



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**PRODUCCIÓN DE BIOETILENO A
PARTIR DE BIOETANOL MEDIANTE
DESHIDRATACIÓN CATALÍTICA**

por

Aída González Rodríguez
Guillermo Burón Rodríguez

Oviedo, Julio de 2024

AGRADECIMIENTOS

A nuestros familiares y amigos, sin cuyo apoyo inagotable durante todos estos años no habríamos llegado hasta aquí.

Muchas gracias a todos

RESUMEN

El etileno es un compuesto clave en la manufactura de plásticos y disolventes, entre otros materiales y productos de gran demanda. Con la creciente tendencia hacia procesos más sostenibles y menos dañinos para el medio ambiente, tratando de depender cada vez menos de los combustibles fósiles, se hace imprescindible analizar nuevas metodologías para la producción de etileno, que actualmente se obtiene por craqueo térmico.

Este proyecto, que aborda una de esas metodologías más sostenible y ecológica, se enfoca en estudiar la viabilidad técnica, económica y ambiental de instalar una planta de producción de bioetileno a través de una deshidratación catalítica que utilice bioetanol como materia prima.

Las siguientes páginas se enfocan en el estudio de los bloques más críticos del proceso, entre los que se encuentran el diseño del reactor catalítico y la posterior separación de productos y reactivos sin reaccionar.

Aunque con los precios actuales el proyecto no resulta viable desde el punto de vista económico, la alta volatilidad de los mercados y la presión social y política para transformar las economías hacia un modelo productivo más verde podrían ayudar a que procesos como el estudiado fueran más competitivos.

EXECUTIVE SUMMARY

Ethylene is a key compound in the manufacture of plastics and solvents, among other highly demanded materials and products. With the growing trend towards more sustainable and environmentally friendly processes, and striving to rely less on fossil fuels, it is essential to analyze new methodologies for ethylene production, which is currently obtained through thermal cracking.

This project, which addresses one of these more sustainable and ecological methodologies, focuses on studying the technical, economic, and environmental feasibility of installing a bioethylene production plant through catalytic dehydration using bioethanol as the raw material.

The following pages are focused on studying the most critical blocks of the process, including the design of the catalytic reactor and the subsequent separation of products and unreacted reactants.

Although the project is not economically viable at current prices, the high volatility of markets and the social and political pressure to transform economies towards a greener production model could help make processes like the one studied more competitive.

INDICE

1. CONSIDERACIONES PREVIAS	1
1.1. Etileno y bioetileno	2
1.2. Materias primas	3
1.3. Agentes implicados	4
1.4. Aplicaciones y usos finales	5
2. OBJETO	7
3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO	9
3.1. Localización de la planta	10
3.2. Potencial económico y tamaño de planta	12
3.3. Planteamiento	14
3.4. Diagrama de bloques	15
4. BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA	16
4.1. Balances de materia	17
4.2. Balances de energía	17
5. DIAGRAMAS DE FLUJO Y OTROS DOCUMENTOS GRÁFICOS	18
6. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA DEL PROCESO	20
6.1. Análisis pinch: determinación de necesidades mínimas de servicios	21
6.2. Topología de la red de cambiadores	24
7. CONSIDERACIONES DE SEGURIDAD E IMPACTO AMBIENTAL	25
7.1. Riesgos de los productos químicos empleados	26
7.2. Riesgos de los equipos, condiciones de operación y mantenimiento	28
7.2.1. Reactor	28

7.2.2. Compresor	28
7.2.3. Separador	29
7.2.4. Columna de destilación	29
7.2.5. Intercambiadores de calor	30
7.2.6. Riesgos generales y equipos auxiliares	30
7.3. Análisis detallado de riesgo y operabilidad (HAZOP)	31
7.4. Consideraciones de impacto ambiental	40
7.4.1. Fase de Construcción	40
7.4.2. Fase de Explotación	41
7.4.3. Fase de Demolición	42
8. EVALUACIÓN ECONÓMICA	43
8.1. Capital de inversión total	44
8.1.1. Capital fijo	44
8.1.2. Capital circulante	45
8.1.3. Adquisición del terreno	45
8.2. Capital de operación	46
8.2.1. Costes de operación fijos	46
8.2.2. Costes de operación variables	46
8.3. Ingresos anuales	48
8.4. Rentabilidad de la planta y conclusiones	48
9. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	50
10. ANEXOS	53
A. Lista de símbolos	54
B. Localización de la planta	56
C. Topología de la red de cambiadores	58
D. Evaluación económica	61

INDICE DE TABLAS

Tabla I. Progresión de materias primas para la obtención de bioetanol (2021-2028)	3
Tabla II. Balances de materia del proceso	17
Tabla III. Potencia requerida por cada equipo durante el proceso	17
Tabla IV. Identificación de corrientes calientes y frías	21
Tabla V. Temperaturas modificadas y capacitancias de cada corriente	22
Tabla VI. Cascada de energía para la estimación del PINCH	23
Tabla VII. Necesidades energéticas del proyecto	24
Tabla VIII. Riesgos de los productos químicos empleados	26
Tabla IX. Límites de inflamabilidad de los productos químicos empleados	27
Tabla X. Palabras guía y definición para el HAZOP	31
Tabla XI. HAZOP aplicado a la columna de destilación (Alimentación)	32
Tabla XII. HAZOP aplicado a la columna de destilación (Columna)	34
Tabla XIII. HAZOP aplicado al Reactor	37
Tabla XIV. HAZOP aplicado al Reactor (Alimentación de bioetanol)	39
Tabla XV. Estimación de costes	45
Tabla XVI. Resumen del capital de inversión total	46
Tabla XVII. Estimación de los costes de operación fijos	46
Tabla XVIII. Estimación del coste anual de materias primas	47
Tabla XIX. Trabajadores por turno según el equipo	47
Tabla XX. Costes de operación variables	48
Tabla XXI. Estimación de los ingresos anuales por venta de productos	48
Tabla XXII. Resumen de costes e ingresos anuales	48

INDICE DE FIGURAS

Figura 1. Aplicaciones y usos finales (2021)	5
Figura 2. Localización del Polígono Industrial de Teixeiro	10
Figura 3. Emplazamiento de la planta	11
Figura 4. Datos catastrales del emplazamiento de la planta	12
Figura 5. Tendencia del mercado del etileno	13
Figura 6. Reparto por regiones del mercado del Etileno en 2023	14
Figura 7. Diagrama de bloques del proceso	15
Figura 8. Diagrama de flujo del proceso	19
Figura 9. Curva compuesta global del proceso	23

1. CONSIDERACIONES PREVIAS

1.1. ETILENO Y BIOETILENO

El bioetileno y el etileno son gases incoloros e inflamables, químicamente idénticos. Actualmente el etileno producido por craqueo térmico se fabrica a gran escala, alcanzando 150 millones de toneladas anuales a nivel mundial. Se trata del alqueno más simple utilizado en la industria y en algunos vegetales funciona como una hormona.

Pese a que se fabrique mediante el craqueo térmico de gas licuado de petróleo o nafta, lo que implica un alto consumo de energía y una gran emisión de gases de efecto invernadero; actualmente la producción de etileno es un indicador de la riqueza industrial de un país, siendo el producto petroquímico más importante como indicador de competitividad a nivel de desarrollo tecnológico. Por otro lado, destacan su alta explosividad y naturaleza cancerígena, se trata de una sustancia peligrosa, motivo por el cual en varios países están generando y aplicando legislaciones para regular su uso y proteger el medio ambiente. Siguiendo esta línea, en enero de 2020 un grupo de 364 organizaciones tanto ambientales como otras no gubernamentales presentaron a la Agencia de Protección Ambiental de EEUU (EPA) una solicitud de revisión de los estándares aplicables a la producción de plásticos derivados del petróleo (*The Business Research Company, 2023*).

Una posible alternativa para reducir la dependencia humana de los combustibles fósiles y minimizar el impacto ambiental sería comenzar a sustituir el etileno tradicional obtenido mediante craqueo térmico por el nuevo bioetileno. De esta forma también se lograría reducir el impacto ambiental en otros sectores, como transporte, envasado y embalaje, que presentan un aumento exponencial de la demanda de materiales fabricados a partir de etileno a consecuencia de la rápida urbanización e industrialización de los últimos años.

Se debe tener en cuenta el marco socioeconómico actual con la guerra entre Rusia y Ucrania, siendo Rusia uno de los principales proveedores de combustibles fósiles a nivel mundial. Desde la invasión rusa a Ucrania en febrero de 2022 los precios de los combustibles fósiles, tanto provenientes de la propia Rusia como de sus competidores, principalmente Estados Unidos y Arabia Saudí, han sufrido grandes fluctuaciones, generando un impacto en la economía y en la industria global, que está obligando especialmente a los países europeos a buscar alternativas para mantener la producción de etileno y sus derivados.

