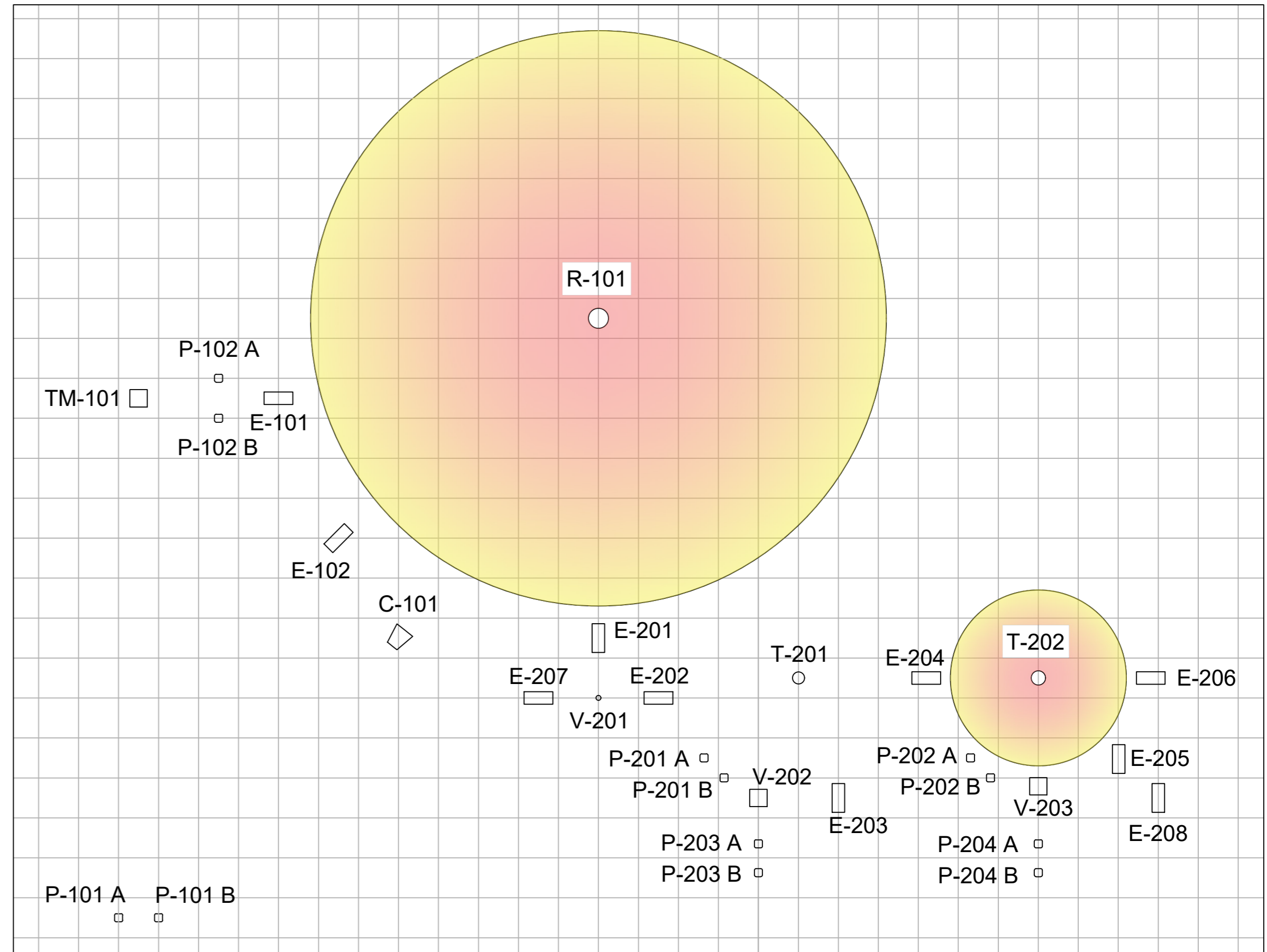
UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO		
<b>PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ANHÍDRIDO ACÉTICO POR CARBONILACIÓN DE ACETATO DE METILO</b>		
AUTORES: RODRIGO TASENDE REBOREDO JACOBO TORRES PÉREZ	SINATURAS: 	ESCALA: VER MARZO 2024
<b>PLANO DE SITUACIÓN Y DE EMPLAZAMIENTO</b>		<b>1/7</b>

IMPLANTACIÓN



ESCALA 1:2000

ZONA DE PROCESO

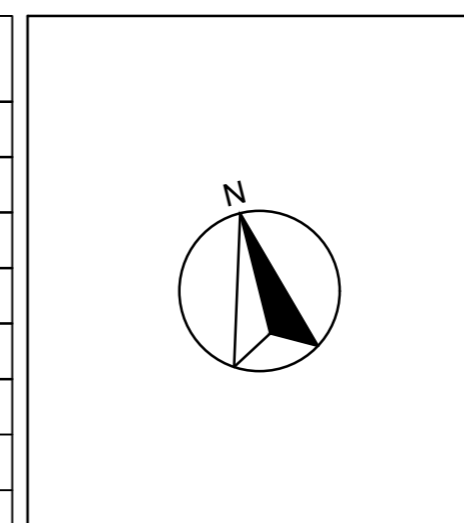


ESCALA 1:500

LEYENDA	
	Zona de expansión
	Área de exposición en caso de incendio o explosión
	Otras parcelas
	Parcelas ocupadas o no disponibles
	Parcela sin ocupar

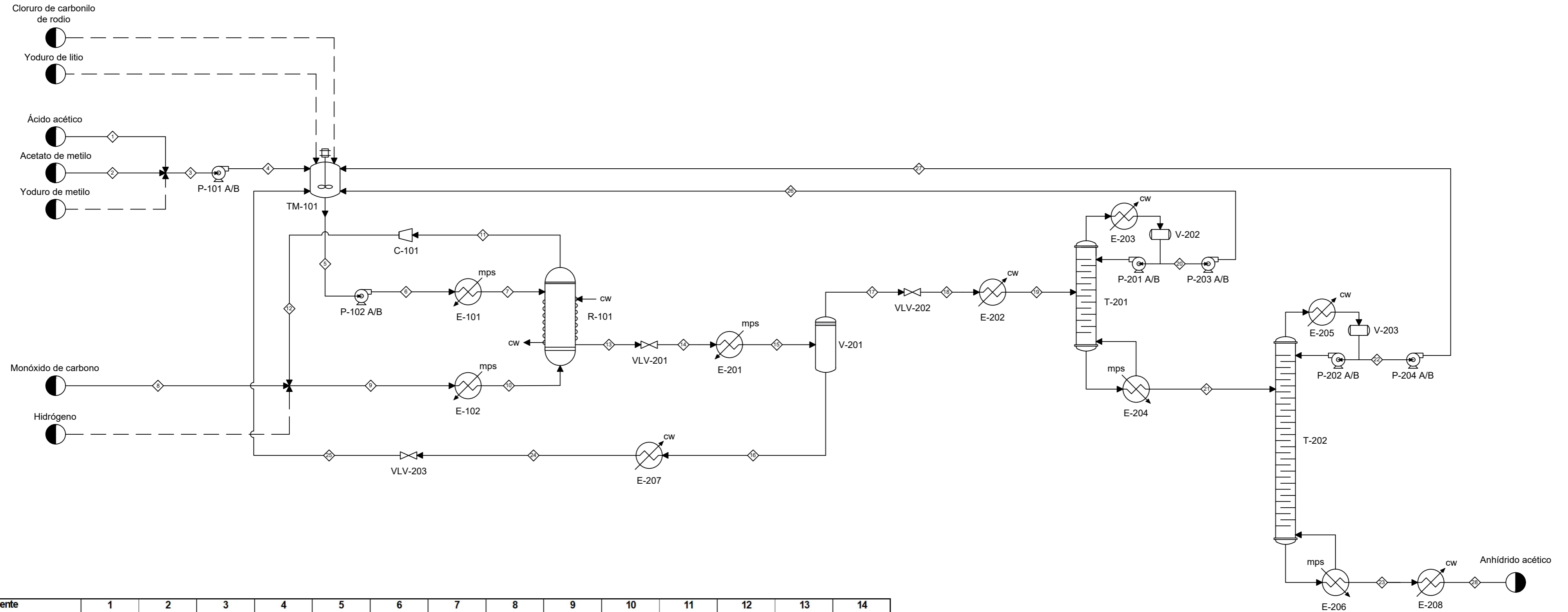
NOTAS	
1.-	Las dimensiones de los equipos que conforman la zona de proceso están representados con unas dimensiones aproximadas a excepción del reactor R-101 y la columna de destilación T-202.
2.-	Las distancias mínimas de seguridad se tomaron de la <i>Global Asset Protection Services</i> , dirigida a plantas químicas, a excepción del reactor R-101 y la columna de destilación T-202 que se utilizan las calculadas mediante el índice DOW.
3.-	La distancia entre intersecciones de la malla de acotación representa 5 metros.

LOCALIZACIÓN	
MUNICIPIO	El Morell
POLÍGONO	Polígono industrial del Morell
PROVINCIA	Tarragona
CCAA	Cataluña
Nº DE POLÍGONO	90
Nº DE PARCELA	3
SUPERFICIE	102.129 m <sup>2</sup>



UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO		
<b>PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ANHÍDRIDO ACÉTICO POR CARBONILACIÓN DE ACETATO DE METILO</b>		
AUTORES: RODRIGO TASENDE REBOREDO JACOBO TORRES PÉREZ	SINATURAS: 	ESCALA: VER JUNIO 2024
<b>PLANO DE IMPLANTACIÓN</b>		<b>2/7</b>

P-101 A/B	P-102 A/B	C-101	R-101	E-201	V-201	VLV-202	T-201	V-202	P-203 A/B	T-202	V-203	P-204 A/B	E-208
Bomba	Bomba	Compresor	Reactor	Intercambiador de calor	Separador flash	Válvula	Torre de destilación	Tanque de reflujo	Bomba	Torre de destilación	Tanque de reflujo	Bomba	Intercambiador de calor
TM-101	E-101	E-102	VLV-201	E-207	VLV-203	E-202	E-203	P-201 A/B	E-204	E-205	P-202 A/B	E-206	
Tanque de mezcla	Intercambiador de calor	Intercambiador de calor	Válvula	Intercambiador de calor	Válvula	Intercambiador de calor	Intercambiador de calor	Bomba	Intercambiador de calor	Intercambiador de calor	Bomba	Intercambiador de calor	



Nº de corriente	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Temperatura (°C)	20,00	20,00	20,00	20,11	63,09	65,64	175,00	20,00	108,53	175,00	175,00	186,96	175,00	134,95
Presión inicial (bar)	1,01	1,01	1,01	2,89	1,25	50,59	50,20	51,50	50,91	50,41	48,59	51,06	51,41	3,01
Presión final (bar)	1,01	1,01	1,01	1,25	1,25	50,55	50,00	50,91	50,76	50,00	48,13	50,91	51,39	3,01
Fracción de vapor	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,00	0,27
Flujomolar (kmol/h)	123,47	0,47	123,93	123,93	320,59	320,59	320,59	123,31	259,61	259,61	136,29	136,29	320,59	320,59
Flujomáscico (kg/h)	9144,19	28,07	9172,26	9172,26	28375,48	28375,48	28375,48	3454,12	6934,40	6934,40	3480,28	3480,28	31829,60	31829,60
Acetato de metilo	9135,05	0,00	9135,05	9135,05	12180,06	12180,06	12180,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3045,02	3045,02
Cloruro de carbonilo de rodio	0,00	0,00	0,00	0,00	9,13	9,13	9,13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	9,13	9,13
Yoduro de litio	0,00	0,00	0,00	0,00	565,90	565,90	565,90	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	565,90	565,90
Yoduro de metilo	0,00	0,00	0,00	0,00	8834,89	8834,89	8834,89	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	8834,89	8834,89
Acido acético	9,14	28,07	37,22	37,22	3385,24	3385,24	3385,24	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3385,24	3385,24
Monóxido de carbono	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3454,12	6908,23	6908,23	3454,12	3454,12	0,00	0,00
Hidrógeno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	26,17	26,17	26,17	26,17	0,00	0,00
Anhídrido acético	0,00	0,00	0,00	0,00	3400,26	3400,26	3400,26	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	15989,42	15989,42

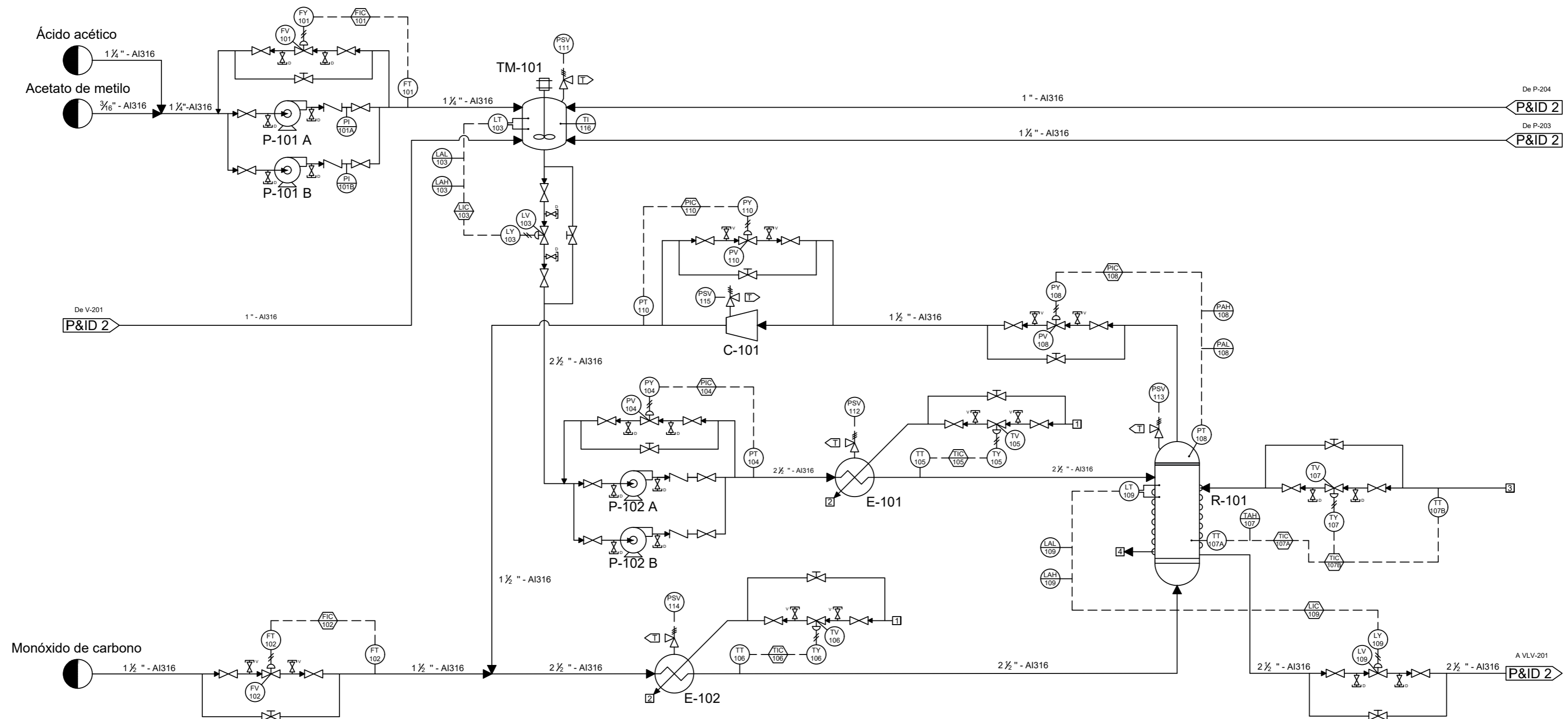
Nº de corriente	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28
Temperatura (°C)	154,80	154,80	154,80	154,80	78,47	46,37	136,05	126,04	143,02	117,00	117,00	46,54	126,22	27,00
Presión inicial (bar)	2,66	2,90	2,65	1,42	1,07	1,01	1,17	1,01	1,69	2,55	1,26	3,58	4,34	1,33
Presión final (bar)	2,65	2,90	2,65	1,42	1,06	1,01	1,15	1,01	1,68	2,52	1,25	1,25	1,25	1,29
Fracción de vapor	0,89	0,00	1,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Flujomolar (kmol/h)	320,59	35,88	284,71	284,71	284,71	101,42	183,29	59,35	123,93	35,88	35,88	101,42	59,35	123,93
Flujomáscico (kg/h)	31829,60	3600,10	28229,50	28229,50	28229,50	11660,23	16569,27	3942,89	12626,38	3600,10	3600,10	11660,23	3942,89	12626,38
Acetato de metilo	3045,02	70,55	2974,46	2974,46	2974,46	2974,46	0,00	0,00	0,00	70,55	70,55	2974,46	0,00	0,00
Cloruro de carbonilo de rodio	9,13	9,13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	9,13	9,13	0,00	0,00	0,00
Yoduro de litio	565,90	565,90	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	565,90	565,90	0,00	0,00	0,00
Yoduro de metilo	8834,89	157,04	8677,85	8677,85	8677,85	8677,85	0,00	0,00	0,00	157,04	157,04	8677,85	0,00	0,00
Acido acético	3385,24	316,88	3068,36	3068,36	3068,36	7,92	3060,44	3023,23	37,22	316,88	316,88	7,92	3023,23	37,22
Monóxido de carbono	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
Hidrógeno	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
Anhídrido acético	15989,42	2480,59	13508,83	13508,83	13508,83	0,00	13508,82	919,66	12589,16	2480,59	2480,59	0,00	919,66	12589,16

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ANHÍDRIDO ACÉTICO POR CARBONILACIÓN DE ACETATO DE METILO

AUTORES: RODRIGO TASENDE REBOREDO JACOBO TORRES PÉREZ	SINATURAS:	ESCALA: N/A
DIAGRAMA DE FLUJO		JUNIO 2024
		3/7

UTILIDADES  
 mps: Vapor de media presión  
 cw: Agua de refrigeración

NOTA  
 Las corrientes en línea discontinua solo se emplean en la puesta en marcha y no son introducidas en el estado estacionario.