Debido a lo antes mencionado, las compañías productoras y consumidoras de etileno por el método tradicional están invirtiendo en buscar vías de producción de bioetileno y, así, obtener polímeros verdes cuya fabricación sea más eficiente tanto en el consumo energético como en el impacto ambiental, pero que conserven la misma versatilidad de los polímeros fabricados mediante síntesis química.

Los nuevos procesos de producción de bioetileno están basados en la deshidratación catalítica de bioetanol, el cual se obtiene a partir de la fermentación de distintos recursos renovables que se comentarán a continuación.

1.2. MATERIAS PRIMAS

Cuando la literatura científica hace referencia a las materias primas de las que proviene el bioetileno, realmente menciona las necesarias para obtener bioetanol, ya que se trata de un producto intermedio de este proceso.

Tal y como se muestra en la Tabla I (*The Insight Partners, 2021*), la mayor parte del bioetileno producido hoy en día se obtiene de bioetanol producido mediante la fermentación directa de azúcares, seguido, aunque con una diferencia significativa, del obtenido a partir de almidón y, por último, del obtenido a partir de biomasa lignocelulósica. Se espera que para 2028 se mantengan estas tendencias, ya que hoy en día el bioetanol se está obteniendo mediante fermentación, y este proceso resulta mucho más sencillo y económico partiendo de azúcares o almidón de maíz que de biomasa lignocelulósica, que requieren pretratamientos adicionales para liberar los azúcares que contienen por lo que aumenta el coste y la complejidad del proceso.

Tabla I. Progresión de materias primas para la obtención de bioetanol (2021-2028) (*The Insight Partners, 2021*)

Materia prima	2021	2028
Azúcares	60.7	61.0
Almidón	25.1	24.2
Biomasa lignocelulósica	14.2	14.8

Como se puede comprobar, el bioetanol se obtiene a partir de materias primas de alta disponibilidad en todo el planeta, lo que también es una ventaja en comparación con los combustibles fósiles, ya que no se está sujeto a una volatilidad de precios casi permanente y se acortan considerablemente las cadenas de suministro. Un punto importante es tratar de utilizar aquellas que no compitan con el sector alimentario (como por ejemplo maíz, trigo o remolacha), por lo que cobrarían interés los materiales lignocelulósicos, la fuente renovable más abundante del planeta, entre los que se incluyen: la biomasa virgen (árboles, arbustos y pastos), la biomasa residual (subproductos de agricultura y silvicultura como restos de maíz o descartes de aserraderos) y los cultivos energéticos (cultivos con alto rendimiento de biomasa lignocelulósica). Cabe destacar que el uso de cultivos energéticos también entra en conflicto con el sector alimentario por lo que se excluirían en este caso.

Como la producción de bioetileno mediante azúcares permite producir energía como subproducto, se estima que el proceso puede alcanzar un ahorro del 60% de la energía fósil utilizada en la producción petroquímica del etileno (*The Insight Partners, 2021*). Además, los costes de producción son muy bajos y las emisiones de gases de efecto invernadero causadas por el uso de combustibles fósiles en la industria química se reducirían significativamente si el bioetileno sustituyera al etileno como intermedio.

Por todas estas razones el modelo de producción de bioetileno basado en azúcares resulta prometedor, con grandes beneficios energéticos y ambientales frente al modelo actual.

1.3. AGENTES IMPLICADOS

Son muchas las empresas que están interesadas en las nuevas tecnologías verdes y, más concretamente, en el avance gradual hacia el bioetileno para ocupar el espacio abierto en el mercado. Se han considerado dignas de mención las siguientes, ya que constituyen un ejemplo de interés y esfuerzos tanto en desarrollo como en implementación del bioetileno:

- La empresa “The Dow Chemical Company”, que declaró en octubre de 2021 que podrían construir la primera planta del mundo de bioetileno y derivados con cero emisiones netas de carbono, reflejando así su compromiso con la sostenibilidad y la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero (*The Business Research Company, 2023*).
- La empresa productora de biopolímeros “Braskem SA”, que produjo en 2007 la primera muestra de bioetileno fabricado a partir de caña de azúcar y, en 2010, se convirtieron en pioneros y líderes del mercado de producción de biopolímeros a escala industrial inaugurando su planta de producción de bioetileno. Además, se asociaron con “LEGO Group”, empresa productora de juguetes, para suministrarles polietileno “I’m greenT”, un polietileno elaborado a partir de caña de azúcar que es 100% reciclable y contribuye a la reducción de gases de efecto invernadero (*Braskem, 2023*).
- La empresa de bioingeniería “Cemvita Factory” junto con “Oxy Low Carbon Ventures (OCLV)”, que anunciaron en abril de 2021 la apertura de una planta piloto de bioetileno a razón de una tonelada métrica al mes. Dicha planta utilizaría dióxido de carbono en lugar de materias primas de origen hidrocarbonado, mostrando así su enfoque innovador y sostenible (*The Insight Partners, 2021*).

Otras empresas a mencionar serían “BASF SE”, “Chevron Philips Chemical LLC.”, “Cosun Beet Company”, “SABIC” y “Cargill, Incorporated”.

1.4. APLICACIONES Y USOS FINALES

Debido a la ya mencionada condición de que el bioetileno sea idéntico químicamente al etileno, sus usos también son los mismos. Se trata del compuesto orgánico más utilizado, ya que está involucrado en la fabricación de una amplia gama de productos, tales como plásticos, solventes, adhesivos, lubricantes y detergentes.

De acuerdo con lo mostrado en la Figura 1 (*Vantage Market Research, 2022*), más de la mitad del etileno producido se usa para fabricar polietileno (PE), el principal plástico que se obtiene del etileno, cuyo uso final pasa por el empaçado, construcción y piezas de automóviles entre otros. Cabe destacar que un 80% del etileno está destinado a la producción de plásticos.

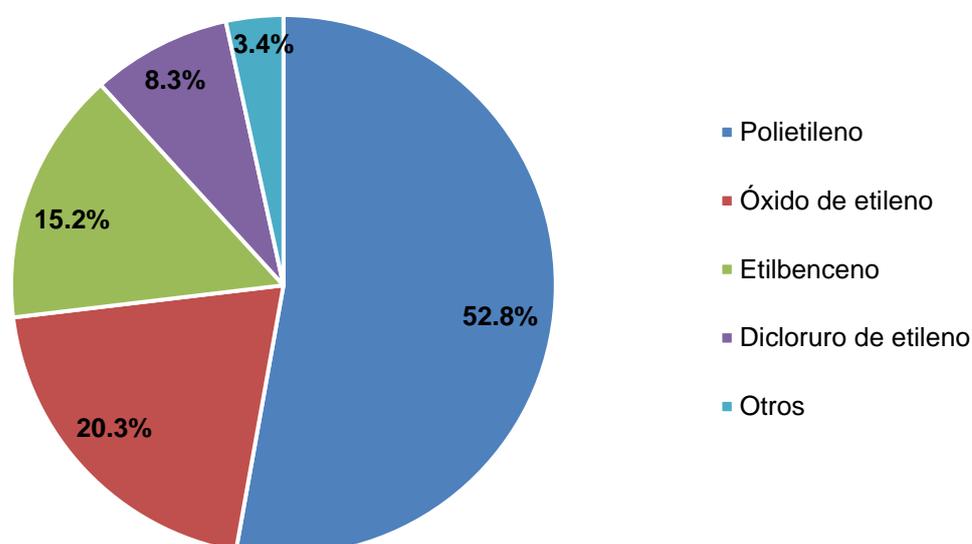


Figura 1. Aplicaciones y usos finales (2021) (*Vantage Market Research, 2022*)

En orden de relevancia en cuanto a volumen de fabricación, el segundo producto sería el óxido de etileno, que se usa principalmente para fabricar aislantes en el sector de la construcción, tiene gran valor como producto intermedio del sector de etilenglicoles (usados en anticongelantes para automóviles, plastificantes, resinas de poliéster y disolventes) y etoxilados (utilizados en tensoactivos, humectantes y emulsificantes en productos de cuidado personal, detergentes e industria textil). También se usa como fumigante, esterilizador y como intermedio en medicina para producir medicamentos y hormonas.

Con menores ratios de fabricación se encuentra el etilbenceno, que mayoritariamente se utiliza para fabricar estireno y, con él, poliestireno, cuyo uso final es la fabricación de resinas plásticas, cauchos y hules.

Por último, pero aún con un ratio reseñable estaría el dicloruro de etileno, que se usa para fabricar cloruro de polivinilo (PVC), que se encuentra tanto en tuberías y cables como en material de embalaje e, incluso, en tarjetas de crédito.

En el caso de los plásticos obtenidos a partir del etileno, además del polietileno mencionado anteriormente, destaca, aunque en menor medida, el polipropileno (PP). Este también es utilizado en materiales de embalaje, piezas de automóviles y artículos de uso doméstico y supone el consumo de alrededor de un 20% del etileno destinado a plásticos. También tienen importancia el polietileno de alta densidad (HDPE), los cloro vinilos (VC) y los acrílicos.

En cuanto a usos finales, se puede ver que debido al creciente nivel de vida de las personas, la producción de materiales sintéticos para empaquetado como podrían ser el polietileno y el propileno se encuentra en alza. Por su parte el sector de la automoción implicaba un 28% de la demanda mundial de etileno en 2021 y se espera que este porcentaje aumente hasta un 30% para 2028, esto se debe al crecimiento del sector automovilístico y a la creciente utilización de polímeros basados en etileno en la fabricación de automóviles. Estos polímeros reducen el peso del coche y, con ello, aumentan la eficiencia del combustible. Otros derivados del etileno se utilizan para la fabricación de LEDs para el sector automovilístico, además de nuevas aplicaciones como impresoras 3D y celdas de combustible.

A modo de resumen, los usos finales del etileno se engloban en los siguientes campos (*Vantage Market Research, 2022*):

- Alimentos y bebidas
- Edificación y construcción
- Automotriz
- Textil
- Embalaje
- Agroquímicos
- Cosmética y cuidado personal

2. OBJETO

En este trabajo de fin de grado se tiene como objetivo estudiar la viabilidad técnica, económica y ambiental de instalar una planta de producción de bioetileno a partir de bioetanol mediante deshidratación catalítica.

En el presente proyecto se planteará situar la planta en las proximidades de las instalaciones de producción de bioetanol de la empresa “Vertex Bioenergy, S.L.” con sede en A Coruña (Galicia), asegurando así el suministro de bioetanol (*Vertex Bioenergy, 2022*). Al no existir otras empresas que produzcan bioetileno mediante este proceso en España, únicamente se tomará el 10% de la producción anual de bioetanol de “Vertex Bioenergy, S.L.” como alimentación, para tener una primera estimación. Con esta premisa se pretenden adquirir 19.6 millones de litros de bioetanol al año, que actuarán como materia prima en el proceso. Teniendo en cuenta el tiempo real trabajado, descontando los cierres por vacaciones o fines de semana y los parones de producción para limpieza o mantenimiento de equipos, quedan unos 330 días al año con jornadas de 24 horas al día, con lo que el bioetanol a procesar serían 42.5 kmol/h al 99.7%

Este trabajo complementa el presentado previamente (Bajo y Méndez, 2023) e incluye el diseño de las etapas del proceso, partiendo del bioetanol que se utilizará como materia prima ya acondicionado, hasta obtener el producto final, bioetileno. Se incluye:

- El diseño del reactor, con el estudio de las cinéticas de las reacciones que tienen lugar en él.
- El diseño de las separaciones de los productos y de los reactivos sin reaccionar.

3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

3.1. LOCALIZACIÓN DE LA PLANTA

Dadas las amplias y variadas oportunidades de mercado del bioetanol producido, la planta debería situarse en una zona industrial con buena comunicación, preferiblemente cercana a un puerto. Se priorizará, sin embargo, la cercanía con la fuente de materia prima seleccionada, que como se he comentado anteriormente será únicamente la empresa de producción de bioetanol “Vertex Bioenergy, S.L.” para minimizar costes de transporte y evitar posibles problemas de suministro.

Puesto que la planta “Bietanol Galicia S.A.” de la empresa “Vertex Bioenergy, S.L.” se encuentra situada en el Polígono Industrial de Teixeira, que se muestra en la Figura 2 (*Google Maps*, 2024), ubicado en el municipio de Curtis, provincia de A Coruña (Galicia), se decide seleccionar una parcela en ese mismo polígono para ubicar esta planta.



Figura 2. Localización del Polígono Industrial de Teixeira (*Google Maps*, 2024)

De cara a las comunicaciones, el polígono se encuentra a 35 minutos de las ciudades de A Coruña, Lugo y Santiago; además está comunicado por carretera por la A-6 (Autovía Coruña – Madrid) y la N-634 (Carretera San Sebastián – Santiago), sin mencionar los múltiples enlaces disponibles una vez alcanzada A Coruña. En cuanto a la red ferroviaria cabe destacar el “Plan Galicia 2023”, que llevará a la comunidad la vía de alta velocidad Ferrol – Oviedo – Santander – Bilbao, potenciando las comunicaciones en la cornisa cantábrica y construyendo el camino para unir Galicia y la frontera francesa mediante trenes de alta velocidad. Por último en cuanto a la posición marítima, al tratarse de Galicia el polígono estaría en una zona privilegiada, destacando los puertos de A Coruña y Vigo (el primero en especial dada su cercanía), ya que están situados en las principales rutas de transporte marítimo internacional entre Europa, América y Asia (CURTIS Industrial, 2024).

El polígono cuenta con numerosas parcelas vacías, abaratando esto los costes del suelo, se muestra en la Figura 3 la parcela seleccionada y en la Figura 4 los datos catastrales de la misma (Sede Electrónica del Catastro, 2024). Además se incluye en el Anexo: Localización de la planta, un plano del polígono seleccionado (CURTIS Industrial, 2024) donde se puede ver que la parcela seleccionada se corresponde con las parcelas A.12 y A.13.

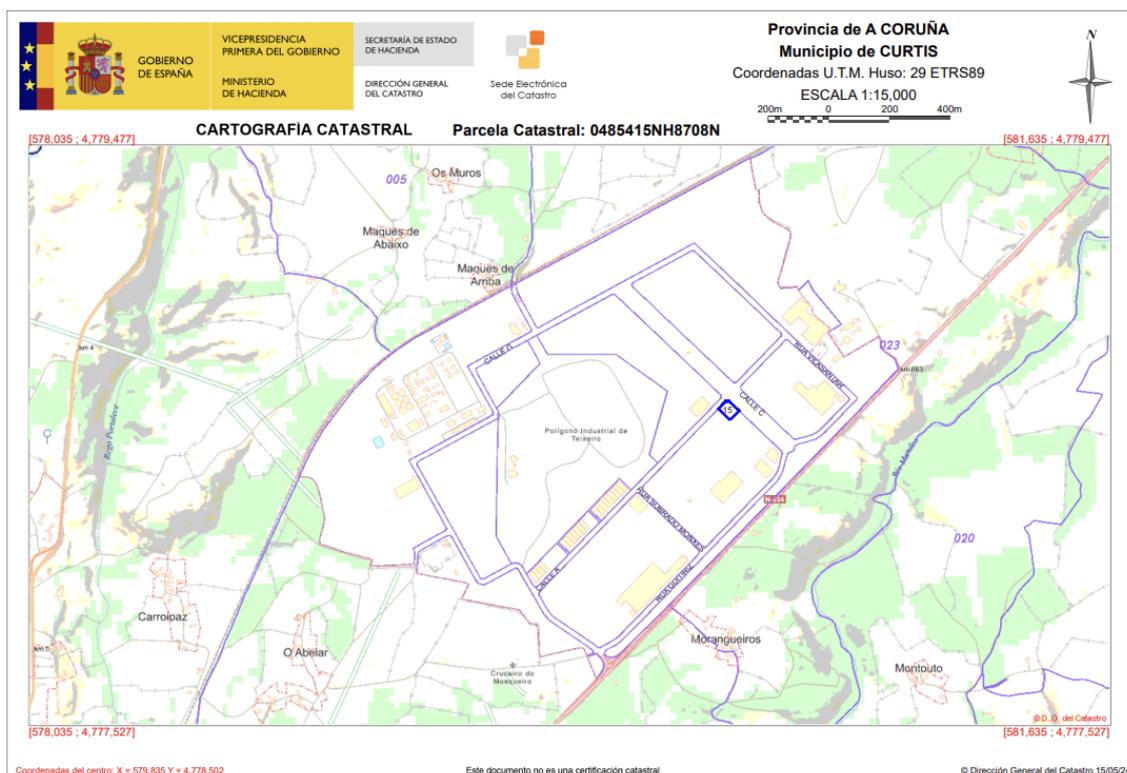


Figura 3. Emplazamiento de la planta. (Sede Electrónica del Catastro, 2024)



Figura 4. Datos catastrales del emplazamiento de la planta. (*Sede Electrónica del Catastro, 2024*)

3.2. POTENCIAL ECONÓMICO Y TAMAÑO DE PLANTA

La parcela seleccionada cuenta con 2343 m² edificables con buenas comunicaciones como se ha comentado en el apartado anterior, albergando no solo la propia planta de producción, sino también áreas dedicadas a aparcamientos, estructuras de carga y descarga y accesos peatonales tanto para el personal como para visitas, maximizando así la eficiencia operativa.