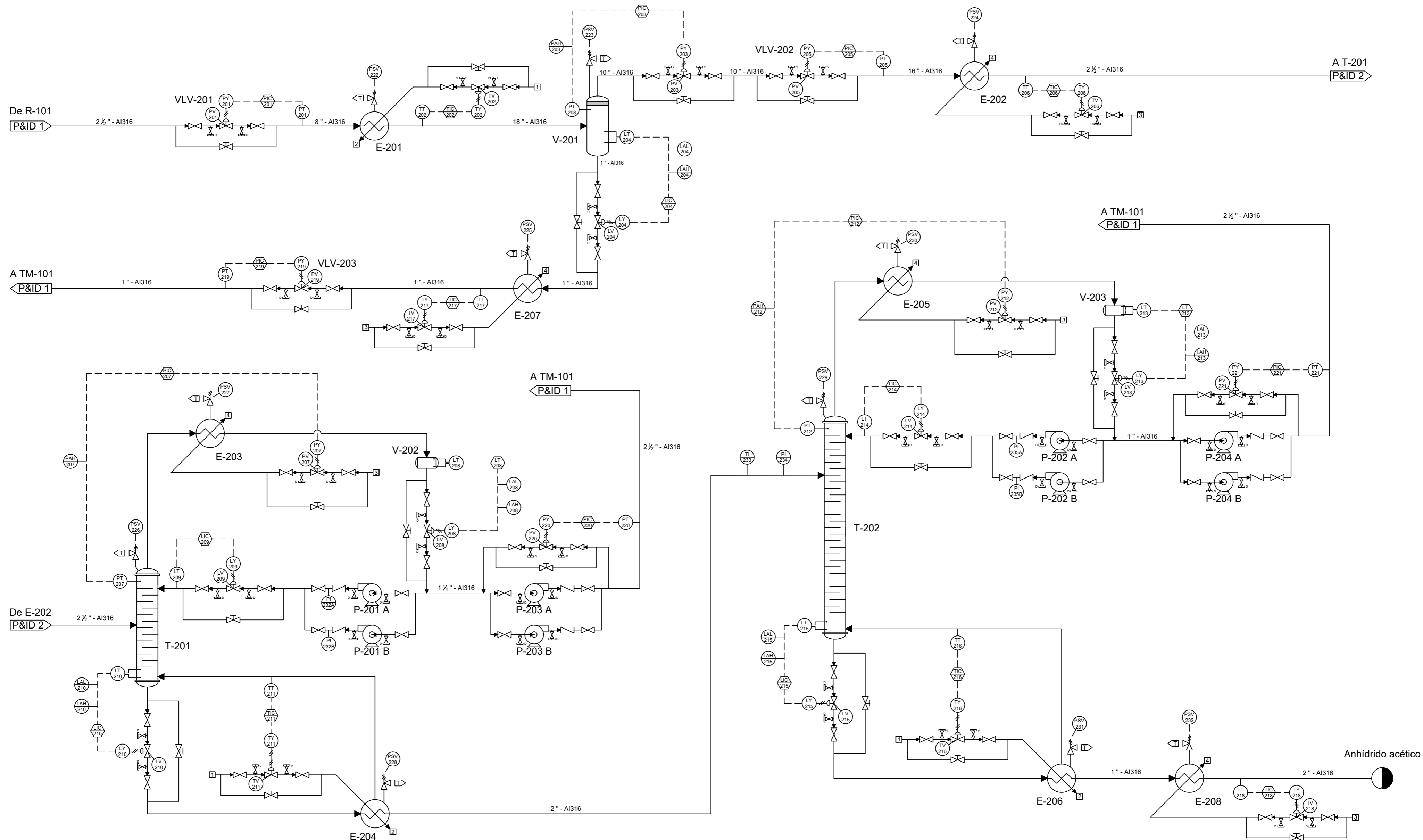
SÍMBOLOS DE INSTRUMENTACIÓN	
	Equipo montado en planta
	Equipo montado en la sala de control
	Controlador del lazo

VÁLVULAS	
	Válvula general abierta
	Válvula de diafragma
	Válvula manual
	Válvula antirretorno
	Drenaje
	Venteo
	Válvula de alivio

NOMENCLATURA DE LAZOS			
A: Sección del proceso BB: Número del lazo			
Letra X	Letras Y		
<b>F</b>	Flujo	<b>T</b>	Transmisor
<b>T</b>	Temperatura	<b>I</b>	Indicador
<b>P</b>	Presión	<b>C</b>	Controlador
<b>L</b>	Nivel	<b>Y</b>	Convertor de señal
		<b>A</b>	Alarma
		<b>L</b>	Bajo
		<b>H</b>	Alto
		<b>V</b>	Válvula

LEYENDA DE LÍNEAS		NOTAS
	Conexión eléctrica	Todas las tuberías van acompañadas de su diámetro nominal en pulgadas (") y de su material de construcción AI316 (Acero inoxidable 316)
	Línea de proceso	
	Corriente neumática	

<b>PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ANHÍDRIDO ACÉTICO POR CARBONILACIÓN DE ACETATO DE METILO</b>		ESCALA: N/A
AUTORES: RODRIGO TASENDE REBOREDO JACOBO TORRES PÉREZ		SINATURAS: 
<b>DIAGRAMA DE TUBERÍAS E INSTRUMENTACIÓN DE LA SECCIÓN 100 (P&amp;ID 1)</b>		<b>4/7</b>



SÍMBOLOS DE INSTRUMENTACIÓN	
	Equipo montado en planta
	Equipo montado en la sala de control
	Controlador del lazo

VÁLVULAS	
	Válvula general abierta
	Válvula de diafragma
	Válvula manual
	Válvula antirretorno

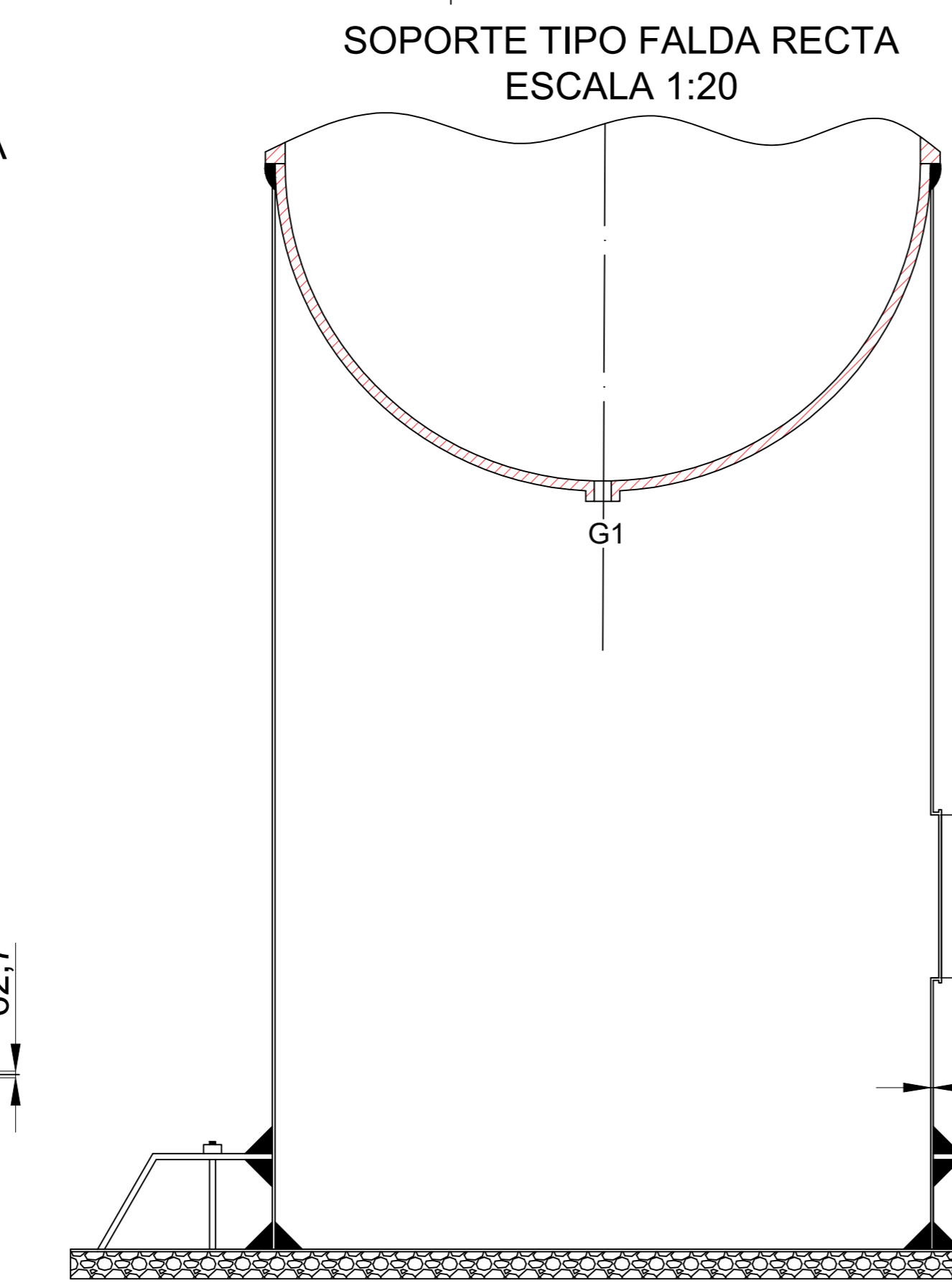
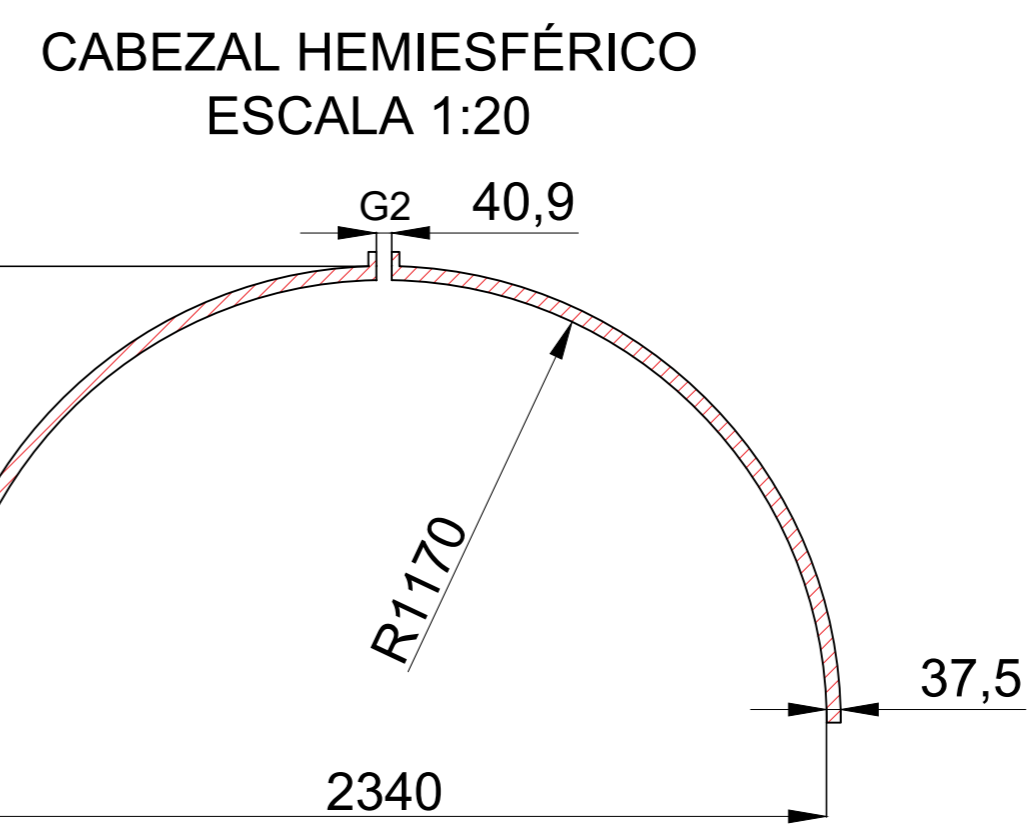
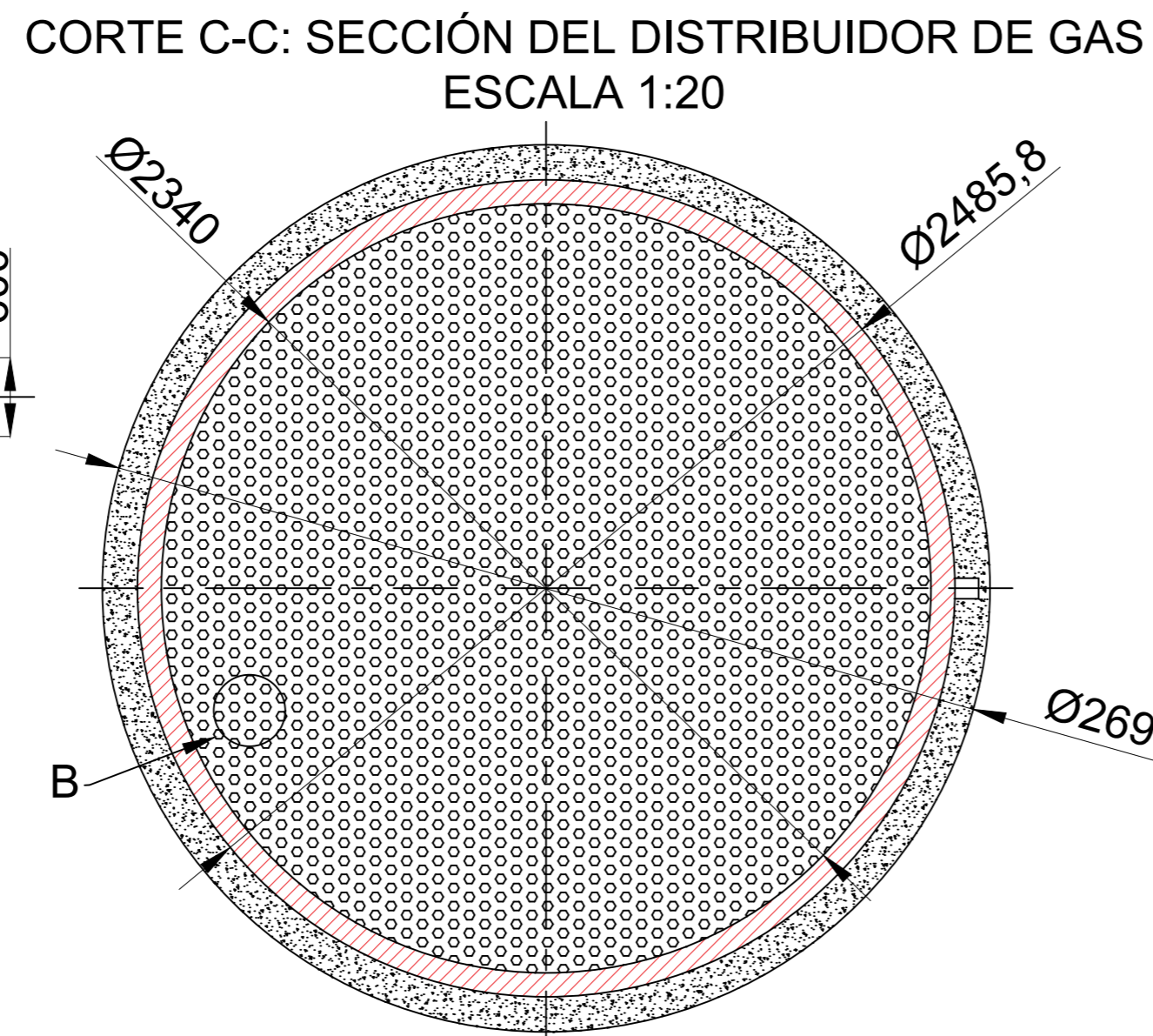
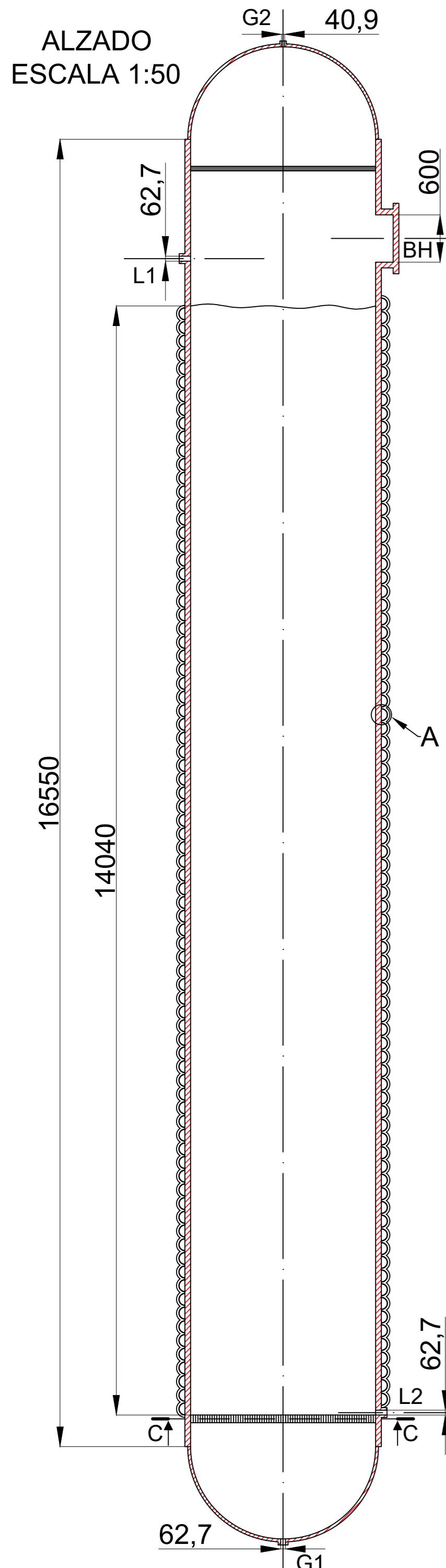
NOMENCLATURA DE LAZOS			
A: Sección del proceso BB: Número del lazo			
Letra X	Letras Y		
<b>F</b>	Flujo	<b>T</b>	Transmisor
<b>T</b>	Temperatura	<b>I</b>	Indicador
<b>P</b>	Presión	<b>C</b>	Controlador
<b>L</b>	Nivel	<b>Y</b>	Convertor de señal
		<b>A</b>	Alarma
		<b>L</b>	Bajo
		<b>H</b>	Alto
		<b>V</b>	Válvula