Como se muestra en la Figura 5 (*Precedence Research, 2023*), el tamaño del mercado mundial de etileno en 2023 tuvo un alcance de 138.86 mil millones de dólares y se proyecta hasta 241.21 mil millones de dólares en 2024. Se prevé un alcance de tasa compuesta anual (CAGR) del 5.72% entre 2024 y 2033.

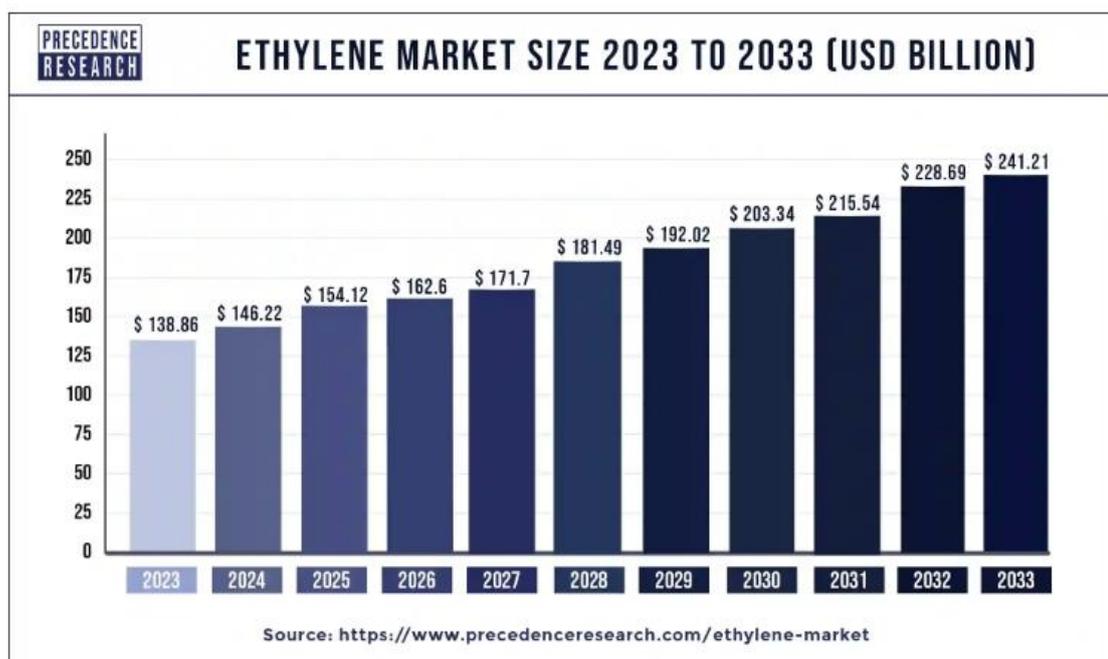


Figura 5. Tendencia del mercado del etileno (*Precedence Research, 2023*)

En base a los datos de 2023, se ve que la mayor participación en este mercado proviene de la zona de Asia y el Pacífico, en torno a un 42.73%; en cuanto a aplicación se destacó el segmento del polietileno con un 57% de los ingresos de este año y, en referencia al uso final, la industria más determinante fue la del embalaje con un 51.8% de los ingresos. Se prevé que estas tendencias continúen al alza debido a las tendencias económicas y demográficas positivas y a la creciente demanda de derivados petroquímicos; sin embargo, la variable disponibilidad de las materias primas convencionales y la creciente capacidad de expansión de los participantes de la industria impulsan el desarrollo del mercado hacia otras opciones como puede ser el bioetileno.

La expansión del sector manufacturero en los sectores de embalaje, automoción y construcción de países como China, India y Japón hará que su región siga dominando el mercado mundial en el periodo de proyección. América del Norte tuvo una participación del 27.10% en 2023 y se prevé que crezca a una CAGR más rápida debido a fuertes ventas de automóviles y mayor demanda de plásticos y productos químicos básicos unida a un repunte de la actividad en la construcción. Por parte de Europa, en 2023 se trató de la tercera mayor participación en el mercado del etileno con un 23.14%, destaca la inversión pública y privada como resultado del crecimiento continuo de los sectores de la construcción y el embalaje en Europa. En la Figura 6 (*Precedence Research, 2023*) se muestra el reparto por regiones del mercado del etileno en 2023.

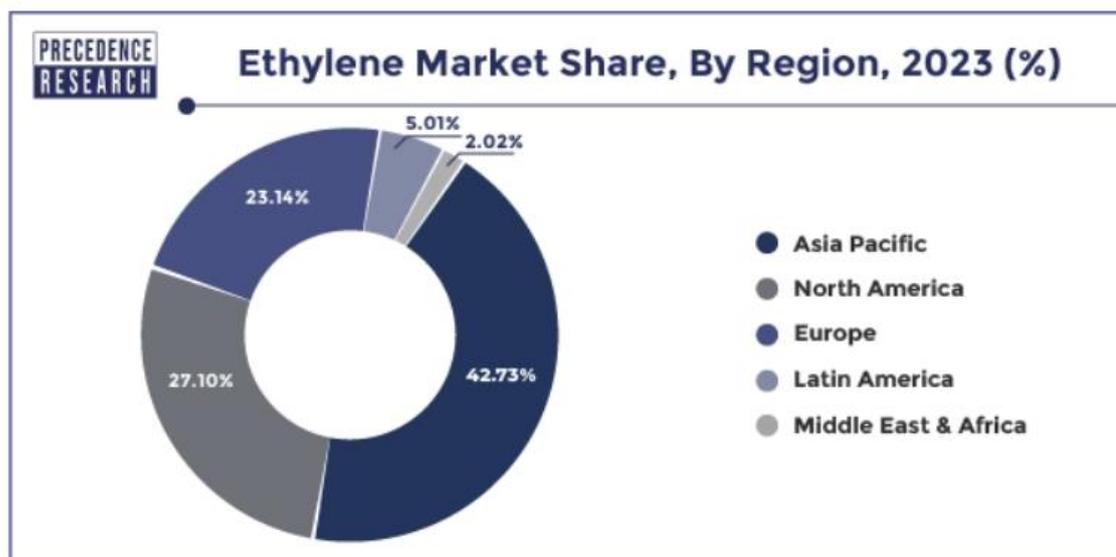


Figura 6. Reparto por regiones del mercado del Etileno en 2023 (*Precedence Research, 2023*)

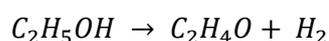
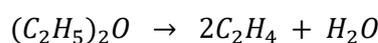
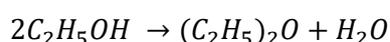
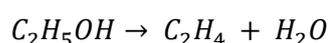
Todo este estudio vaticina grandes oportunidades de mercado, con una tendencia positiva; sin embargo, este proyecto comprenderá una planta de producción pequeña, lo que permite una inversión inicial moderada, pero con capacidad de aumento en el futuro en respuesta a las tendencias del mercado. Se busca de esta manera alcanzar la viabilidad económica en poco tiempo y optimizar el retorno de la inversión (ROI).

3.3. PLANTEAMIENTO

Como se ha comentado previamente, el proceso de producción de bioetileno mediante deshidratación catalítica parte de la utilización de bioetanol como materia prima, este bioetanol proviene de la planta “Vertex Bioenergy, S.L.” situada en el mismo polígono y se obtiene principalmente a partir de procesos de fermentación de azúcares de cereales.

Este proyecto comienza con la etapa de reacción, donde el bioetanol en fase gaseosa, a 240 °C y 1.3 atm, se introduce en un reactor multitubular catalítico que utiliza H-ZSM5 (Zeolitas) como catalizador. Para mantener la temperatura interna del reactor, ya que la reacción es de naturaleza endotérmica, se emplea un encamisado con aceite térmico.

En el reactor tienen lugar las siguientes reacciones, que resultan en la formación de bioetileno, dietiléter, acetaldehído y agua.