NOMENCLATURA DE UTILIDADES	
<b>1</b>	Alimentación de vapor de media presión
<b>2</b>	Retorno de vapor de media presión
<b>3</b>	Alimentación de agua de refrigeración
<b>4</b>	Retorno de agua de refrigeración
<b>T</b>	A tratamiento

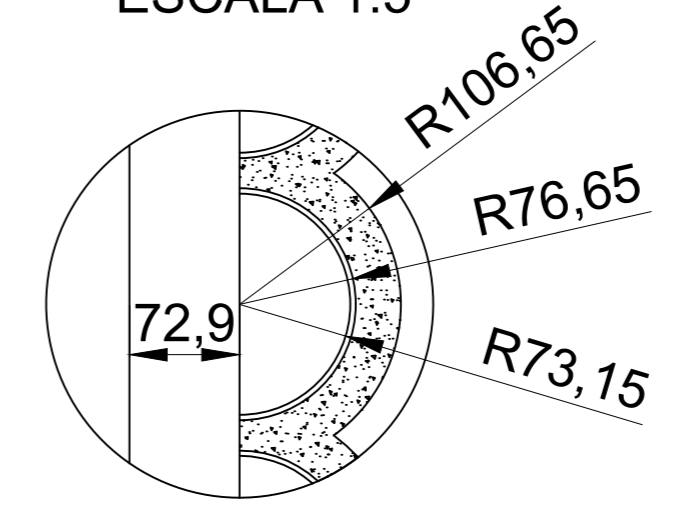
	Drenaje
	Venteo
	Válvula de alivio

LEYENDA DE LÍNEAS		NOTAS	
	Conexión eléctrica	Todas las tuberías van acompañadas de su diámetro nominal en pulgadas (") y de su material de construcción AI316 (Acero inoxidable 316)	
	Línea de proceso		
	Corriente neumática		

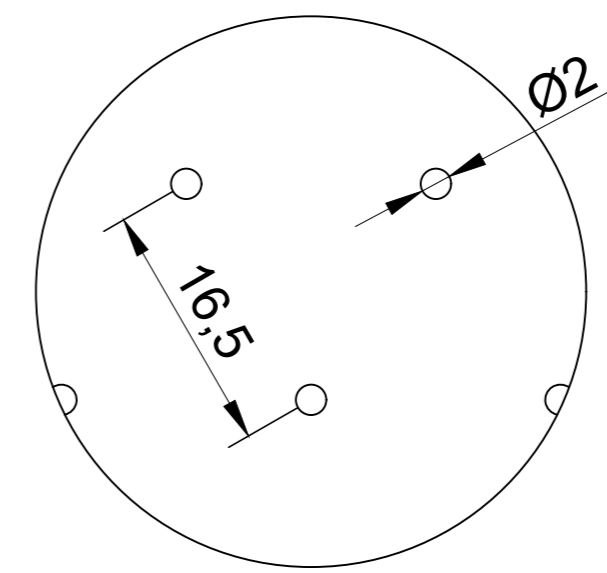
<b>PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ANHÍDRIDO ACÉTICO POR CARBONILACIÓN DE ACETATO DE METILO</b>		
AUTORES: RODRIGO TASENDE REBOREDO JACOBO TORRES PÉREZ		SINATURAS: 
		ESCALA: N/A
		JUNIO 2024
<b>DIAGRAMA DE TUBERÍAS E INSTRUMENTACIÓN DE LA SECCIÓN 200 (P&amp;ID 2)</b>		
<b>5/7</b>		



DETALLE A: CAMISA DEL REACTOR ESCALA 1:5



DETALLE B: ORIFICIOS DEL DISTRIBUIDOR ESCALA 2:1



DATOS DE DISEÑO	
CÓDIGO DE DISEÑO	ASME BPV Sec. VIII - Div. 1
EQUIPO	Reactor de burbujeo (R-101)
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN	Acero inoxidable 316
TIPO DE CAMISA	MEDIA TUBERÍA
TIPO DE DISTRIBUIDOR DE GAS	PLATOS PERFORADOS APILADOS
EFICIENCIA DE SOLDADURA	1
ESFUERZO MÁXIMO PERMISIBLE	99,42 N/mm <sup>2</sup>
CAUDAL DE ALIMENTACIÓN DE LÍQUIDO	28375,48 kg/h
CAUDAL DE ALIMENTACIÓN DE GAS	6934,40 kg/h
TEMPERATURA DE DISEÑO DEL REACTOR	202,78 °C
PRESIÓN DE DISEÑO DEL REACTOR	56,55 bar
TEMPERATURA DE DISEÑO DE LA CAMISA	77,78 °C
PRESIÓN DE DISEÑO DE LA CAMISA	6,68 bar
TIPO DE SOPORTE	Falda recta
AISLANTE	Lana de roca
ESFUERZOS PRIMARIOS	
ESFUERZO RADIAL	90,76 N/mm <sup>2</sup>
ESFUERZO LONGITUDINAL	45,38 N/mm <sup>2</sup>
ESFUERZO COMPRESIVO POR EL PESO DEL EQUIPO	3,06 N/mm <sup>2</sup>
ESFUERZOS DE FLEXIÓN	0,99 N/mm <sup>2</sup>
NOTAS	
1.- Todas las medidas se expresan en mm 2.- L1 representa la entrada de líquido y L2 la salida 3.- G1 representa la entrada de gas y G2 la salida 4.- BH representa las bocas de hombre 5.- Los espesores del distribuidor de gas y del separador antivaho son orientativos	
LEYENDA	
	DISTRIBUIDOR DE GAS
	ORIFICIOS DEL DISTRIBUIDOR DE GAS
	SUELO
	AISLANTE

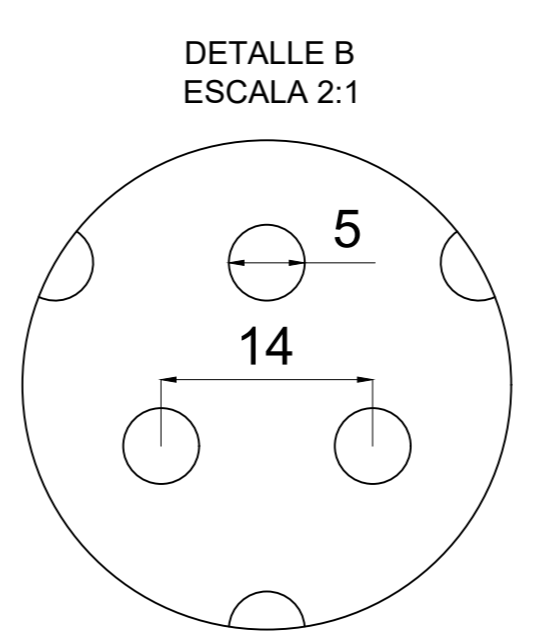
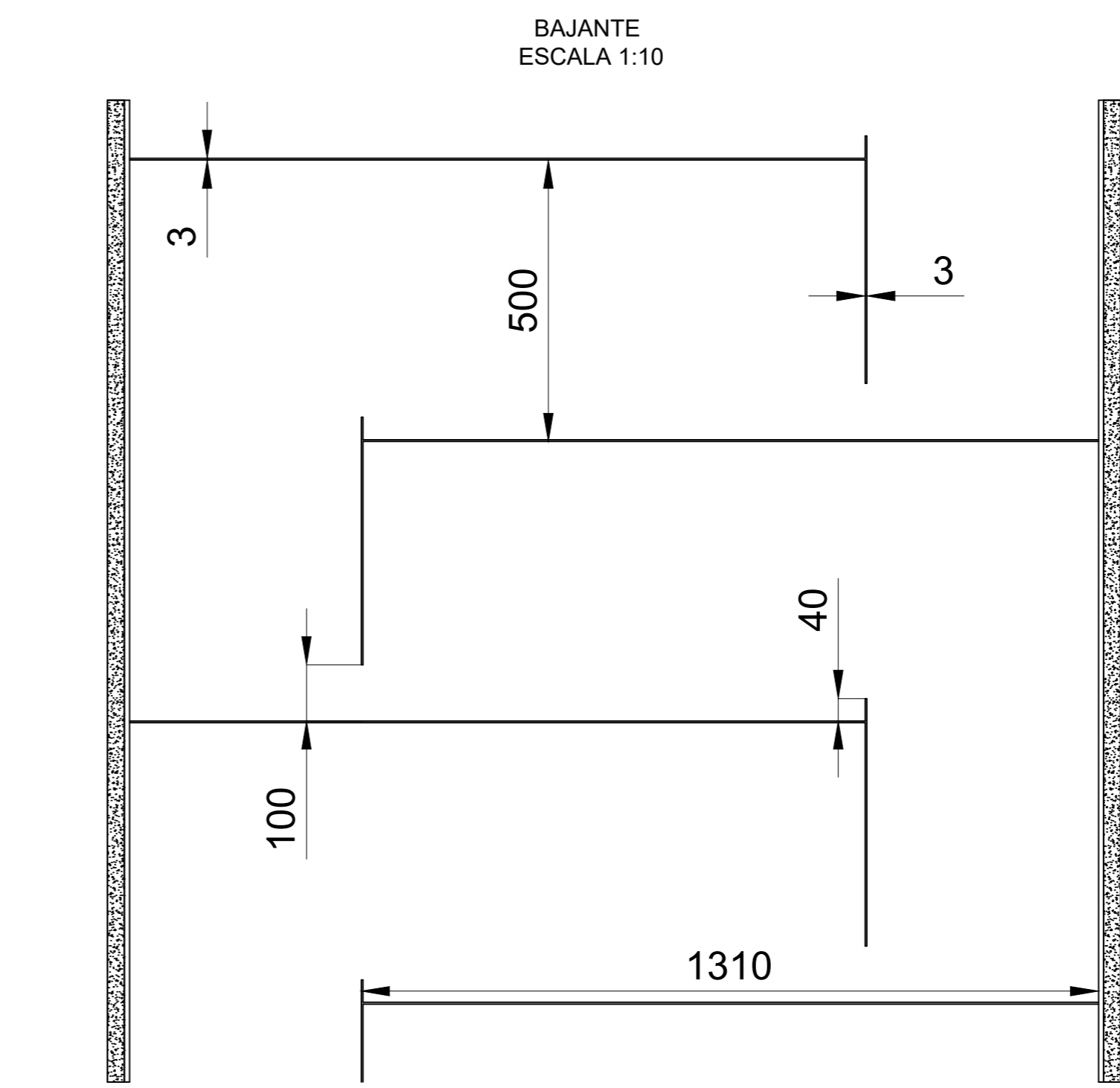
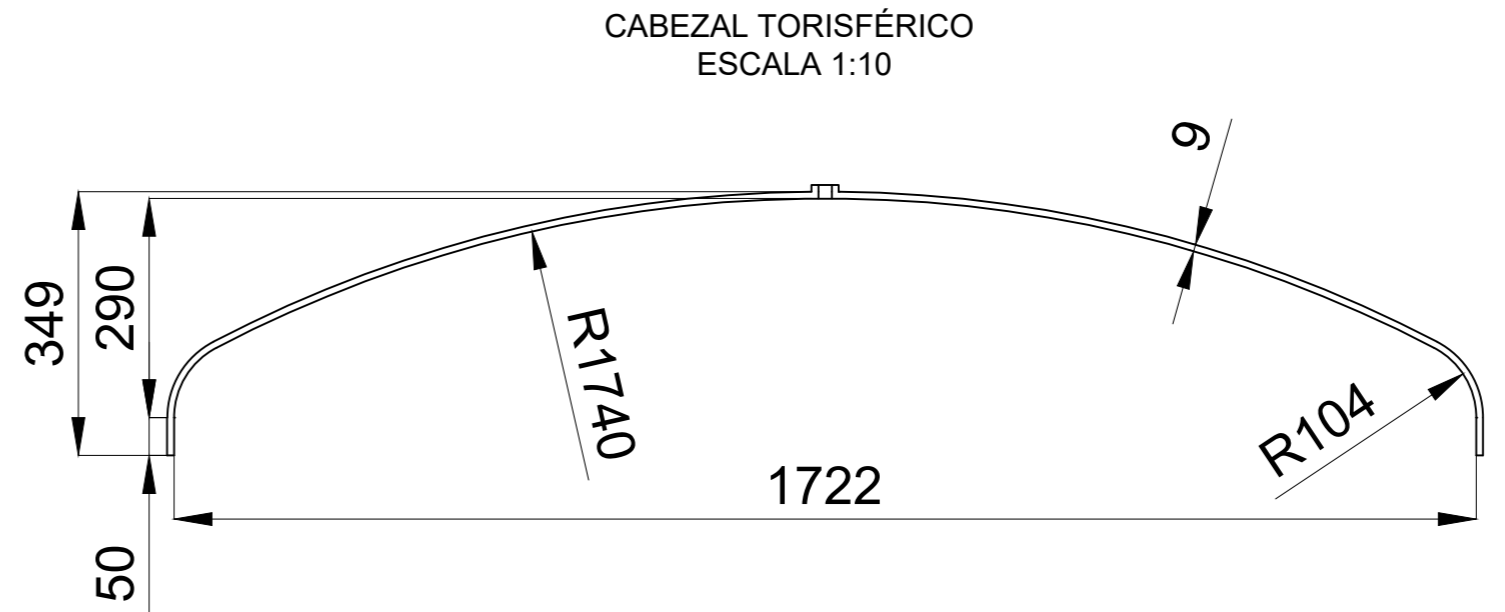
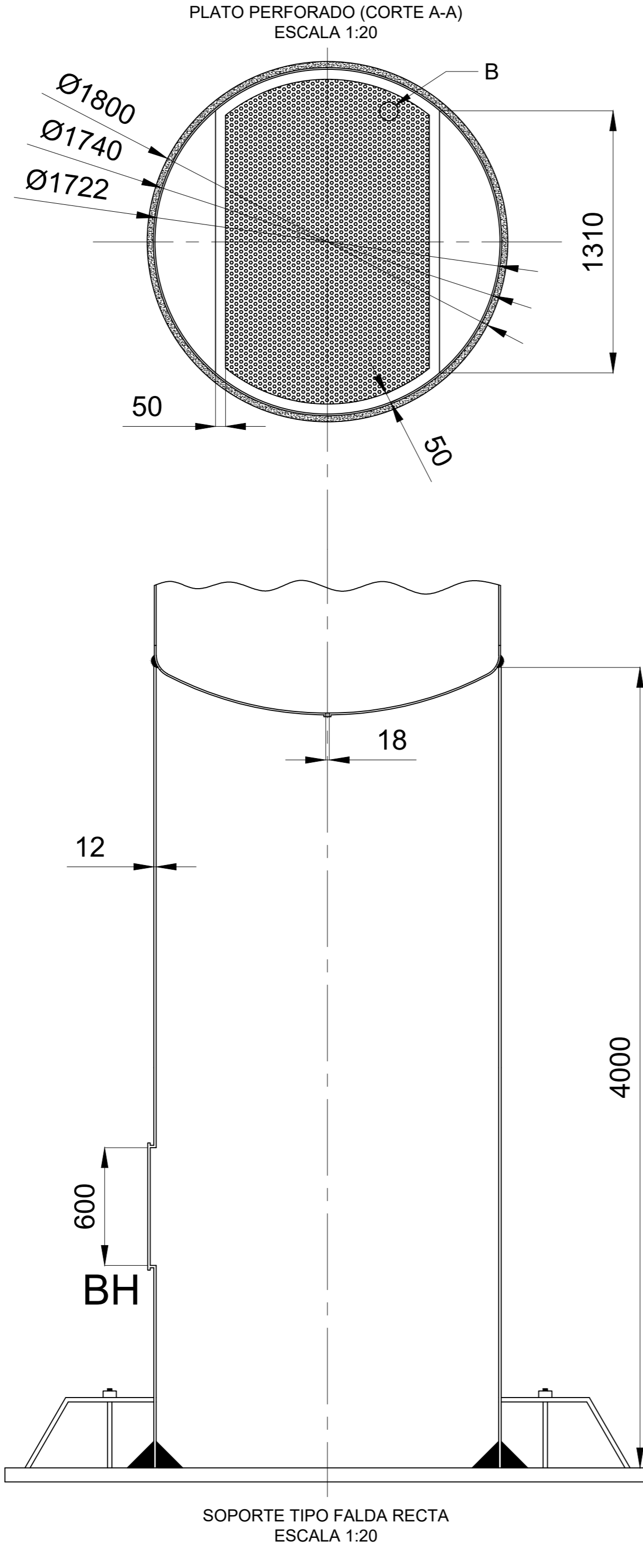
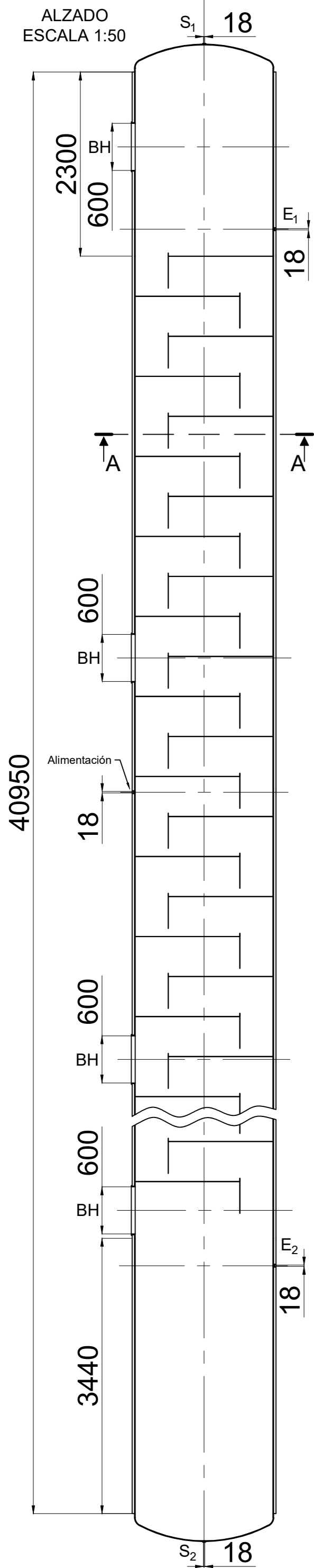
UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA  
 GRAO EN ENXEÑERÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ANHÍDRIDO ACÉTICO POR CARBONILACIÓN DE ACETATO DE METILO

AUTORES: RODRIGO TASENDE REBOREDO      SINATURAS:      ESCALA: VER

JUNIO 2024

REACTOR DE BURBUJEO R-101      6/7



DATOS DE DISEÑO	
CÓDIGO DE DISEÑO	ASME BPV Sec. VIII - Div. 1
EQUIPO	Columna de destilación de platos (T-202)
MATERIAL DE CONSTRUCCIÓN	Acero inoxidable 316
NÚMERO DE PLATOS	70
TIPO DE PLATO	Perforado
Nº DE PERFORACIONES POR PLATO	9013
EFICIENCIA DE SOLDADURA	1
ESFUERZO MÁXIMO PERMISIBLE	104,43 N/mm <sup>2</sup>
CAUDAL DE ALIMENTACIÓN	16569,27 kg/h
TEMPERATURA DE DISEÑO	170,79 °C
PRESIÓN DE DISEÑO	3,41 bar
TIPO DE SOPORTE	Falda recta
AISLANTE	Lana de roca
ESFUERZOS PRIMARIOS	
ESFUERZO RADIAL	32,68 N/mm <sup>2</sup>
ESFUERZO LONGITUDINAL	16,34 N/mm <sup>2</sup>
ESFUERZO COMPRESIVO POR EL PESO DEL EQUIPO	27,20 N/mm <sup>2</sup>
ESFUERZOS DE FLEXIÓN	43,82 N/mm <sup>2</sup>
NOTAS	
1.- Todas las medidas están en mm. 2.- La escala de las partes representadas se encuentra junto a cada dibujo. 3.- E1 y E2 representan las entradas de caudal de reflujo y de colas respectivamente 4.- E1 S1 y S2 representan las salidas de cabezas y colas respectivamente 5.- BH hace referencia a las bocas de hombre	
DESCRIPCIÓN CORTA	
1.- CORTE A-A: Corte de la columna, se observa el plato perforado. 2.- Detalle B: Vista local de las perforaciones del plato. Pitch triangular	

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA - ESCOLA TÉCNICA SUPERIOR DE ENXEÑERÍA  
 GRAO EN ENXEÑARÍA QUÍMICA - TRABALLO FIN DE GRAO

**PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ANHÍDRIDO ACÉTICO POR CARBONILACIÓN DE ACETATO DE METILO**

AUTOR: JACOBO TORRES PÉREZ      SINATURA:      ESCALA: VER

JUNIO 2024

**COLUMNA DE DESTILACIÓN T-202**      **7/7**

---

**DOCUMENTO III:  
ESTUDIOS CON  
ENTIDAD PROPIA**

---

## Índice

### ESTUDIO DE IMPACTO AMBIENTAL

1.	Introducción.....	1
2.	Descripción del proyecto.....	1
3.	Examen de alternativas.....	2
4.	Emisiones .....	3
5.	Justificación de la ubicación.....	5
6.	Inventario ambiental e identificación de impactos .....	5
6.1.	Climatología .....	5
6.1.1.	Temperatura.....	6
6.1.2.	Días de sol .....	6
6.1.3.	Precipitaciones.....	6
6.1.4.	Velocidad del viento .....	7
6.1.5.	Calidad del aire.....	7
6.2.	Sismología .....	9
6.3.	Hidrología .....	9
6.4.	Flora y Fauna .....	10
6.5.	Red Natura 2000 .....	10
6.6.	Población .....	11
6.7.	Economía .....	12
6.8.	Paisaje y patrimonio cultural .....	12
6.9.	Molestias y riesgos .....	13
7.	Valorización de impactos ambientales.....	13
8.	Medidas para la reducción de impactos.....	17
9.	Programa de vigilancia y seguimiento ambiental.....	18
10.	Síntesis y conclusiones.....	19
11.	Bibliografía .....	20

## 1. Introducción

El Estudio de Impacto Ambiental (EIA) es un documento que debe ser elaborado por el promotor del proyecto. El objetivo de este es analizar, cuantificar y evaluar cómo afecta medioambientalmente la construcción, explotación y desmantelamiento de una planta de producción industrial de anhídrido acético de 100.000 t/año. Asimismo, buscar alternativas viables para con el medio ambiente y aplicar las mejores técnicas disponibles para prevenir, corregir y mitigar el posible impacto negativo que pueda provocar la instalación a personas o al medio en caso de suceder. (1)

Los EIA deben seguir las bases que establece la Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental. El objetivo y finalidad de esta ley es establecer las bases que deben regir la evaluación ambiental de planes, programas y proyectos que puedan tener efectos significativos sobre el medio ambiente, garantizando en todo el territorio del Estado un alto nivel de protección ambiental, con el fin de promover un desarrollo sostenible mediante una serie de aspectos. (1)

El artículo 7 de dicha Ley establece que los proyectos pueden ser sometidos a evaluaciones de impacto ambiental ordinarias o simplificadas. Según la legislación, los proyectos comprendidos en el Anexo I '*Proyectos sometidos a la evaluación ambiental ordinaria regulada en el título II, capítulo II, sección 1.ª*' serán objeto de una evaluación ambiental ordinaria. El proyecto de anhídrido acético estaría comprendido dentro de dicho Anexo, más concretamente en el grupo 6 '*Industria química, petroquímica, textil y papel*'. El Anexo VI de la Ley 21/2013 indica el contenido que debe constar en el EIA, el cual se muestra a lo largo de los próximos apartados. (1)

## 2. Descripción del proyecto

El proyecto denominado 'Planta de producción de anhídrido acético', sobre el que se pretende realizar el Estudio de Impacto Ambiental, tiene como objetivo una producción anual de 100.000 toneladas de anhídrido acético con una pureza (molar) del 99,5%. Debido a la elevada cantidad de producción, se trata de un proceso continuo que opera 24 horas al día durante 330 días al año.

El proceso de producción de anhídrido acético que se plantea se lleva a cabo en dos secciones. La primera, sección 100, enfocada al acondicionamiento de materias primas, catalizadores, disolvente y promotores involucrados en el proceso, además de la etapa de reacción. El acondicionamiento consiste en introducir los elementos mencionados, provenientes tanto de corrientes de alimentación fresca como recirculadas, en un tanque de mezcla (TM-101)

con el fin de disolver los sólidos presentes y obtener una corriente homogénea. A continuación, se busca elevar la presión y la temperatura de la corriente para poder ingresar al reactor (R-101). En el equipo de reacción también se introduce hidrógeno y monóxido de carbono mediante una corriente en fase gas que llega a la planta por gaseoducto, y en la cual también se precisa acondicionar la presión y la temperatura.

El propósito de la sección 200, es el de separar las múltiples sustancias involucradas en el proceso mediante una torre flash y dos columnas de destilación. Se comienza con el separador flash (V-201) en donde su corriente de salida líquida se recircula hasta el mezclador, la cual contiene al catalizador de rodio y al promotor disueltos. Mientras que la corriente de salida gaseosa es introducida en la primera columna de destilación (T-201), cuyo objetivo es separar por cabezas una mezcla compuesta principalmente por acetato de metilo y yoduro de metilo y por colas una de ácido acético y anhídrido acético. Dicha corriente de colas es utilizada como alimentación de la segunda columna de destilación (T-202), en la que se busca obtener el producto a la pureza deseada. Cabe destacar que ambas corrientes de cabeza son recirculadas hasta el tanque de mezcla.

Resulta importante mencionar que a lo largo del proceso también se encuentran presentes equipos como bombas, intercambiadores de calor, tanques, compresores y válvulas sin los cuales el proceso no podría ser llevado a cabo.

Además de las sustancias mencionadas, la planta también emplea otras como agua de refrigeración, de limpieza y de proceso, vapor de media presión, electricidad, etc.

### **3. Examen de alternativas**

En este apartado se examinará si las alternativas del proyecto resultan medioambientalmente adecuadas para cumplir con el objetivo de la Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental. Además se comprobará si el proyecto es técnicamente viable y se justificará la decisión tomada. (1)

Primero que todo, mencionar que para todo proyecto de esta índole se aplican las mejores técnicas disponibles (MTD). La Comisión Europea ofrece una serie de documentos que reúnen las MTD aplicables a cada tipo de proyecto. En este caso, el proyecto de planta de producción de anhídrido acético lo abarcarían las MTD aplicables a 'Industria química orgánica de gran volumen de producción'. (2)

En general, se plantean técnicas que ayuden a: (2) (3)

- Minimizar las emisiones y en caso de producirse contar con sistemas de captación.

- Gestionar y tratar los residuos de manera adecuada reutilizando y reciclando cuando sea posible.
- Hacer un uso eficiente de la energía, por ejemplo durante la destilación colocar en el lugar óptimo la corriente de alimentación, usar una relación de reflujo adecuada, etc.
- Emplear sistemas de control automatizados que permitan medir de forma continua.
- La correcta gestión del agua procedente de derrames, limpieza o intercambiadores de calor.

Existen tres alternativas para la producción industrial de anhídrido acético, producción vía cetena, por oxidación de acetaldehído y la carbonilación de acetato de metilo.

La producción por cetena es un proceso simple con una elevada conversión y selectividad a cetena. Sin embargo, cuenta con una serie de inconvenientes, como que es un proceso altamente costoso energéticamente por precisar temperaturas de operación de unos 750 °C. Además, el proceso se lleva a cabo a vacío, sobre las 0,15 atm, y se generan varias reacciones secundarias que afectan al rendimiento del proceso.

El proceso por oxidación de acetaldehído cuenta con la ventaja de que las condiciones de presión y temperatura no son muy elevadas, lo que se traduce en una reducción de costos. No obstante, el rendimiento a anhídrido acético y la rápida necesidad de eliminar el agua presente en el proceso, para evitar hidrólisis, hace que sea una alternativa inviable.

Por último estaría el proceso vía carbonilación de metil acetato. Este es más complejo que los otros dos, y el coste del catalizador es bastante elevado. A pesar de ello, alcanza una alta selectividad hacia el producto deseado, la demanda energética es menor que las otras alternativas y es un proceso mucho más sostenible.

Conociendo las alternativas disponibles y considerando las MTD, la mejor alternativa para la planta de producción industrial de anhídrido acético es la de carbonilación de metil acetato.

## 4. Emisiones

Varios de los efectos ambientales provocados por la Planta de producción de anhídrido acético son debidos a emisiones gaseosas, acústicas, efluentes líquidos o generación de residuos.

**Emisiones gaseosas:** Las emisiones de este tipo estarán presentes en la fase de construcción, debido a la maquinaria empleada en el acondicionamiento del terreno, edificación e instalación de equipos. No obstante, la mayor parte de este tipo de impacto se dará en la fase de explotación, pues en el proceso se encuentran involucrados dos sustancias en fase gas, hidrógeno y monóxido de carbono, además de que en ciertos puntos de la planta se evaporan

corrientes de mezclas con sustancias peligrosas. Este proceso no cuenta con corrientes de purga, pero sí se instalan válvulas de alivio en los equipos en los que se encuentre o puedan encontrarse involucrada una corriente en fase gas. Algunos de estos equipos son: El reactor R-101, las columnas de destilación T-201 y T-202, intercambiadores de calor o el separador flash V-201. En caso de ser necesario el uso de este tipo de válvulas, la corriente de salida no será emitida directamente a la atmósfera, debido a las graves consecuencias de seguridad y salud que provocaría. Por ende, se recogerían y se enviarían a gestión y tratamiento mediante un tercero. Por otra parte, los sistemas de control que involucran algún tipo de corrientes gaseosas cuentan con válvulas de venteo que cumplen con una función similar a las válvulas de alivio. Por último, mencionar que la posibilidad de instalar una antorcha en la planta se descarta debido a la peligrosidad que supone la combustión de las sustancias presentes. Reacciones explosivas o posibles productos tóxicos, inflamables y corrosivos serían el resultado de emplear antorcha.