El proyecto también abarca la primera fase de separación, que consta de dos etapas. En la primera se efectúa la separación inicial del bioetanol y el agua de mezcla, los reactivos sin reaccionar, del bioetileno y los subproductos. Para alcanzar las condiciones de operación necesarias se utilizan un compresor y un condensador, tras ellos la corriente pasa a un separador del que se obtiene una corriente líquida, objeto de la segunda etapa de separación, y una corriente gaseosa, cuyo destino no se aborda en este proyecto.

La segunda etapa implica el paso de los reactivos sin reaccionar por una columna de destilación, cuyo objetivo es concentrar el bioetanol para conseguir gel hidroalcohólico, con concentraciones entre el 70 y el 90%.

3.4. DIAGRAMA DE BLOQUES

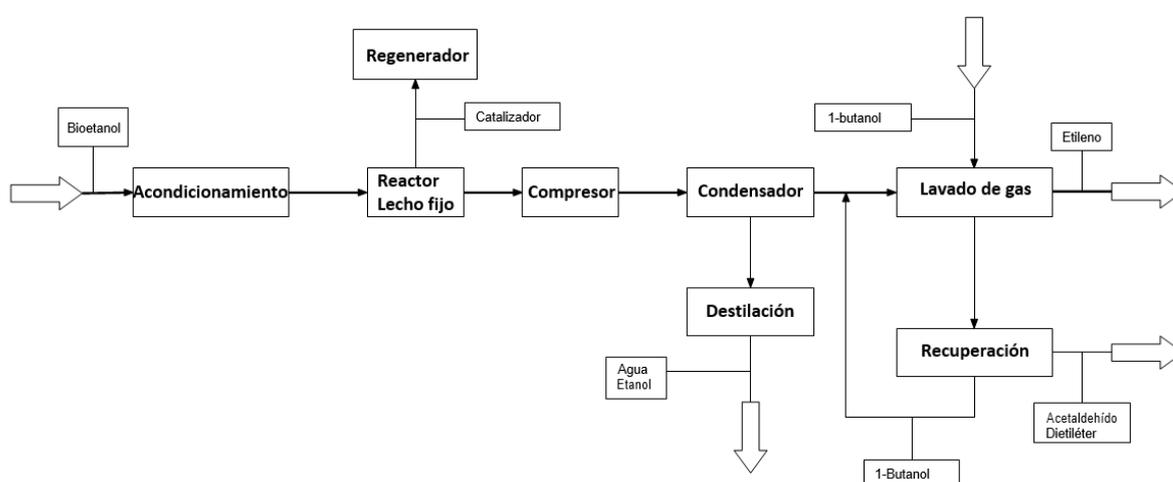


Figura 7. Diagrama de bloques del proceso

Como se muestra en la Figura 7, el proceso inicia con la introducción de bioetanol de alta pureza como materia prima. La fase inicial abarca el acondicionamiento del bioetanol, lo que implica su gasificación mediante una compresión y su calentamiento a la temperatura adecuada para facilitar la reacción.

Una vez completado el acondicionamiento, el proceso avanza hacia el reactor multitubular, donde ocurre la reacción endotérmica de producción del bioetileno.

Por último, el proceso comprende las etapas de separación. La primera se desarrolla con la extracción del bioetanol y el agua del conjunto formado también por el bioetileno y los subproductos y, posteriormente, en la columna de destilación, se retira gran parte del agua de la corriente con bioetanol. En la segunda etapa de reacción se realiza el lavado de los gases obteniendo bioetanol de alta pureza.

4. BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

4.1. BALANCES DE MATERIA

En la Tabla II se muestran un resumen de los balances de materia según corriente.

Tabla II. Balances de materia del proceso

	Entrada Reactor (kg/h)	Salida Reactor (kg/h)	Salida Gas Separador (kg/h)	Destilado (kg/h)	Residuo (kg/h)
Agua	2	777	1	2	774
Etanol	1956	12	1	9	2
Etileno	0	1151	1151	0	0
Dietiléter	0	12	12	0	0
Acetaldehído	0	6	6	0	0
Total	1958	1958	1171	11	776

4.2. BALANCES DE ENERGÍA

En la Tabla III se exponen las necesidades energéticas de los equipos estudiadas en los balances de energía de cada sección individual.

Tabla III. Potencia requerida por cada equipo durante el proceso

Equipo	Potencia usada (kW)
Reactor	528.18
Compresor	175.07
Condensador	875.28
Condensador Columna	57.27
Calderín	820.92

5. DIAGRAMAS DE FLUJO Y OTROS DOCUMENTOS GRÁFICOS

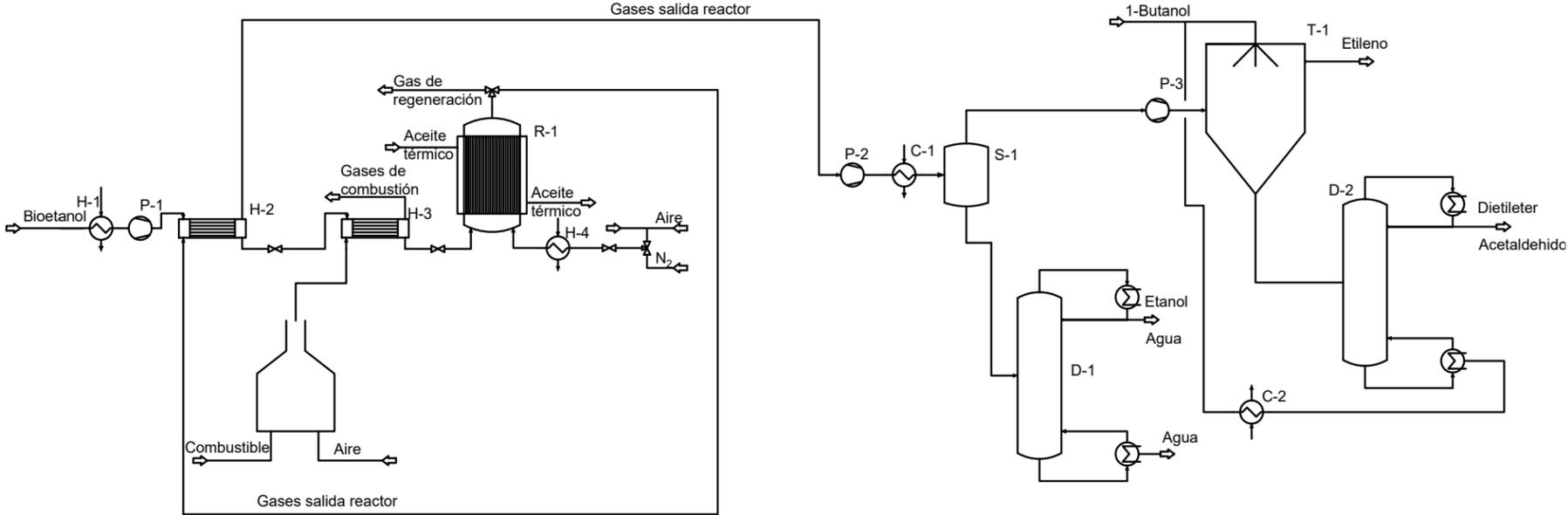


Figura 8. Diagrama de flujo del proceso

6. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA DEL PROCESO

6.1. ANÁLISIS PINCH: DETERMINACIÓN DE NECESIDADES MÍNIMAS DE SERVICIOS

El análisis Pinch es una herramienta algorítmica utilizada para optimizar la integración energética de un proceso entre los distintos requerimientos de calefacción y refrigeración.

Para comenzar con el análisis, hay que identificar las corrientes calientes y frías del proceso junto con sus temperaturas de entrada y salida. Al hacerlo, es importante seleccionar aquellas corrientes que presenten un cambio en su carga térmica, sin cambios en su composición. Por ejemplo, habría que excluir el calentamiento que ocurre dentro de un reactor.

En el caso del condensador de la columna y el calderín, se supone una diferencia de temperatura de 1°C para poder realizar los cálculos, ya que no se puede trabajar sin incrementos de temperatura. También se realiza esa suposición para la corriente de salida del compresor, ya que al atravesar ese equipo la corriente adquiere una carga térmica. En la Tabla IV se muestran las corrientes identificadas.

Tabla IV. Identificación de corrientes calientes y frías

Corriente	Salida compresor	Condensador	Condensador columna	Calderín
Número	1	2	3	4
T _{in} (°C)	321	322	132	153
T _{out} (°C)	322	5	131	154
Tipo	Fría	Caliente	Caliente	Fría

El siguiente paso consiste en calcular las temperaturas modificadas de las corrientes, para poder representar la curva compuesta global del proceso. En este caso, para las corrientes calientes se emplea la Ecuación [1]; mientras que para las frías se utiliza la Ecuación [2].

$$T^* = T - \frac{\Delta T_{\min}}{2} \quad [1]$$

$$T^* = T + \frac{\Delta T_{\min}}{2} \quad [2]$$

Donde T es la temperatura de la corriente, T* es la temperatura modificada y ΔT_{\min} , es la variación mínima de temperatura, que para procesos químicos se estima en 10 °C (Kemp, 2020).