**Emisiones acústicas:** Indiscutiblemente este tipo de emisión se dará tanto en la fase de construcción como en las de explotación y desmantelamiento. La propia actividad de cada fase, vehículos, herramientas o equipos serán los principales motivos de generación de ruido. La contaminación acústica se rige por la Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido, cuyo objetivo es *'prevenir, vigilar y reducir la contaminación acústica, para evitar y reducir los daños que de esta pueden derivarse para la salud humana, los bienes o el medio ambiente'*. (4)

**Efluentes líquidos:** En el proceso que se plantea en el presente proyecto solo consta una corriente líquida de salida. Sin embargo, al igual que las emisiones gaseosas, las líquidas también se podrían dar debido a alguna fuga inesperada y no deseada. Es por ello que se propone el uso de válvulas de drenaje que actúen en caso de algún tipo de fallo o riesgo. Como se mencionó en el punto de emisiones gaseosas, los compuestos presentes en el proceso podrían reaccionar de manera peligrosa con el entorno y, en caso de precisar el uso de los drenajes, los efluentes serían recogidos y se procedería con el correspondiente tratamiento. Por otro lado, pese a que el agua no es una sustancia del proceso como tal, se emplea en los enfriadores y condensadores, en la limpieza de equipos durante los mantenimientos o en el edificio de servicios. Dependiendo de su procedencia se deberá tratar de la manera correspondiente para su correcto vertido o regreso al proceso.

**Generación de residuos:** Durante las fases de construcción y desmantelamiento el principal residuo generado será escombros, mientras que en la de explotación se podría contemplar el catalizador de rodio al final de su vida útil. Se evitará etiquetar al catalizador con la característica de residuo el mayor tiempo posible, pues su costo es muy elevado y se tratará de regenerar tantas veces como sea posible. En cuanto a los residuos sólidos urbanos

provenientes de la actividad habitual de la planta destacarían: papel, cartón, envases de plásticos...

## 5. Justificación de la ubicación

El terreno seleccionado para la planta de producción de anhídrido acético tiene una extensión de 102.129 m<sup>2</sup> y se encuentra en Cataluña, más concretamente en el polígono de El Morell en la provincia de Tarragona. Para tomar esa decisión, se realizó un estudio de mercado que permitió conocer el tamaño de este, el tipo de consumidores y sus necesidades o analizar empresas competidoras. Además de comprobar si la climatología del lugar y el impacto ambiental que generaría un proyecto de estas características en la zona eran viables.

Una buena ubicación es aquella que, teniendo en cuenta lo mencionado en el párrafo anterior, permite contar con una buena red de transporte tanto para la recepción de materias primas y suministros, como para la exportación del producto a clientes potenciales. En este caso, el emplazamiento se encuentra muy próximo a carreteras nacionales, la autopista AP-7, redes ferroviarias, gaseoductos, aeropuertos y el puerto de Tarragona a escasos kilómetros.

Tarragona es una provincia con una consolidada tradición industrial y la parcela elegida se encuentra rodeada de otras empresas de la industria química como *Messer Iberica de Gases SA*, *Repsol* o *Carburos metálicos SA*.

En el apartado 7. *Emplazamiento y localización* del *Documento I: Memoria*, se aborda más ampliamente este tema, en donde además se utilizan figuras que respaldan lo comentado.

## 6. Inventario ambiental e identificación de impactos

Siguiendo lo establecido por la Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental, el inventario ambiental comprende, entre otras cosas, un estudio del estado del lugar y sus condiciones ambientales antes de la construcción, así como los aspectos mencionados en el artículo 35 de la ley en la que se apoya este Documento. (1)

### 6.1. Climatología

En el apartado 7. *Emplazamiento y localización* del *Documento I: Memoria* ya se adelantaba como era el clima de Tarragona. Se recuerda que esta región presenta un clima mediterráneo, con veranos secos y temperaturas elevadas, mientras que en invierno la temperatura se suaviza. Pero la climatología no solo hace referencia a la temperatura, también abarca precipitaciones, vientos o calidad del aire.

### 6.1.1. Temperatura

Como se observa en la Figura 1, en los meses de verano la temperatura máxima oscila entre los 25 °C y los 31 °C y la mínima entre los 17-20 °C. Por otro lado, en invierno las máximas rondan los 15 °C mientras que las mínimas los 4°C. Con respecto a la precipitación la media está en 50 mm y decae notoriamente en los meses de verano.

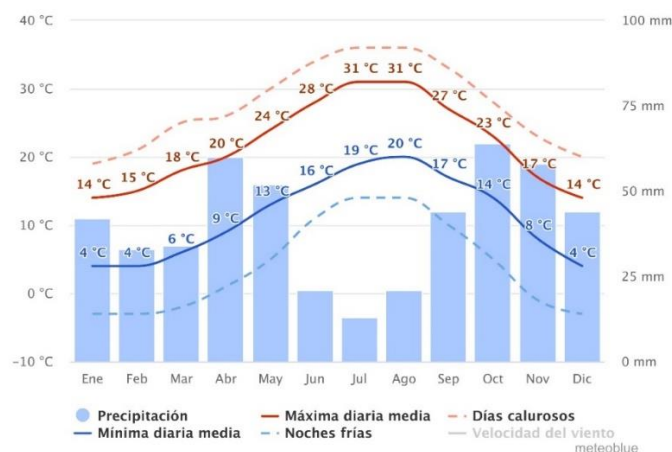


Figura 1. Temperaturas y precipitaciones medias por mes en Tarragona (5)

### 6.1.2. Días de sol

En la Figura 2 se muestra el número de días por mes en los que ha habido días de sol, parcialmente nublados o totalmente nublados en Tarragona. Como se observa los días están mayoritariamente parcialmente nublados durante todo el año.

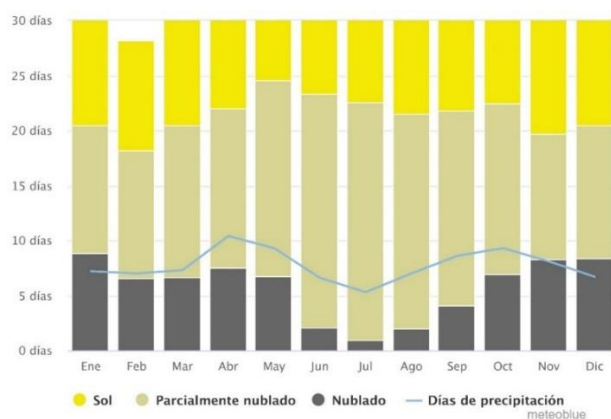


Figura 2. Clasificación de los días por mes según la cobertura nubosa en Tarragona (5)

### 6.1.3. Precipitaciones

Por otro lado, en la Figura 3 se muestra el volumen de precipitación por días de cada mes. Se observa que claramente hay un ambiente seco a lo largo del año, donde en prácticamente un 80% de los días del mes no hay lluvia y en el resto de días la precipitación es muy escasa.

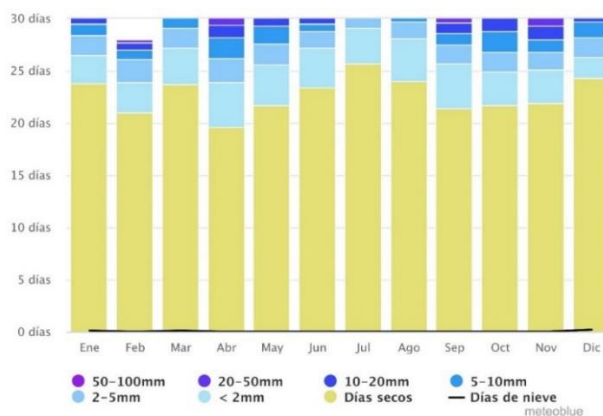


Figura 3. Precipitaciones por días del mes en Tarragona (5)

#### 6.1.4. Velocidad del viento

Por último, la Figura 4 indica la velocidad del viento en días por mes. La mayor parte de los días la velocidad oscila entre los 5 km/h y los 19 km/h. Cabe destacar la existencia de días, sobre todo en invierno, en los que se superan las rachas de viento de 38 km/h.

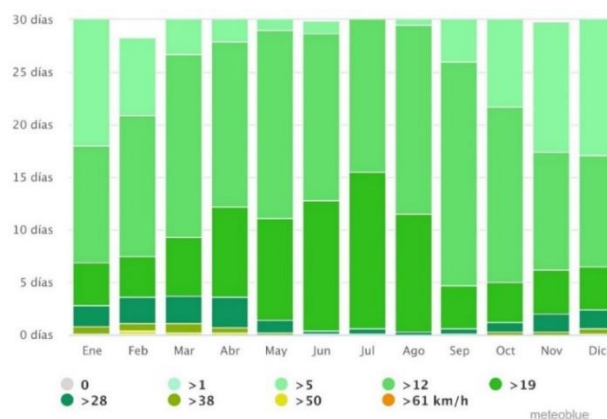


Figura 4. Velocidad del viento en días por mes en Tarragona (5)

En conclusión, el análisis climatológico no presenta ninguna razón que indique que la selección de la localización no sea adecuada para la construcción de la planta en el polígono del Morell.

#### 6.1.5. Calidad del aire

Para poder hablar de calidad del aire es necesario apoyarse en lo estipulado por la ley, en este caso Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera, actualizada el 23 de diciembre de 2017 y cuyo objetivo es ‘establecer las bases en materia de prevención, vigilancia y reducción de la contaminación atmosférica con el fin de evitar y cuando esto no sea posible, aminorar los daños que de ésta puedan derivarse para las personas, el medio ambiente y demás bienes de cualquier naturaleza.’ (6)

Por otro lado, el Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire, cuya última modificación data del 25 de enero de 2023, marca los límites de concentración para varios contaminantes que puede haber en el aire. (7)

Además, el Ministerio de Transición Ecológica y el Reto Demográfico cuenta con una herramienta llamada ‘Índice Nacional de Calidad del Aire’ (ICA) que permite comprobar a tiempo real la calidad del aire en diferentes puntos del país. El valor se determina teniendo en cuenta la concentración de hasta cinco contaminantes: (8) (9)

- Partículas en suspensión PM10
- Partículas en suspensión PM2,5
- Ozono troposférico O<sub>3</sub>
- Dióxido de Nitrógeno NO<sub>2</sub>
- Dióxido de azufre SO<sub>2</sub>

La Figura 5 indica las bandas de concentración, expresadas en µg/m<sup>3</sup>, para cada contaminante y a la categoría de calidad del aire a la que pertenecen. Dichos límites han sido marcados teniendo en cuenta las recomendaciones de la OMS y lo establecido por la Directiva de Calidad del Aire de la Unión Europea. (9)

SO <sub>2</sub>		PM2,5		PM10		O <sub>3</sub>		NO <sub>2</sub>		CATEGORÍA DEL INDICE	Calidad del aire	Mensajes para la salud
0	100	0	10	0	20	0	50	0	40	BUENA	Buena	Calidad del aire satisfactoria
101	200	11	20	21	40	51	100	41	90	RAZONABLEMENTE BUENA	Razonablemente buena	Calidad del aire aceptable, la contaminación no supone un riesgo para la salud.
201	350	21	25	41	50	101	130	91	120	REGULAR	Regular	La calidad del aire probablemente no afecte a la población general pero puede presentar un riesgo moderado para los grupos de riesgo.
351	500	26	50	51	100	131	240	121	230	DESFAVORABLE	Desfavorable	Toda la población puede experimentar efectos negativos sobre la salud y los grupos de riesgo efectos mucho más serios.
501	750	51	75	101	150	241	380	231	340	MUY DESFAVORABLE	Muy desfavorable	Condiciones de emergencia para la salud pública, la población entera puede verse seriamente afectada.
751-1250	76-800	151-1200	381-800	341-1000	EXTREMADAMENTE DESFAVORABLE	Extremadamente desfavorable	Condiciones de emergencia para la salud pública, la población entera puede verse gravemente afectada.					

Figura 5. Categoría de calidad del aire dependiendo de la concentración de cinco contaminantes (9)

El ICA también proporciona información acerca de recomendaciones sanitarias para grupos de riesgo, personas sensibles y población general. En la Figura 6 se recoge esta información. (9)

Entre junio del año 2023 y junio de 2024, la calidad del aire en el polígono de El Morell ha sido buena según las indicaciones del ICA. En la Figura 6 se muestra un diagrama en donde se puede apreciar como prácticamente durante todo el periodo de estudio la calidad del aire ha sido buena o razonablemente buena. (8)

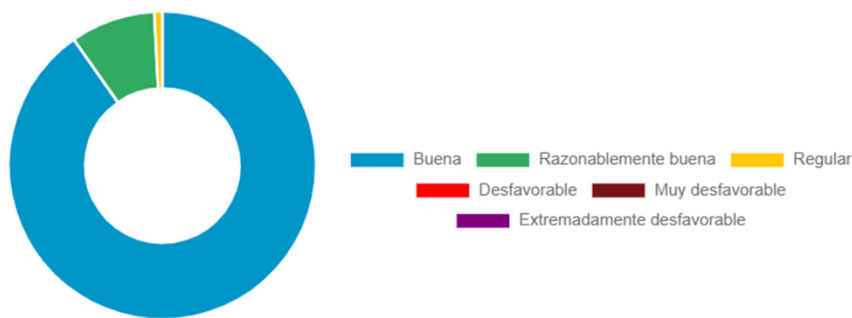


Figura 6. Calidad del aire en el polígono de El Morell durante el último año (8)

## 6.2. Sismología

De acuerdo con lo representado en la Figura 7, la actividad sísmica de la península ibérica y zonas próximas, durante el año 2021, indica que la zona con mayor actividad sísmica es el sur, pero los sismos son de poca magnitud y ocurren a poca profundidad. En la zona donde está situada la planta no hay una actividad sísmica destacable, por tanto no se espera que este fenómeno suponga un peligro para la fábrica o para sus trabajadores. (10)

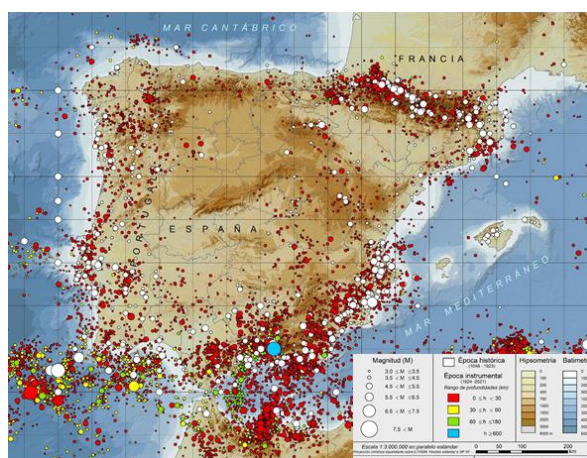


Figura 7. Actividad sísmica de la Península Ibérica (10)

## 6.3. Hidrología

La hidrología se centra en relacionar el sistema con el clima y los ríos, embalses, canales... que lo atraviesan. La red hidrográfica de Tarragona presenta tres grandes cuencas: la del río Gaiá, la del Francolí y sistemas de arroyos que drenan al Baix Camp. Además de estas, existen otras de menor tamaño que vierten sus caudales en el río Ebro. En la Figura 8 se pueden apreciar las distintas redes hidrográficas de Cataluña. (11)

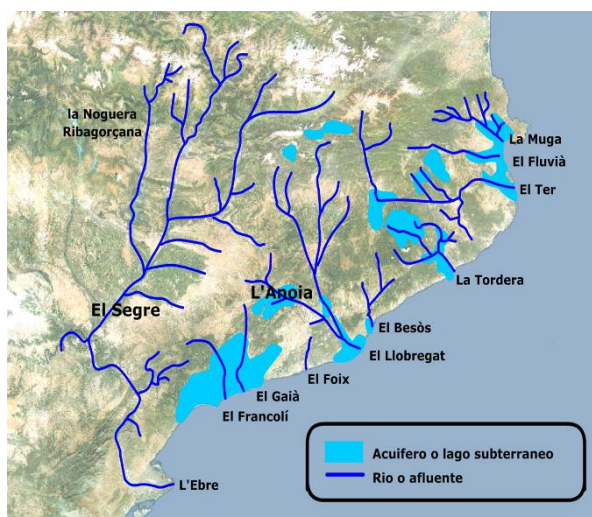


Figura 8. Ríos, afluentes, acuíferos y lagos subterráneos de Cataluña (22)

El solar en donde se ubica la planta se encuentra a escasos metros del río Francolí. Esto podría tener ventajas como poder captar agua del río si las autoridades lo permiten, o riesgos como inundaciones o vertidos no deseados. Sin embargo, la Generalitat informa que la red hidrográfica catalana se caracteriza por la falta de curso de aguas superficiales, y que existe una escasez de caudal debida a los escasos barrancos que solo llevan agua en épocas de lluvia. (12)

Esto se traduce en que las probabilidades de inundación no suponen un riesgo y la escasez de agua impedirá la captación de agua.

#### 6.4. Flora y Fauna

El paraje natural de Cataluña cuenta con comunidades vegetales y especies florales eurosiberianas. El robledal de roble melojo es característico de la provincia de Tarragona por ser la única en donde tiene presencia. Otras comunidades vegetales de la zona son el mostajo, también propio de los bosques eurosiberianos, el acebo y el tejo. Este último es objeto de un proyecto europeo de conservación de especies. Por último, mencionar que el pino negral y pino silvestre son otro ejemplo de árboles que abundan en el lugar y que incluso se han datado ejemplares con más de 300 años. (13)

En Cataluña se catalogan unas 15.000 especies de flora, entre las que se incluyen: algas, hongos, líquenes, musgos y hepáticas, helechos y espermatofitos, es decir, plantas con flores y frutos. (14)

La fauna catalana es muy variada, pues en todo el territorio hay presencia de diversidad de mamíferos como nutrias o murciélagos, aves como buitres o quebrantahuesos, reptiles, anfibios, peces e invertebrados. En cambio, la zona próxima al terreno de la planta no tiene presencia de muchos animales. Destacarían solamente alguna especie de águila perdicera, víbora hocicuda y cangrejo de río. (15)

Como fue mencionado anteriormente, la planta se ubica en un polígono industrial por lo que no debería suponer un riesgo para la fauna y la flora. Pese a ello, siempre se buscará respetar y cuidar el patrimonio natural.

#### 6.5. Red Natura 2000

La Red Natura 2000 es una red ecológica europea que busca conservar y asegurar la supervivencia a largo plazo de las especies y hábitats de la naturaleza del continente en dos tipos de zonas. Una de ellas son las zonas especiales de conservación (ZEC o LIC) y otras las zonas de especial protección para las aves (ZEPA). En la Figura 9 se muestra un mapa de Cataluña con las zonas afectadas por Red Natura 2000. (16)

Como se aprecia, la Figura 9 cuenta con un círculo rosa que indica la zona aproximada en donde se ubica la planta. Con esto, a priori se podría decir que el lugar donde se encuentra la planta no está afectado por Red Natura 2000, sin embargo esa decisión cae en manos de las autoridades competentes por parte de la Administración General del Estado, y son los encargados de decidir si se otorga o no el certificado de no afectación a la Red Natura 2000. En cualquier caso, se deberá respetar y afectar de la menor manera posible el Patrimonio Natural y la Biodiversidad del espacio durante las tres fases del proyecto. (16)

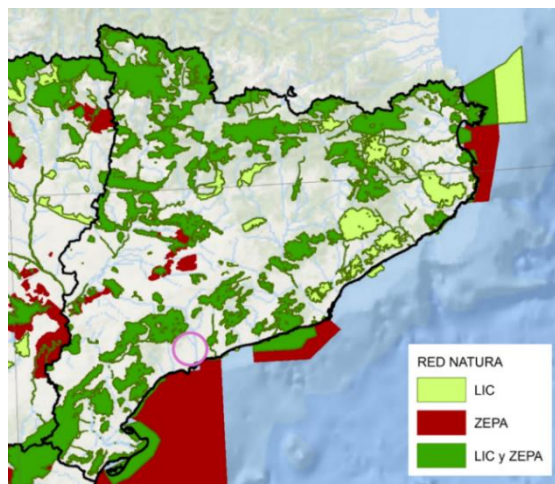


Figura 9. Mapa Red Natura 2000 de Cataluña (16)

## 6.6. Población

El pasado año 2023 se registraban en Cataluña más de ocho millones de habitantes de los cuales el 73% pertenecen a la provincia de Barcelona, un 11% a las comarcas de Tarragona y un 10% y 6% a Girona y Lleida respectivamente. (17). En la Figura 10 muestra la densidad poblacional de la comunidad autónoma en habitante por km<sup>2</sup> y la evolución de la población catalana de los últimos años. (18)

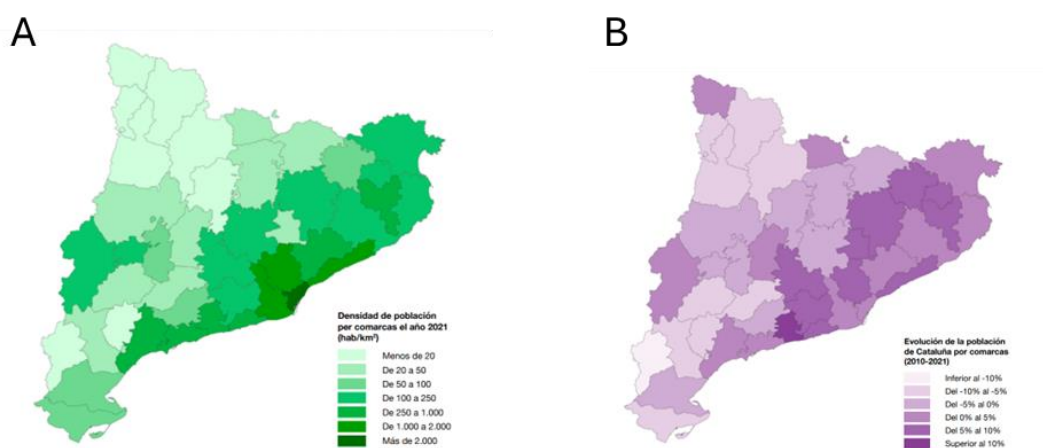


Figura 10. A) Densidad poblacional de Cataluña en hab./km<sup>2</sup> y B) Evolución de la población de Cataluña en los últimos años (18)

Como se aprecia en el mapa A, las zonas más pobladas son las costeras destacando principalmente Barcelona con una densidad de más de 2000 habitantes por kilómetro cuadrado.

El Tarragonès, lugar donde se encontraría la planta, es una de las comarcas con alta densidad poblacional.

El aumento de población en las diferentes localidades también es un factor a tener en cuenta, por ello en el mapa B se muestra su evolución desde el año 2010. La comarca con el crecimiento más notable ha sido el Baix Penedès, la cual colinda con el Tarragonès. Lo cual se traduce como algo positivo para el desarrollo económico y la disponibilidad de mano de obra.

En el apartado 7.1.3. *Disponibilidad de mano de obra* de la Memoria se menciona como se distribuye la población de El Morell, municipio al que pertenece el terreno elegido.

## 6.7. Economía

La Generalitat de Catalunya recoge datos de PIB per cápita de 18,8%, superior a la media española y al 13,2% de la Unión Europea en el año 2016. La industria es uno de los pilares fundamentales de la economía catalana, en concreto el principal sector exportador en la comunidad autónoma es la industria química con el 26,3% del total. En la Figura 11 se presentan dos gráficos que hacen referencia a la variación porcentual interanual del PIB en diferentes sectores y zonas geográficas. (19)

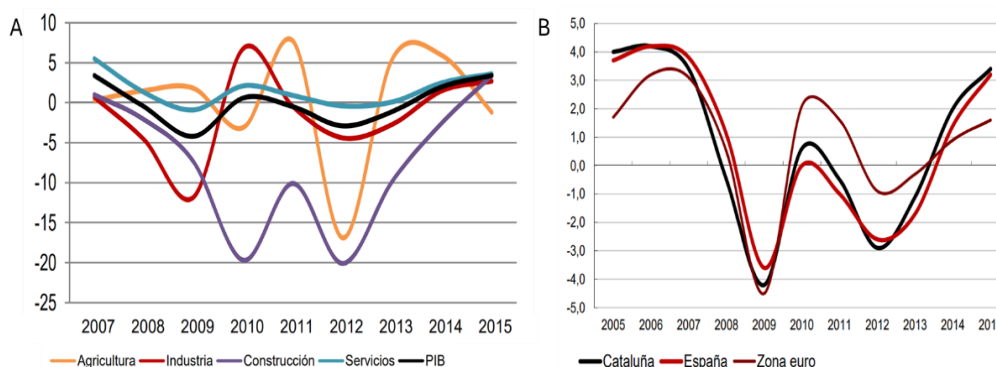


Figura 11. Evolución del PIB por sectores (A) y por zonas geográficas (B) (19)

Se puede ver como el sector industrial y de servicios son los predominantes en cuanto a PIB se refiere. Sin embargo si se compara el Producto Interior Bruto del gráfico B se aprecia que pese a las diferencias, la tendencia ha sido la misma para los tres elementos de estudio.

## 6.8. Paisaje y patrimonio cultural

Como se vino comentando hasta ahora, la planta de producción de anhídrido acético será ubicada en un solar del polígono industrial de El Morell, el cual se encuentra rodeado de más compañías dedicadas a la industria química y que cuentan con equipos industriales de tamaño voluminoso. Debido a esto, el paisaje no debería verse afectado así como el patrimonio cultural, pues en un polígono industrial como este no consta ningún tipo de patrimonio cultural.

## 6.9. Molestias y riesgos

En el punto de emisiones acústicas del apartado 4. *Emisiones* ya se adelantaba que la construcción, explotación y desmantelamiento de una industria de estas características iba a promover la generación de ruido. No obstante, es de obligatorio cumplimiento seguir la Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido, pero, al instalarse la fábrica en un polígono industrial, se prevé que no exista riesgo de molestias.

Por otra parte, los vehículos de construcción o transporte de mercancías podrían ocasionar molestias en la zona debido a su volumen, vibraciones y obstaculización del tráfico en zonas urbanas. Además, como transportan cargas pesadas precisan de mayor cantidad de combustible, lo que provoca emisión de partículas a la atmósfera.

## 7. Valorización de impactos ambientales

Se procederá a valorar y cuantificar el impacto que genera una planta industrial de este tipo tanto en la fase de construcción como en las de explotación y desmantelamiento. Para ello se emplea una herramienta conocida como Matriz de Leopold. Se trata de una matriz causa-efecto que pretende relacionar factores ambientales con las acciones del proyecto que puedan afectarles. (20)

En las filas de la matriz se representan factores ambientales, en este caso factores relacionados con el medio físico, biológico y socioeconómico, y en las columnas las diferentes acciones que se pueden dar a lo largo de las fases del proyecto. Cada intersección entre fila y columna constará de dos valores, el valor M de magnitud del impacto y el valor I de importancia. El M toma valores entre -5 y 5, siendo -5 una magnitud de impacto muy alta y negativa, y 5 una muy alta pero positiva. En cuanto al valor I, se escala entre 1 y 5 e indica la importancia del impacto.

Los factores ambientales que se considerarán para la matriz de Leopold son los recogidos en la Tabla 1 y las acciones del proyecto que se tendrán en cuenta son las presentadas en la Tabla 2.

*Tabla 1. Factores ambientales considerados para la Matriz de Leopold*

<b>FISICO</b>	SUELO	Tasa de erosión Estructuras
	ATMOSFERA	Calidad del aire Ruido
	AGUA	Turbidez Toxicidad
	PAISAJE	Calidad
<b>BIOLÓGICO</b>	FLORA	Estructura y composición Hábitat
	FAUNA	Hábitat
<b>SOCIO ECONÓMICO</b>	POBLACIÓN	Migración
	TERRITORIO	Uso de la Tierra
	ECONOMÍA	Generación de Empleo
	CULTURA	Sitio Arqueológico

*Tabla 2. Acciones del proceso consideradas para la Matriz de Leopold*

<b>FASE DE CONSTRUCCIÓN</b>	Tala y desbroce
	Acondicionamiento del terreno
	Cimentación y estructuras
	Instalaciones de obra
	Tránsitos de vehículos pesados
<b>FASE DE EXPLOTACIÓN</b>	Ocupación del terreno
	Depuración de aguas residuales
	Emisiones a la atmósfera
	Tránsito de vehículos
	Mantenimiento
	Manejo de lodos y residuos
<b>FASE DE DESMANTELAMIENTO</b>	Demolición
	Generación y gestión de residuos de obra
	Recuperación del terreno

Utilizando la información mostrada en las Tabla 1 y 2 se crean las filas y columnas de la matriz, Figura 12, para la evaluación de impacto ambiental de la planta de producción de anhídrido acético.

Se adelanta que de la Matriz de Leopold se concluye que a pesar de los impactos negativos hacia el medio físico y biológico, la contribución socioeconómica es significativa, pues contribuye a la generación de empleo, lo que hace que el proyecto tenga un impacto ambiental positivo. Para mitigar los impactos negativos se propondrán una serie de medidas correctoras.

Documento III: Estudios con entidad propia  
 Planta de producción de anhídrido acético por carbonilación de acetato de metilo

ACCIONES DEL PROYECTO			FASE DE CONSTRUCCIÓN										FASE DE EXPLOTACIÓN										FASE DE DESMANTELAMIENTO						Nº INDICADORES POSITIVOS	Nº INDICADORES NEGATIVOS	IMPACTO POR SUBCOMPONENTE	IMPACTO POR COMPONENTES	IMPACTO TOTAL DEL PROYECTO			
			Tala y desbroce		Acondicionamiento del terreno		Cimentación y estructuras		Instalaciones de obra		Trámites de vehículos pesados		Ocupación del terreno		Depuración de aguas residuales		Emisiones a la atmósfera		Tránsito de vehículos		Mantenimiento		Manejo de lodos y residuos		Demolición		Generación y gestión de residuos de obra							Recuperación del terreno		
			M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I	M	I						M	I	
FISICO	SUELO	Tasa de erosión	-3	2	-1	1	-2	2	-1	1	-2	2																	2	8	-17					
		Estructuras			1	1	3	2	1	1																			3	0	8					
	ATMOSFERA	Calidad del aire	-2	2	-1	1									-4	3	-3	3	1	1									1	7	-39					
		Ruido	-2	2	-2	2	-2	2	-2	2	-2	2	-1	1															0	8	-29					
	AGUA	Turbidez	-1	1											3	3							1	1	-1	1	-1	1	2	4	6					
		Toxicidad												3	3	-2	2												1	1	5					
	PAISAJE	Calidad	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1			-1	1													3	1	1	5	-2					
	BIOLÓGICO	FLORA	Estructura y composición	-1	1	-1	1																						0	2	-2					
			Habitat	-1	1	-1	1	-1	1					-1	1													2	2	1	5	-1				
		FAUNA	Habitat	-1	1	-1	1	-1	1					-1	1														1	7	-3					
SOCIO ECONÓMICO	POBLACIÓN	Migración											1	1														1	0	1						
	TERRITORIO	Uso de la Tierra																										0	0	0						
	ECONOMÍA	Generación de Empleo	3	4	3	4	3	4	3	4	4	4	2	2	3	4	3	3	3	3	3	3	2	3	3	2	2	4	4	2	2	1	1	14	0	126
	CULTURA	Sitio Arqueológico																											0	0	0					
<b>INDICADORES con MAGNITUD POSITIVA</b>			<b>1</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>1</b>	<b>1</b>	<b>3</b>	<b>2</b>	<b>1</b>	<b>1</b>	<b>5</b>	<b>27</b>																		
<b>INDICADORES con MAGNITUD NEGATIVA</b>			<b>8</b>	<b>7</b>	<b>5</b>	<b>3</b>	<b>5</b>	<b>4</b>	<b>0</b>	<b>2</b>	<b>5</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>5</b>	<b>3</b>	<b>0</b>														<b>47</b>						
<b>SUMA DE PRODUCTOS (M x I)</b>			<b>-7</b>	<b>3</b>	<b>7</b>	<b>11</b>	<b>-15</b>	<b>9</b>	<b>27</b>	<b>-7</b>	<b>-10</b>	<b>11</b>	<b>5</b>	<b>3</b>	<b>1</b>	<b>15</b>																		<b>53</b>		

Figura 12. Matriz de Leopold (Elaboración propia)

### **Fase de construcción**

Indiscutiblemente los factores ambientales se verán afectados por la fase de construcción de la planta, pues la tala y desbroce de árboles, plantas y arbustos será necesaria para la adaptación del terreno. Esto provocará que el suelo se erosione y se generen partículas que puedan afectar a la calidad del aire o incluso llegar a crear turbidez en el río Francolí. Por otra parte, la maquinaria que se utilice para tal fin puede suponer un molestia por el ruido que puedan ocasionar. Pese a lo negativo, acondicionar el terreno hará que las estructuras y equipos que sean instalados en el lugar se sustenten sobre unos buenos cimientos y no sobre terreno desnivelado no apto para la actividad. Por último, en cuanto al medio físico, el paisaje sufrirá una transformación, sin embargo, como ya fue comentado, la planta se sitúa en zona industrial por lo que ninguna de las acciones del proyecto son de gran importancia.

En apartados anteriores consta que la fauna y la flora no son muy abundantes en la zona por tratarse de un emplazamiento industrial. Sin embargo, las pocas especies que puedan tener presencia sufrirán un impacto ligeramente negativo por las acciones de la fase de construcción.

En general, esta primera fase del proyecto generará un impacto negativo sobre los factores ambientales y biológicos, a pesar de ello, en el ámbito socioeconómico este tipo de proyectos suponen un impacto muy positivo para la economía y la generación de empleo.

### **Fase de explotación**

Sin duda la fase más duradera de las tres. Ocupar el terreno por un largo periodo de tiempo supone pequeños impactos negativos, pues destacaría la generación de ruido, el impacto visual del paisaje y el desplazamiento de la fauna y flora de la zona. Estos impactos suponen una importancia menor debido a ser un polígono industrial. En cambio, el impacto sí es positivo desde el punto de vista socioeconómico.

El adecuado manejo de lodos y residuos y la depuración del agua que se utiliza en la instalación, bien sea como agua de limpieza, de servicio o refrigerante, impacta positivamente contribuyendo a prevenir la turbidez y toxicidad del agua y a la creación de nuevos puestos de trabajo, ya que de ello se encargaría personal cualificado.