También es necesario calcular las capacitancias de cada corriente mediante la Ecuación [3], donde ΔH , es el calor intercambiado y ΔT , es el incremento de temperatura de la corriente.

$$CP = \frac{\Delta H}{\Delta T} \quad [3]$$

Los resultados de estos cálculos se presentan en la Tabla V:

Tabla V. Temperaturas modificadas y capacitancias de cada corriente

Corriente	1	2	3	4
T _{in} (°C)	321	322	132	153
T _{out} (°C)	322	5	131	154
ΔT (°C)	1	317	1	1
ΔH (kW)	175	-875	-57	821
CP (kW/°C)	175	3	57	821
Tipo	Fría	Caliente	Caliente	Fría
T _{in} * (°C)	326	317	127	158
T _{out} * (°C)	327	0	126	159

A continuación, se ordenan las diferentes temperaturas modificadas de mayor a menor junto con las capacitancias de cada tramo. Acto seguido, para cada intervalo, se estima la diferencia de temperatura y el sumatorio de las capacitancias según la Ecuación [4]. Una vez obtenidos los sumatorios de capacitancias, se calcula la entalpía para cada intervalo mediante la Ecuación [5].

$$\sum CP_{int} = \sum CP_{calientes} - \sum CP_{frías} \quad [4]$$

$$\Delta H_{int} = \Delta T_{int}^* \cdot \sum CP_{int} \quad [5]$$

En último lugar, se realiza la cascada de energía, calculando la entalpía acumulada del proceso para ello se selecciona el valor más negativo (máximo déficit de calor), se convierte dicho valor en positivo y se coloca a la cabeza de la tabla, repitiendo el proceso de acumulación. Tras esta reiteración, ya se pueden observar el PINCH (tiene lugar cuando la entalpía acumulada es cero) y los servicios de refrigeración del proceso. Estos cálculos se muestran en la Tabla VI.

Tabla VI. Cascada de energía para la estimación del PINCH

T^* (°C)	CP1 (kW/°C)	CP2 (kW/°C)	CP3 (kW/°C)	CP4 (kW/°C)	ΔT_{int}^* (°C)	$\sum CP_{int}$ (kW/°C)	ΔH_{int} (kW)	ΔH_{acum} (kW)	ΔH_{acum} (kW)
327								0	556
326	175				1	-175	-175	-175	381
317					9	0	0	-175	381
159		3			158	3	437	262	818
158		3		821	1	-818	-818	-556	0
127		3			31	3	85	-471	85
126		3	57		1	60	60	-411	145
0		3			128	3	347	-64	493

De acuerdo con la tabla anterior se observa que las necesidades de calefacción son 556 kW, las necesidades de refrigeración son 493 kW y que el PINCH (el punto donde la entalpía acumulada es cero) se encuentra a una temperatura modificada de 158°C, lo que se corresponde con una temperatura de 163°C para las corrientes calientes y 153°C para las frías.

Tras obtener la cascada de energía, es posible representar la curva compuesta global en la Figura 9:

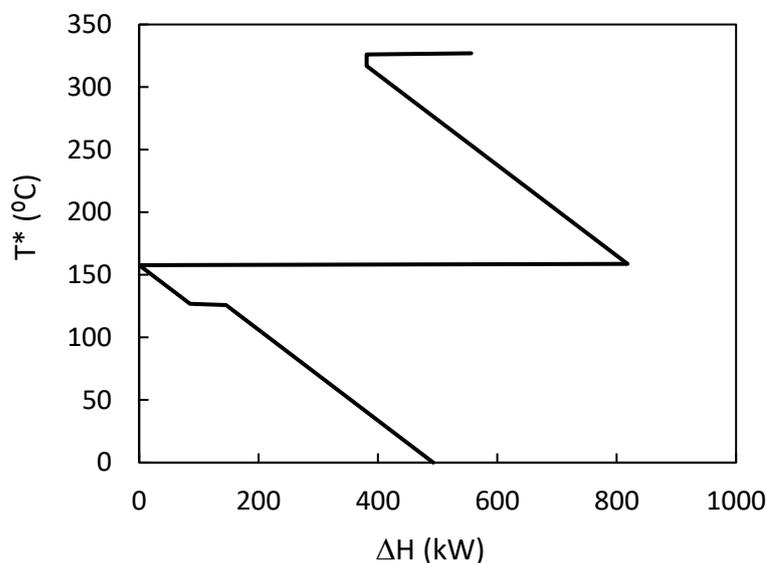


Figura 9. Curva compuesta global del proceso

6.2. TOPOLOGÍA DE LA RED DE CAMBIADORES DE CALOR

Para diseñar la red de cambiadores se ha utilizado el programa Aspen Energy Analyzer, obteniendo como diseño recomendado la Figura C. 1 del Anexo: Topología de la red de cambiadores, en él se incluye también la Figura C. 2 que muestra la curva compuesta global del proceso obtenido con el programa.

Como se aprecia en la Tabla VII, parte de las necesidades energéticas del proyecto son satisfechas mediante la integración energética entre corrientes, pero se siguen necesitando 556 kW de calefacción y 493 kW de refrigeración.

Tabla VII. Necesidades energéticas del proyecto

Servicios	Máximo	Mínimo	Recuperado
Calefacción	996	556	440
Refrigeración	933	493	440

7. CONSIDERACIONES DE SEGURIDAD E IMPACTO AMBIENTAL

7.1. RIESGOS DE LOS PRODUCTOS QUÍMICOS EMPLEADOS

A continuación, se presentan los riesgos relacionados con los productos químicos que se emplearán en la planta, se omitirá el agua ya que no presenta ningún peligro. A modo orientativo se presenta la Tabla VIII con dichos productos y sus correspondientes pictogramas.

Tabla VIII. Riesgos de los productos químicos empleados

					
BIOETANOL					
ETILENO					
DIETILÉTER					
ACETALDEHÍDO					
GAS NATURAL					
1-BUTANOL					

A continuación, se detallan las medidas de seguridad requeridas tras el análisis de los riesgos:

- Como todos los compuestos químicos empleados en la planta son altamente inflamables y pueden formar mezclas explosivas con el aire, se requieren estrictas medidas de control de fuentes de ignición para prevenir incendios y explosiones. También se recomienda asegurar una ventilación adecuada en la planta.

Se incluye en la Tabla IX un resumen con los límites inferior y superior de inflamabilidad (LII y LSI respectivamente), por seguridad se debe trabajar fuera de esos intervalos.

Tabla IX. Límites de inflamabilidad de los productos químicos empleados

COMPUESTO QUÍMICO	LII (%V)	LSI (%V)
BIOETANOL	2.5	13.5
ETILENO	2.4	36.0
DIETILÉTER	1.7	39.0
ACETALDEHÍDO	4.0	57.0
GAS NATURAL	4.1	17.0
1-BUTANOL	1.4	11.3

- A excepción del gas natural, el resto de los compuestos pueden ser perjudiciales para el agua y/o la calidad del aire, por lo que debe evitarse su manipulación cerca de cauces fluviales y zonas permitidas. También debe evitarse el almacenamiento de los compuestos en el suelo sin protección adicional.
- Al tratarse de una planta química los EPIs (Equipos de Protección Individual) han de utilizarse en todo momento, ropa de alta visibilidad y calzado de seguridad serán necesarios para poder desplazarse por las instalaciones de forma segura, incluyéndose también el uso de casco si hay objetos almacenados en altura que puedan desprenderse o suponer un peligro por impacto. Además, se deberán utilizar guantes y gafas de seguridad cuando se trabaje con los productos químicos para evitar su contacto directo con piel y ojos.
- Con los productos corrosivos como el 1-butanol se deben extremar las precauciones para evitar salpicaduras. Con los productos cancerígenos, dietiléter y acetaldehído, (que presentan órganos diana) conviene evitar cualquier vía de entrada, esto incluye la respiratoria, por lo que se recomienda utilizar una máscara de protección adecuada para el producto concreto.

- Además según las FDS (Fichas de Seguridad) para el bioetanol (PQS Piscinas y Consumo S.A., 2017) y el 1-butanol (Thermo Fisher Scientific, 2023) se recomienda utilizar máscara de protección con el filtro antigás adecuado.