El tránsito de vehículos en el emplazamiento es inevitable, ya que son necesarios para acudir al puesto de trabajo de los operarios o para el transporte de mercancías y productos. El medio biológico y el suelo se verán afectados negativamente por el recurrente tránsito, pero el ruido que puedan llegar a provocar y la calidad del aire serán los que sufran un impacto más significativo. Pero no solo los vehículos atentan contra la calidad del aire, las emisiones a la atmósfera, que a priori solo se darían por fallos mecánicos de los equipos, impactan muy

negativamente sobre la calidad del aire. Como lo mencionado anteriormente, pese a los aspectos negativos, el factor socioeconómico se encuentra beneficiado.

#### **Fase de desmantelamiento**

Una vez la vida útil de la planta se acaba, se debe proceder al desmantelamiento. En cuanto a impacto ambiental se refiere, es una etapa bastante similar a la de construcción, pues la demolición de equipos y estructuras crea una elevada tasa de erosión del suelo, empeoramiento de la calidad del aire, generación de ruido y supone un peligro ante la fauna que pueda haber presente. Además la propia demolición hará que se generen residuos de obra que han de ser tratados por profesionales, es decir, generación de empleo, pero no deja de afectar negativamente al suelo o a la calidad del aire. Por último, mencionar que el gran impacto positivo que genera esta última fase es la recuperación del terreno. No obstante, la zona no deja de ser de ámbito industrial por lo que la importancia no es tan relevante como lo sería en otro lugar.

## **8. Medidas para la reducción de impactos**

A lo largo de toda la vida del proyecto se debe contar y aplicar una serie de medidas que mitiguen los impactos negativos hacia los seres humanos y el medioambiente.

#### **Medidas generales**

Lo primero de todo será siempre el debido cumplimiento legislativo para cualquiera de las tres fases del proyecto. Otro indispensable es contar con personal cualificado, competente y ético, pues esto mejorará la seguridad del resto de trabajadores y entorno, y apoyará a la mitigación de impactos. Por otro lado, el continuo control de calidad de agua, aire, suelo o emisiones de ruido será fundamental para el correcto desarrollo del proyecto.

#### **Medidas para la fase de construcción**

Uno de los principales problemas de esta primera fase es que el uso de vehículos pesados, herramientas y equipos favorece a la generación de partículas en suspensión que afectan a la calidad del aire y agua. Se propone el uso de barreras y aspersores de agua para reducir las emisiones. En consonancia con esto, los residuos derivados de la construcción deben ser tratados y gestionados de manera adecuada por profesionales. Por último, se planteará trabajar en franjas horarias en las que la emisión de ruido no esté tan delimitada, como es la madrugada, y un plan de emergencia que permita actuar de forma rápida y eficaz ante emergencias ambientales, como un derrame.

#### **Medidas para la fase de explotación**

En un planeta en el que los recursos son cada vez más limitados, aprovechar estos al máximo, implementando el uso de energías renovables y reduciendo la cantidad de residuo

generado, haría el proceso más óptimo y reduciría la huella de carbono. Esto se complementa si se realizan de manera periódica mantenimientos de equipos, tuberías y demás elementos de la planta, pues ayudan a prevenir fugas, accidentes y fallos que puedan causar graves impactos.

En relación a la gestión y tratamiento de residuos y emisiones, ya se mencionó que las posibles emisiones de gases causadas por el uso de válvulas de alivio se captarán para su posterior tratamiento. Sobre el agua involucrada en la planta, ha de ser tratada para que su descarga o reutilización cumpla con los estándares ambientales. Por otra parte, sin el reciclado y reutilización de materias primas este proceso sería inviable, tanto económica como ambientalmente.

Al igual que para la fase de construcción, el control de ruido y calidad del agua y aire de manera periódica es necesario para la mitigación de impactos. Como en este caso la operación de la planta es continua, no se puede trabajar en franjas horarias determinadas, sin embargo se medirá el nivel acústico en diferentes zonas de la parcela para evitar sobrepasar el nivel establecido por la ley. En el caso del agua y del aire, realizar el monitoreo permite identificar y corregir cualquier desviación que provoque algún tipo de impacto negativo.

#### **Medidas para la fase de desmantelamiento**

La primera medida a considerar será un plan de cierre del proyecto, con el que se busca la recuperación del terreno, limpiándolo, descontaminándolo, gestionando de manera adecuada todos los residuos peligrosos que se van a generar, reciclándolos siempre que sea posible. Por último se podría proponer la reforestación del lugar, sin embargo, como se trata de un polígono industrial no es una medida estrictamente necesaria pero que puede ser beneficiosa en cuanto a sostenibilidad y calidad del entorno se refiere.

## **9. Programa de vigilancia y seguimiento ambiental**

La Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental, establece la obligatoriedad de contar con un programa de vigilancia y seguimiento ambiental (PVSA) que garantice que se cumplan las indicaciones y medidas contenidas en el estudio de impacto ambiental, tanto para la fase de construcción como la de explotación. (1)

Durante la fase de construcción se aplicará este programa detectando y corrigiendo desviaciones que atenten contra el medioambiente y que no estaban comprendidas en el proyecto inicialmente. Supervisar el cumplimiento y ejecución de las medidas ambientales, suprimiendo, modificando o incluyendo nuevas medidas si fuera conveniente. (1)

Para la fase de explotación se busca analizar la respuesta del entorno ante la actividad de la planta, y verificar la correcta evolución de las medidas ambientales aplicadas. (1). Para el

PVSA se propone hacer un seguimiento de la evolución de la calidad del aire, calidad del agua y contaminación acústica. Para estos factores se presenta la Tabla 3, que recoge las pautas que se deben seguir respecto a cada uno.

Tabla 3. Modo de actuación para el PVSA (Elaboración propia)

	Calidad del aire	Calidad del agua	Ruido
<b>Objetivo</b>	Garantizar un buen estado del aire.	Garantizar un buen estado del agua.	Evitar elevados niveles de ruido.
<b>Parámetros a controlar</b>	Partículas en suspensión (2,5 y 10), O <sub>3</sub> , NO <sub>x</sub> y SO <sub>2</sub>	DQO, DBO, pH, temperatura, caudal, turbidez, toxicidad, etc.	Nivel de ruido
<b>Ubicación de control</b>	Planta y zonas próximas	Planta y río Francolí	Planta y zonas próximas
<b>Frecuencia de medida</b>	Diariamente	Semanalmente	Diariamente

La Generalitat de Catalunya cuenta con un equipo de Agentes Rurales encargados del seguimiento, vigilancia y gestión de las poblaciones en más de 500 localidades. Con su plan de vigilancia, que se elabora anualmente, identifican nuevas especies de fauna y flora, buscan nuevas poblaciones o referencias de nuevas no encontradas recientemente. Además, este cuerpo de agentes también se encarga de controlar la flora amenazada, comprobar los cambios que sufren las plantas existentes e incluso contabilizar el número de ejemplares. Por último, otro punto interesante de este grupo de profesionales localiza vertidos de escombros y gestiona su limpieza, instalación de vallas, señalización... (21). Esta herramienta que facilita el gobierno catalán supone una ayuda complementaria al propio programa que se plantea para la planta de producción de anhídrido acético.

## 10. Síntesis y conclusiones

Se ha realizado el Estudio de Impacto Ambiental para la planta de producción de anhídrido acético por carbonilación de acetato de metilo. El solar donde se ubica se encuentra en el polígono industrial de El Morell en la provincia de Tarragona, cuyos factores climatológicos y geológicos no suponen un problema para dicho proyecto.

Se valoró el impacto ambiental mediante una Matriz de Leopold, con la que se concluyó que el impacto de algunas acciones sobre los medios físico y biológico iban a ser ligeramente negativas y hacia el medio socioeconómico muy positivas. Para mitigar los impactos negativos se plantearon una serie de medidas como hacer controles de calidad del aire, de agua y de emisiones, apoyar a la economía circular reutilizando y reciclando materias primas o hacer un uso responsable del agua entre otras.

Por último, se plantaron Programas de Vigilancia y Seguimiento Ambiental para garantizar el correcto cumplimiento de las medidas propuestas para la reducción de impactos.

## 11. Bibliografía

1. **Boletín Oficial del Estado.** *Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental.* España : s.n., 2013.
2. **COMISIÓN EUROPEA.** Documentos de referencia sobre las mejores técnicas disponibles. [En línea] [Citado el: 12 de Junio de 2024.] <https://eippcb.jrc.ec.europa.eu/es/reference>.
3. **Diario Oficial de la Unión Europea.** *DECISIÓN DE EJECUCIÓN (UE) 2017/2117 DE LA COMISIÓN -de 21 de noviembre de 2017- por la que se establecen las conclusiones sobre las mejores técnicas disponibles (MTD) conforme a la Directiva 2010/75/UE del Parlamento Europeo y del Consejo en la industria.* 2017.
4. **Boletín Oficial del Estado.** *Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido.* España : s.n., 2003.
5. **METEOBLUE.** Meteoblue. [En línea] [Citado el: 3 de Marzo de 2024.] [https://www.meteoblue.com/es/tiempo/historyclimate/climatemodelled/tarragona\\_espa%c3%b1a\\_3108288](https://www.meteoblue.com/es/tiempo/historyclimate/climatemodelled/tarragona_espa%c3%b1a_3108288).
6. **Boletín Oficial del Estado.** *Ley 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera.* España : s.n., 2007.
7. —. *Real Decreto 102/2011, de 28 de enero, relativo a la mejora de la calidad del aire.* España : s.n., 2011.
8. **MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO.** Índice de Calidad del Aire. [En línea] [Citado el: 12 de Junio de 2024.] <https://www.miteco.gob.es/gl/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/atmosfera-y-calidad-del-aire/calidad-del-aire/ica.html>.
9. **Boletín Oficial del Estado.** *Disposición 10426 del BOE núm. 242 de 2020.* s.l. : España, 2020.
10. **INSTITUTO GEOGRÁFICO NACIONAL.** IGN. *Centro Nacional de Información Geográfica.* [En línea] [Citado el: 3 de Marzo de 2024.] <https://www.ign.es/web/mapas-sismicidad>.
11. **LOPEZ GETA, J. A., y otros.** *Dirección de aguas subterráneas: Campo de Tarragona.* Instituto técnico GeoMinero de España. Tarragona : s.n., 1989.

12. **GENERALITAT DE CATALUNYA.** Gencat Hidrología. [En línea] [Citado el: 12 de Junio de 2024.] <https://parcsnaturals.gencat.cat/es/xarxa-de-parcs/poblet/el-paratge/patrimoni-natural-i-cultural/hidrologia/>.
13. —. gencat: flora y vegetación. [En línea] 9 de Enero de 2021. [Citado el: 12 de Junio de 2024.] <https://parcsnaturals.gencat.cat/es/xarxa-de-parcs/poblet/el-paratge/patrimoni-natural-i-cultural/flora-i-vegetacio/index.html>.
14. —. gencat: Flora autóctona protegida y amenazada. [En línea] [Citado el: 12 de Junio de 2024.] [https://mediambient.gencat.cat/es/05\\_ambits\\_dactuacio/patrimoni\\_natural/flora-autoctona-protegida/index.html](https://mediambient.gencat.cat/es/05_ambits_dactuacio/patrimoni_natural/flora-autoctona-protegida/index.html).
15. —. gencat: Fauna. [En línea] 19 de Julio de 2023. [Citado el: 12 de Junio de 2024.] <https://parcsnaturals.gencat.cat/es/detalls/Article/Fauna-00009>.
16. **MINISTERIO PARA LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA Y EL RETO DEMOGRÁFICO.** Red Natura 2000. [En línea] [Citado el: 11 de Junio de 2024.] <https://www.miteco.gob.es/es/biodiversidad/temas/espacios-protegidos/red-natura-2000.html>.
17. **GENERALITAT DE CATALUNYA.** gencat. [En línea] [Citado el: 12 de Junio de 2024.] <https://web.gencat.cat/es/actualitat/detall/Som-8-milions>.
18. —. *Datos básicos Cataluña.* 2021.
19. —. *La economía catalana.* 2016.
20. **VERD, J.** *RECURSOS PARA LAS CTMA: LA MATRIZ DE LEOPOLD, UN INSTRUMENTO PARA ANALIZAR NOTICIAS DE PRENSA DE TEMATICA AMBIENTAL.* 2000. ISSN: 1132-9157.
21. **GENERALITAT DE CATALUNYA.** gencat: Seguimientos, vigilancia y gestión. [En línea] [Citado el: 13 de Junio de 2024.] [https://mediambient.gencat.cat/es/05\\_ambits\\_dactuacio/patrimoni\\_natural/flora-autoctona-protegida/vigilancia-i-gestio/](https://mediambient.gencat.cat/es/05_ambits_dactuacio/patrimoni_natural/flora-autoctona-protegida/vigilancia-i-gestio/).
22. **SÓCRATES.** Solosequenosenada. [En línea] 8 de Mayo de 2008. [Citado el: 12 de Junio de 2024.] <https://www.solosequenosenada.com/2008/05/08/mapa-de-rios-afluentes-acuiferos-y-plantas-embotelladoras-de-cataluna/>.

---

**DOCUMENTO V:**  
**PRESUPUESTO**

---

## Índice

1.	Introducción.....	1
2.	Estimación del coste de los equipos .....	1
2.1.	Método factorial para el coste de los equipos .....	1
2.2.	Corrección de costes .....	2
2.3.	Actualización de costes.....	2
2.4.	Costes de los equipos calculados por factores .....	3
2.5.	Obtención de costes por catálogo .....	4
3.	Coste total de capital .....	4
4.	Desglose de las partidas.....	6
5.	Presupuesto total.....	7
6.	Bibliografía.....	9

## 1. Introducción

En el presente documento, se determinará la cuantía necesaria para llevar a cabo la construcción de la planta de producción de anhídrido acético.

Debido a que se está realizando un diseño preliminar, es decir, se está en una de las primeras fases del proyecto, el presupuesto resultante será solo una estimación. En concreto, según la *Asociación para la Promoción de la Estimación del Coste Internacional* (AACE Internacional) en este proyecto se llevará a cabo una estimación de Clase IV, ya que la estimación de los costes se basa en datos limitados, por lo que la precisión será de  $\pm 30\%$ . (1)

En conclusión, se empleará un método para determinar los costes de los equipos individuales de la planta y, posteriormente, se hallará la cuantía del resto de partidas aplicando un método factorial. A continuación, se indica como determinar un valor aproximado haciendo uso del diseño básico realizado en el *Anexo II. Dimensionamiento básico de los equipos*.

## 2. Estimación del coste de los equipos

### 2.1. Método factorial para el coste de los equipos

Para estimar el coste de los distintos equipos existen varios tipos de métodos preliminares. En este estudio en concreto, se empleará uno de los más simples, el cual consiste en escalar el coste de los equipos utilizando información de los precios que tienen equipos similares en la industria

Por tanto, se utiliza la *Ecuación 1*, que permite calcular el coste del equipo adquirido,  $C_e$ , a través de una serie de constantes que dependerán del tipo de equipo utilizado,  $a$ ,  $b$  y  $n$ . Asimismo, el coste dependerá de un parámetro de tamaño característico,  $S$ , de cada unidad y el cual debe estar entre un valor mínimo y máximo dado.

$$C_e = a + b \cdot S^n \quad [1]$$

En la Tabla 1 se muestran las constantes para cada equipo, así como el parámetro de tamaño y los rangos entre los que se puede considerar.

Tabla 1. Parámetro para el cálculo del coste adquirido de los equipos (1)

Equipo	Unidades para tamaño, S	S <sub>inferior</sub>	S <sub>superior</sub>	a	b	n
Mezclador de hélice	Potencia motor, kW	5,0	75	15000	990	1,05
Centrífuga de una etapa	Caudal L/s	0,2	126	6900	206	0,9
Motor de explosión	Potencia, kW	1,0	2500	-950	1770	0,6
Intercambiador de carcasa y tubo	Área, m <sup>2</sup>	10	1000	24000	46	1,2
Reactor agitado, encamisado	Volumen, m <sup>3</sup>	0,5	100	53000	28000	0,8
Plato tamiz	Diámetro, m	0,5	5,0	110	380	1,8
Intercambiador de doble tubo	Área, m <sup>2</sup>	1,0	80	1600	2100	1,0
Recipientes a presión vertical de acero al carbono	Masa de la carcasa, kg	160	250000	10000	29	0,85

## 2.2. Corrección de costes

Los costes calculados en el apartado anterior con la *Ecuación 1* deben ser corregidos, ya que el coste puede variar dependiendo de las condiciones de operación y del material de construcción de cada equipo. Por tanto, el coste corregido se calcula mediante la *Ecuación 2*.

$$C_{ec} = C_e \cdot f_T \cdot f_P \cdot f_m \quad [2]$$

El  $f_T$  se corresponde al factor aplicado dependiendo de la temperatura de operación, ya que no será lo mismo el coste si se opera a bajas temperaturas que a altas temperaturas. El factor para distintas temperaturas se muestra en la Tabla 2.

Tabla 2. Factor de corrección por temperatura

Temperatura de diseño (°C)	Factor de corrección
0-100	1
300	1,6
500	2,1

El  $f_P$  se corresponde al factor aplicado dependiendo de la presión de operación, ya que no será lo mismo el coste si se opera a bajas presiones que a altas presiones. El factor para distintas presiones se muestra en la Tabla 3.

Tabla 3. Factor de corrección por presión

Presión de diseño (°C)	Factor de corrección
0,01	2
0,1	1,3
0,5 a 7	1
50	1,5
100	1,9

Por último, el  $f_m$  se corresponde al factor de corrección dependiendo del material utilizado en la construcción. El factor para los distintos materiales se muestra en la Tabla 4.

Tabla 4. Factor de corrección por material

Material	Factor de corrección
Acero al carbono	1,0
Acero inoxidable 304	1,3
Acero inoxidable 316	1,3
Hastelloy C	1,55
Monel	1,65
Níquel e Inconel	1,7

## 2.3. Actualización de costes

Los costes calculados anteriormente se calculan respecto a un año concreto, por ello es necesario actualizarlos al año en el que se llevará a cabo la compra de los equipos. En concreto, la bibliografía utilizada se corresponde con el año 2007, donde su índice CEPCI (*Chemical Engineering Plant Cost Index*) es de 509,7. De modo que, se debe actualizar el coste utilizando la *Ecuación 3* al año 2024, cuyo valor de CE para febrero era de 795,4. (2)

$$C_{e,2024} = C_{e,2007} \cdot \frac{\text{Índice de coste}_{2024}}{\text{Índice de coste}_{2007}} \quad [3]$$

Asimismo, los precios obtenidos anteriormente se obtienen en dólares y, puesto que la instalación de la planta se lleva a cabo en España, se deben convertir los precios a su valor en euros. Según bibliografía actualmente en mayo de 2024, un dólar se corresponde a 0,92 euros.

## 2.4. Costes de los equipos calculados por factores

Finalmente se calcula el precio de los equipos y el coste total. La mayoría de los equipos se encuentran dentro de los rangos del parámetro de tamaño S.

Cabe destacar que, para el coste de las bombas se ha de sumar por separado el coste de la bomba y del motor de explosión. Algunas de las bombas no se encuentran dentro del rango indicado para el motor, pero se tomará el valor obtenido como válido, ya que no se cuenta con otra manera de estimar el coste. Asimismo, el precio de la bomba P-104 se estimará de la misma manera que las otras, a pesar de ser una centrífuga multietapa.

Además, como no se han encontrado precios de mercado para el separador sin almohadilla antivaho del reactor R-101 y del separador V-101, se ha decidió estimar su precio como si fueran un plato tamiz.

Los precios finales de compra de los equipos de la planta se muestran en la Tabla 5.

Tabla 5. Estimación de los costes de los distintos equipos

	S	Ce (\$)	$f_T$	$f_P$	$f_m$	Ce (€)	Ce,2024 (€)
Bombas							
P-101 A/B	2,74	14.820,87					
Motor P-101 A/B	0,95	1.542,66	1,00	1,00	1,30	42.545,16	60.910,85
P-102 A/B	6,97	16.164,00					
Motor P-102 A/B	55,45	37.485,95	1,00	1,50	1,30	209.234,82	299.556,27
P-203 A/B	1,94	7.273,53					
Motor P-203 A/B	1,01	830,47	1,00	1,00	1,30	21.070,39	30.165,95
P-204 A/B	1,24	7.150,21					
Motor P-204 A/B	0,83	629,18	1,60	1,00	1,30	32.362,26	46.332,25
Tanque de mezcla							
TM-101	54,051	80.324,42	1	1	1,30	104.421,74	149.498,00
Intercambiadores de calor							
E-101	55,46	29.723,72	1,60	1,50	1,30	92.738,00	132.770,69
E-102	29,25	26.642,59	1,60	1,50	1,30	83.124,89	119.007,82
E-201	145,70	42.150,71	1,60	1,00	1,30	87.673,47	125.519,92
E-202	100,61	35.638,98	1,60	1,00	1,30	74.129,08	106.128,75
E-203	558,22	114.974,56	1,00	1,00	1,30	149.466,93	213.988,08
E-204	108,39	36.728,10	1,60	1,00	1,30	76.394,44	109.372,02
E-205	33,72	27.134,67	1,60	1,00	1,30	56.440,12	80.803,91
E-206	82,43	33.163,21	1,60	1,00	1,30	68.979,47	98.756,18
E-207	1,58	4.913,00	1,60	1,00	1,30	10.219,04	14.630,34
E-208	81,16	32.993,91	1,60	1,00	1,30	68.627,34	98.252,04
Reactor							
R-101	60,38	797.515,06	1,60	1,50	1,00	1.914.036,14	2.740.277,78

Tabla 5. Continuación de la estimación de los costes de los distintos equipos

	S	Ce (\$)	$f_T$	$f_P$	$f_m$	Ce (€)	Ce,2024 (€)
Separador flash							
V-201	337,11	14.081,20	1,60	1,00	1,30	29.293,05	41.938,13
Columnas de destilación							
T-201	5670,48	54.975,37	1,60	1,00	1,30	114.348,76	217.217,03
T-202	16033,68	118.811,89	1,60	1,00	1,30	247.128,72	587.430,24
Platos y separador antivaho							
Platos T-201	1,50	17.968,05	1,60	1,00	1,30	37.373,53	53.506,76
Platos T-202	1,72	78.452,42	1,60	1,00	1,30	163.181,03	233.622,21
Separador V-101	0,50	219,13	1,60	1,00	1,30	455,78	652,53
Separador R-101	2,34	168,51	1,60	1,50	1,30	525,76	752,72

## 2.5. Obtención de costes por catálogo

La determinación del coste de determinados equipos no es posible mediante el método de los factores, bien porque no se encuentran dentro del rango indicado en bibliografía o porque no están definidos como equipo. En estos casos, se tomarán precios otorgados por catálogos de distintos proveedores. Este es el caso de las distintas válvulas del proceso, del compresor C-101 y del distribuidor del reactor R-101.

Los precios que tendrán cada uno de estos equipos se indican en la Tabla 6.

Tabla 6. Costes de equipos por catálogo

Equipo	Coste	Vendedor
Compresor C-101	152.000 €	Shanghai Rocky Machinery Co., Ltd. (3)
Válvula VLV-201	10.000 €	BVALVE (4)
Válvula VLV-202	1.000 €	BVALVE (4)
Válvula VLV-203	1.000 €	BVALVE (4)
Distribuidor de gas	1.000 €	Pingxiang Fxsino Petrochemical Packing Co., Ltd. (5)

## 3. Coste total de capital

El coste total de capital de la planta se corresponde con la inversión de capital necesario para llevar a cabo el diseño, la construcción e instalación de la misma. Se calcula como la suma de todos los costes fijos más la cantidad de capital circulante necesario. (1)

Para calcular la inversión de capital fijo se han de tener en cuenta los costes asociados a las siguientes partidas:

- La inversión de los límites internos de la planta, denominado como ISBL, y que se corresponde con el coste de construcción de la planta en sí misma.
- La inversión *offsite* u OSBL, es decir, el coste de las modificaciones y mejoras en la infraestructura del sitio.
- Costes de ingeniería y diseño.
- Capital de contingencias

- Adquisición de la parcela

Para estimar este coste ISBL se ha utilizado el método factorial, que permite estimar los costes de la planta a partir del coste de los equipos mediante la *Ecuación 4*. Donde  $C_{ISBL}$  se corresponde con la inversión ISBL y  $C_{e,i,SS}$  es el coste asociado a cada uno de los equipos, siendo su material de construcción acero inoxidable AISI 316. (1)

$$C_{ISBL} = \sum_{i=1}^{i=M} C_{e,i,SS} \cdot [(1 + f_p) + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l)/f_m] \quad [4]$$

Los factores indicados en la ecuación hacen referencia a distintos costes directos asociados a la construcción de la planta. El valor de estos factores de corrección y su significado se indican en la Tabla 7.

Tabla 7. Factores empleados en el cálculo de la inversión ISBL (1)

Partida	Factor	Valor
Instalación del equipo	$f_{er}$	0,3
Tuberías	$f_p$	0,8
Instrumentación y control	$f_i$	0,3
Electricidad	$f_{el}$	0,2
Obra civil	$f_c$	0,3
Estructuras y edificios	$f_s$	0,2
Aislante térmico y pintura	$f_l$	0,1

Finalmente se puede obtener el coste total de capital fijo,  $C_{FC}$ , utilizando la *Ecuación 5*. Esta fórmula matemática tiene en cuenta los costes citados anteriormente: el coste *offsite* (OS), el coste asociado a la ingeniería y diseño (D&E) y el capital para imprevistos (X).

$$C_{FC} = C_{ISBL} \cdot (1 + OS) \cdot (1 + D\&E + X) + C_{parcela} \quad [5]$$

El método factorial emplea los factores señalados en la Tabla 8 para obtener el valor de los costes mencionados a partir del coste ISBL.

Tabla 8. Factores para determinar el coste de capital fijo total

Partida	Factor	Valor
Externos	OS	0,3
Diseño e ingeniería	D&E	0,3
Contingencia	X	0,1

Por último, para determinar el coste total de capital necesario se debe determinar el capital de trabajo, es decir, la suma de dinero que se necesita inicialmente para poner en funcionamiento la planta hasta que se obtengan beneficios. Este capital circulante se utiliza para la obtención de los reactivos y de los catalizadores, el pago del sueldo de los trabajadores, asumir el coste de productos entregados a la espera de que sean pagados, etc.

Habitualmente se calcula asumiendo que se corresponde al 15% de la suma del capital ISBL y el *offsite*, *Ecuación 6*.

$$C_{FC} = (C_{ISBL} + C_{OS}) \cdot 0,15 \quad [6]$$

## 4. Desglose de las partidas

A continuación, se presentan los costes asociados a las distintas partidas tratadas en el apartado posterior.

En primer lugar, en la Tabla 9 se presenta la partida de los costes directos de la planta, que incluye el coste ISBL y el coste *offsite*.

Tabla 9. Partidas de los costes directos

Nº partida	Partida	Descripción	Medición	Coste (€)
1	ISBL	Inversión dentro del límite de batería	Partida alzada	16.473.521,84
1.1	Coste total de equipos	Compra, distribución y entrega de los equipos de la planta	Partida alzada	5.726.090,48
1.2	Instalación de los equipos	Erección, cimentación y trabajos estructurales menores	Partida alzada	1.321.405,49
1.3	Tuberías	Instalación, aislamiento, pintura y accesorios de tuberías	Partida alzada	4.580.872,38
1.4	Instrumentación y control	Sistemas destinados al control y seguridad de la planta	Partida alzada	1.321.405,49
1.5	Instalación eléctrica	Compra de cableado, iluminación e instalación	Partida alzada	880.937,00
1.6	Ingeniería Civil	Carreteras, muros, cimentación, desagües, etc.	Partida alzada	1.321.405,49
1.7	Estructuras y edificaciones	Edificios, oficinas, laboratorios, talleres, etc.	Partida alzada	880.937,00
1.8	Aislantes térmico y pinturas	Adquisición y disposición del material aislante y pintura.	Partida alzada	440.468,50
2	Coste <i>offsite</i>	Utilidades, subestaciones eléctricas, torres de enfriamiento, servicios de emergencia, etc.	Partida alzada	4.942.056,55

En segundo lugar, en la Tabla 10 se define el coste de compra del terreno donde se sitúa la planta.

Tabla 10. Partida de la adquisición del terreno

Nº partida	Partida	Descripción	Medición	Coste (€)
3	Adquisición de la parcela	Solar situado en el polígono de El Morell	Partida alzada	15.625.737,00

Los costes indirectos, que engloban la partida de los costes de diseño e ingeniería y los costes por contingencias, se presentan en la Tabla 11.

Tabla 11. Partidas de los costes indirectos

Nº partida	Partida	Descripción	Medición	Coste (€)
4	Diseño e ingeniería	Diseño detallado y servicios de ingeniería requeridos para llevar a cabo el proyecto	Partida alzada	6.424.673,52
5	Contingencias	Fondo destinado a imprevistos que no fueron contemplados en el presupuesto inicial	Partida alzada	2.141.557,84

En la Tabla 12 se muestra el cómputo global de las partidas anteriores, es decir, el coste del capital inmovilizado.

Tabla 12. Partida del coste inmovilizado

<b>Coste total de capital fijo</b>	<b>Coste (€)</b>
	45.607.546,74

Por último, en la Tabla 13 se presenta el capital circulante.

Tabla 13. Partida del capital circulante

<b>Nº partida</b>	<b>Partida</b>	<b>Descripción</b>	<b>Medición</b>	<b>Coste (€)</b>
6	Capital circulante	Capital necesario para asumir los costes iniciales de la planta	Partidaalzada	3.212.336,76

## 5. Presupuesto total

Finalmente, si se lleva a cabo la suma de las partidas definidas anteriormente se obtiene la inversión total necesaria para la planta de producción de anhídrido acético, que se detalla en la Tabla 14.

Tabla 14. Presupuesto

<b>Partida</b>	<b>Cuantía (€)</b>
Coste total de los equipos	5.726.090,48
Instalación de los equipos	1.321.405,49
Tuberías	4.580.872,38
Instrumentación y control	1.321.405,49
Electricidad e iluminación	880.937,00
Obra Civil	1.321.405,49
Estructuras y edificios	880.937,00
Revestimiento, aislante y pintura	440.468,50
Offsite	4.942.056,55
Diseño e Ingeniería	6.424.673,52
Contingencias	2.141.557,84
Precio de la parcela	15.625.737,00
Capital circulante	3.212.336,76
<b>Total</b>	<b>48.819.883,50</b>

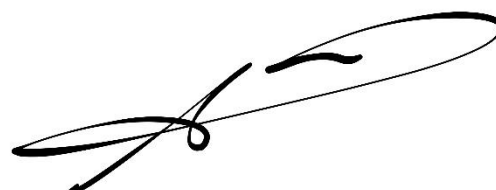
El presupuesto total para la planta de producción de anhídrido acético a partir de acetato de metilo y monóxido de carbono es de CUARENTA Y OCHO MILLONES OCHOCIENTOS DIECINUEVE MIL OCHOCIENTOS OCHENTA Y TRES EUROS Y CINCUENTA CÉNTIMOS (48.819.883,50 €).

En Santiago de Compostela a 7 de Junio de 2024

Los autores del proyecto,

A handwritten signature in black ink, consisting of stylized, overlapping letters that appear to be 'RT' followed by a long horizontal line extending to the right.

Rodrigo Tasende Reboredo

A handwritten signature in black ink, featuring a large, sweeping loop on the right side and a smaller loop on the left, connected by a thin line.

Jacobo Torres Pérez

## 6. Bibliografía

1. **SINNOTT, R. K. y TOWLER, G.** *Diseño en Ingeniería Química*. 5ª ed. Barcelona : Reverté, 2012. ISBN 978-84-291-7199-0.

2. **MAXWELL, C.** Towering skills. *Cost Indices*. [En línea] 6 de Mayo de 2024. [Citado el: 23 de Mayo de 2024.] <https://toweringskills.com/financial-analysis/cost-indices/>.

3. **SHANGHAI ROCKY MACHINERY CO., LTD.** Alibaba.com. *Factory Supply 250 bar Gas Lpg Compressor For Gas Station*. [En línea] [Citado el: 10 de Junio de 2024.] [https://www.alibaba.com/product-detail/Factory-Supply-250-bar-Gas-Lpg\\_1600521842136.html?spm=a2700.galleryofferlist.normal\\_offer.d\\_price.6b4a4772CFUINV](https://www.alibaba.com/product-detail/Factory-Supply-250-bar-Gas-Lpg_1600521842136.html?spm=a2700.galleryofferlist.normal_offer.d_price.6b4a4772CFUINV)

4. **BVALVE.** BVALVE EXPORT. *Product overview*. [En línea] [Citado el: 30 de Mayo de 2024.] <https://thebellowssealedvalve.com/products/>.

5. **PINGXIANG FXSINO PETROCHEMICAL PACKING CO., LTD.** Made in China. [En línea] [Citado el: 7 de Junio de 2024.] [https://es.made-in-china.com/co\\_jxfxsino/product\\_Metal-Perforated-Plate-Corrugated-Structured-Packing\\_eghgouuuy.html?pv\\_id=1huj7hogiaa1&faw\\_id=1huj7mt5q86e](https://es.made-in-china.com/co_jxfxsino/product_Metal-Perforated-Plate-Corrugated-Structured-Packing_eghgouuuy.html?pv_id=1huj7hogiaa1&faw_id=1huj7mt5q86e).