7.2. RIESGOS DE LOS EQUIPOS, CONDICIONES DE OPERACIÓN Y MANTENIMIENTO

7.2.1. Reactor

El reactor multitubular de lecho fijo para la deshidratación de bioetanol es un equipo crucial y complejo dentro del proceso, para ello se requiere un manejo específico en términos de seguridad y mantenimiento.

La operación del reactor inicia con la activación del sistema de alimentación del bioetanol. Es esencial monitorear continuamente la temperatura y la presión dentro de los tubos para mantener las condiciones óptimas de reacción y evitar incidentes como el sobrecalentamiento (da lugar a una disminución en la selectividad del etileno).

El mantenimiento del reactor incluye la revisión y limpieza de los tubos, asegurando que no haya bloqueos y verificando el correcto funcionamiento del sistema. Un programa de mantenimiento preventivo, así como la aplicación de metodologías como el bloqueo de seguridad son medidas necesarias para el correcto funcionamiento de los equipos.

Para mantener las exigencias de limpieza del reactor, se estudió la posibilidad de un sistema de limpieza in-situ (CIP), se llegó a la conclusión de que no era necesario debido a la baja contaminación provocada por las corrientes.

La operación segura y eficiente del reactor multitubular de lecho fijo para la deshidratación de bioetanol depende de la monitorización constante, mantenimiento preventivo y estrategias de mitigación de riesgos.

7.2.2. Compresor

Uno de los principales peligros asociados es la posibilidad de sobrepresión, ya que estos equipos pueden generar presiones muy altas. Esto incrementa el riesgo de explosiones o fallos catastróficos si no se controla adecuadamente. Las fugas de gas son otro riesgo potencial, ya que pueden ocurrir en las conexiones, juntas o sellos del compresor. Esto puede ser peligroso debido a la toxicidad o inflamabilidad de los gases comprimidos.

Las inspecciones periódicas y el mantenimiento preventivo ayudan a garantizar que el compresor esté en óptimas condiciones y a detectar posibles problemas antes de que se conviertan en fallos graves. Por otro lado, también se deben realizar inspecciones regulares para identificar y reparar cualquier fuga de gas en el compresor o en sus sistemas de tuberías y conexiones. Asimismo, el control de presión es esencial; instalar dispositivos de seguridad como válvulas de alivio de presión puede ayudar a prevenir sobrepresiones peligrosas y proteger tanto al compresor como al resto de equipos y al personal.

7.2.3. Separador

Uno de los principales riesgos del separador es el de explosión debido a la presencia de gases inflamables. Estos equipos pueden estar sujetos a sobrepresiones si no se controlan adecuadamente, lo que puede resultar en una ruptura del equipo y en la consiguiente liberación a presión del gas inflamable al ambiente.

Además, el separador puede ser susceptible a la acumulación de líquido en la parte inferior del equipo, lo que puede afectar negativamente la eficiencia de separación y, en casos extremos, provocar el arrastre de líquido hacia la corriente de gas, afectando a la eficiencia del proceso.

Para prevenir estas situaciones, se requiere un mantenimiento regular del separador con el fin de garantizar su integridad estructural y velar por el funcionamiento adecuado de los instrumentos de control de presión y nivel. Además, se deben instalar dispositivos de seguridad, como válvulas de alivio de presión, para prevenir situaciones de sobrepresión.

7.2.4. Columna de destilación

La columna de destilación representa casi con total certeza el mayor riesgo dentro del proceso. Para reducir el riesgo es vital efectuar un mantenimiento preventivo al finalizar cada lote procesado para asegurar el correcto funcionamiento de todos los sensores, lo que ayuda a evitar incidentes por sobrepresión o temperaturas excesivas. Además, se debe verificar la integridad estructural de la columna para garantizar su seguridad y estabilidad.

Debido a la presencia de vapor y líquido a alta presión en el interior de la columna, existe la posibilidad de que ocurran situaciones de sobrepresión si no se controla adecuadamente. Otro riesgo significativo es el potencial de sobrecalentamiento. El proceso de rectificación implica la evaporación y condensación de líquidos a diferentes temperaturas, lo que puede generar un aumento considerable de la temperatura en la columna. Si esta temperatura no se controla correctamente, puede dar lugar a daños en los componentes de la columna e incluso a la posibilidad de incendios.

Para mitigar estos riesgos, es esencial implementar medidas de seguridad adecuadas. Esto incluye un mantenimiento regular de la columna para garantizar su integridad estructural y el funcionamiento adecuado de los instrumentos de control de presión y temperatura. Además, se deben instalar dispositivos de seguridad, como válvulas de alivio de presión, para prevenir situaciones de sobrepresión. La monitorización continua de la temperatura y la presión dentro de la columna también es fundamental para detectar cualquier anomalía y poder tomar medidas correctivas a tiempo.

Por otro lado, el calderín opera a temperaturas superiores a 150 °C, lo que conlleva un riesgo significativo de quemaduras en caso de contacto directo. Para reducir el riesgo se requiere colocar señales de advertencia claramente visibles cerca del calderín para alertar a los trabajadores sobre el riesgo de quemaduras. Además, se pueden instalar barreras físicas para evitar el acceso no autorizado al área cercana. También se decide instalar dispositivos de protección térmica, como pantallas o aislamientos, para reducir el riesgo de contacto directo con las superficies calientes.

Por último, no hay que olvidar que trabajar en la parte superior de una columna de rectificación puede aumentar el riesgo de caídas para los trabajadores, lo que puede resultar en lesiones graves o fatales. La altura también puede dificultar el acceso para inspecciones, mantenimiento y reparaciones, lo que puede llevar a problemas no detectados que podrían causar fallos o accidentes.

Por estos motivos, se requiere instalar escaleras, plataformas de trabajo y pasamanos seguros en la columna para facilitar el acceso fácil y seguro. También se deben instalar barandillas de seguridad y si correspondiera por ser alturas superiores a 2 metros, líneas de vida. Además, debe asegurarse que las áreas de trabajo estén bien iluminadas y libres de obstáculos.

7.2.5. Intercambiadores de calor

Al igual que en la columna de rectificación, los intercambiadores de calor conllevan un riesgo evidente de quemaduras. Aunque cuentan con una capa aislante para prevenir contactos directos, se establecerá como medida de seguridad adicional que se requiera la circulación de un fluido frío para enfriar el equipo antes de cualquier intervención o mantenimiento.

7.2.6. Riesgos generales y equipos auxiliares

Los tanques de almacenamiento deben mantener una distancia segura y estar alejados de las fuentes de ignición tanto como sea posible, debido a la inflamabilidad de los compuestos utilizados en el proceso.

Es esencial considerar el riesgo eléctrico intrínseco en todos los equipos del proceso al llevar a cabo cualquier tarea de mantenimiento o al anticipar posibles averías. Este riesgo puede reducirse eficazmente utilizando materiales aislantes en los paneles eléctricos y usando guantes y botas aislantes siempre que exista alguna incertidumbre sobre posibles derivaciones o cuando se vaya a trabajar sobre un sistema eléctrico.

Se instalarán además alarmas de detección de gases para identificar posibles fugas en diferentes puntos del proceso de forma que se tenga cubierta toda la planta. Estos equipos deberán revisarse periódicamente para garantizar su correcto funcionamiento.

7.3. ANÁLISIS DETALLADO DE RIESGO Y OPERABILIDAD (HAZOP)

A continuación, se realiza el Análisis Funcional de Operabilidad (AFO), más comúnmente conocido por sus siglas en inglés como HAZOP (Hazard and Operability Analysis).

El HAZOP es una evaluación de seguridad basada en el análisis de los potenciales riesgos e identificación de los posibles fallos operativos en las diferentes partes del proceso, se suele realizar a los equipos más peligrosos del proyecto.

Para realizar el estudio, en primer lugar, es necesario identificar en sistema que se va a analizar. En el presente proyecto se analizará la columna de destilación, por ser la parte del proyecto con la mayor complejidad técnica y operativa; así como el reactor por su importancia en el proceso.

Una vez definido el sistema objetivo, se identifican los nodos clave y se definen los parámetros relevantes para cada uno. Los nodos son ubicaciones específicas en el proceso donde pueden ocurrir desviaciones.

Para cada nodo, se aplicarán las palabras guía definidas en la Norma Técnica de Prevención (NTP) N°238 de 1989 (INSHT, 1989) y que se recogen en la Tabla X. El estudio se realizará en la Tabla XI para la alimentación de la columna, en la Tabla XII para la propia columna, para el reactor en la Tabla XIII y para la alimentación del reactor en la Tabla XIV.

Tabla X. Palabras guía y definición para el HAZOP

Palabras guía	Definición
NO	Ausencia de una variable
MÁS	Incremento cuantitativo de una variable
MENOS	Reducción cuantitativa de una variable
INVERSO	Inversión de una variable

Tabla XI. HAZOP aplicado a la columna de destilación (Alimentación)

Alimentación de la Columna de Destilación				
Palabra Guía	Perturbación	Posible causa	Efecto/Consecuencia	Medidas mitigadoras/correctoras
NO	No hay flujo	1. Tubería rota	Vertido. Interrupción del proceso en la columna.	Inspección regular de válvulas y bombas. Instalar válvula de control en alimentación. Instalar un sistema medidor de flujo.
		2. Tubería atascada		
		3. Fallo en bomba	Interrupción del proceso en la columna.	
		4. Válvula cerrada o atascada		
MÁS	Más flujo	5. Válvula muy abierta	Variación de las composiciones de salida.	Medidor de flujo (cerrar válvula)
		6. Mayor impulsión		
	Más temperatura	7. Mal funcionamiento del condensador	Alimentación no entra en forma de líquido saturado. Degradación de compuestos.	Instalar alarma de temperatura alta Instalar válvula de control en alimentación
	Más presión	8. Válvula cerrada o parcialmente cerrada	Problemas mecánicos. Columna no funciona correctamente.	Instalar alarma de presión alta. Instalar válvula de control en alimentación
MENOS	Menos flujo	9. Válvula cerrada parcialmente	Variación de las composiciones de salida.	Inspección regular de válvulas y bombas. Instalar un sistema medidor de flujo.
		10. Tubería rota parcialmente		
		11. Tubería atascada parcialmente		
		12. Menor impulsión		

Alimentación de la Columna de Destilación				
Palabra Guía	Perturbación	Posible causa	Efecto/Consecuencia	Medidas mitigadoras/correctoras
	Menos temperatura	13. Mal funcionamiento del condensador	Alimentación no entra en forma de líquido saturado. No se obtiene el producto deseado.	Instalar alarma de temperatura baja
	Menos presión	14. Fallo bomba	Interrupción del proceso en la columna.	Inspección regular de válvulas y bombas. Instalar válvula de control en alimentación. Instalar un sistema medidor de flujo.
INVERSO	Flujo inverso	15. Menos presión en la línea	No llega fluido a la columna.	Instalar válvula antirretorno (VAR).

Tabla XII. HAZOP aplicado a la columna de destilación (Columna)

Columna de Destilación				
Palabra Guía	Perturbación	Posible causa	Efecto/Consecuencia	Medidas mitigadoras/correctoras
NO	No hay destilado	1. Tubería rota.	Vertido.	Medidor de flujo Válvula de control Revisión de equipos, válvulas y bombas.
		2. Tubería atascada.	Aumento presión Disminución flujo	Alarma de presión alta Medidor de flujo Válvula de control Revisión de equipos, válvulas y bombas.
		3. Válvula cerrada o atascada.		
	No hay residuo	4. Tubería rota.	Vertido.	Medidor de flujo Válvula de control Revisión de equipos, válvulas y bombas.
		5. Tubería atascada.	Aumento presión Disminución flujo	Alarma de presión alta Medidor de flujo Válvula de control Revisión de equipos, válvulas y bombas.
		6. Válvula cerrada o atascada.		

Columna de Destilación				
Palabra Guía	Perturbación	Posible causa	Efecto/Consecuencia	Medidas mitigadoras/correctoras
	No hay reflujo	7. Tubería rota	Aumento temperatura de la columna. Disminución en la composición del destilado.	Instalar alarma de alta temperatura. Añadir sistema medidor de flujo (cerrar válvula de alimentación). Revisión de equipos, válvulas y bombas.
		8. Tubería atascada		
		9. Válvula cerrada o atascada		
		10. Fallo en condensador		
MÁS	Más reflujo	11. Aumento de temperatura en cabezas	Menor caudal destilado. Inundación de la columna.	Instalar alarma de alta temperatura. Añadir sistema medidor de flujo (cerrar válvula de alimentación).
		12. Fallo en válvula de destilado		
	Más temperatura	13. Incendio	Interrupción proceso. Degradación de compuestos.	Instalar alarma de alta temperatura.
		14. Exceso de calor en calderín.	Variación en composiciones de salida.	Instalar alarma de alta temperatura.
		15. Fallo en válvula de reflujo.		Añadir sistema medidor de flujo (cerrar válvula de alimentación).
		16. Fallo en condensador	Disminución en la composición del destilado.	Instalar alarma de alta temperatura. Añadir sistema medidor de flujo (cerrar válvula de alimentación). Revisión de equipos, válvulas y bombas.

Columna de Destilación				
Palabra Guía	Perturbación	Posible causa	Efecto/Consecuencia	Medidas mitigadoras/correctoras
	Más presión	17. Aumento del caudal de alimentación.	Variación en composiciones de salida.	Instalar alarma de alta presión Medidor de flujo Válvula de control
		18. Válvula de salida cerrada.	Menos cantidad de producto deseado.	
MENOS	Menos reflujo	19. Disminución de temperatura en cabezas.	Mayor caudal de destilado.	Instalar alarma de baja temperatura. Añadir sistema medidor de flujo (cerrar válvula de alimentación).
		20. Fallo en válvula de reflujo.	Producto no deseado.	
	Menos temperatura	21. Menor caudal de vapor en el calderín.	Variación en composiciones de salida. Separación no adecuada. Inundación de la columna.	Instalar alarma de baja temperatura.
	Menos presión	22. Válvula de entrada cerrada.	Aumento del caudal de destilado. Variación en composiciones de salida.	Añadir sistema medidor de flujo.

Tabla XIII. HAZOP aplicado al Reactor

Reactor				
Palabra guía	Perturbación	Causas	Consecuencias	Acciones a tomar
NO	No hay flujo de calentamiento	1. Fallo en el funcionamiento de la bomba de alimentación 2. Bloqueo en las tuberías del encamisado 3. Fugas en el tanque de la alimentación del líquido térmico	- Interrupción de la reacción - Parada total en la producción - Formación de subproductos indeseados - Fallos por condensación en el reactor	a) Inspecciones rutinarias en la conducción b) Sistema de respaldo para la bomba de alimentación c) Establecer protocolos alternativos para el calentamiento del reactor.
MAS	Mayor temperatura	4. Fallo en el controlador 5. Temperatura del líquido mayor de la debida	- Riesgo sobrepresión - Daño al equipo - Formación de subproductos indeseados como el acetaldehído - Liberación de etileno a la atmósfera	d) Mejora del sistema de monitorización y de control. e) Inclusión de mecanismo de parada de emergencia f) Añadir válvulas de alivio de presión g) Implementación de análisis de la corriente de salida del reactor
	Mayor presión	6. Bloqueo en la salida del reactor 7. Fallo en el sistema de control 8. Fallo en la bomba de alimentación	- Liberación de gases indeseados - Ruptura o daños en el equipo - Formación de subproductos indeseados	Cubierto por a), e) y f)

	Mayor flujo de calentamiento	9. Fallo en el sistema de control 10. Funcionamiento incorrecto de la bomba de alimentación	- Sobrecalentamiento del reactor - Degradación térmica del líquido - Formación de subproductos indeseados	h) Implementación de mejoras en los sistemas de control para el líquido térmico i) Añadir válvulas de alivio de presión en las tuberías del encamisado j) Revisión de los parámetros de operación de la bomba de alimentación
MENOS	Menor temperatura	11. Fallo en el sistema de calefacción 12. Fallo en el controlador de temperatura 13. Suministro de calor insuficiente	Formación de subproductos indeseados como dietiléter Reducción en la velocidad de reacción Rendimiento de producción reducido	Cubierto por c) y d) k) Incorporación de sistema auxiliar de calefacción
	Menos presión	14. Fugas en la conducción 15. Fallo en el sistema de control 16. Fallo en el compresor 17. Fugas en el reactor	- Formación de subproductos indeseados - Reducción en la velocidad de reacción - Disminución de la selectividad del etileno	Cubierto por d) y g) l) Establecer sistema de respaldo para compresores
	Menor flujo de calentamiento	18. Bloqueo de las tuberías del encamisado 19. Fallo en la bomba de circulación de líquido térmico	- Formación de subproductos indeseados debido a la disminución de temperatura - Reducción de la selectividad del etileno	Cubierto por a), b) y c)

			- Posible avería de los equipos debido a condensación	
--	--	--	---	--

Tabla XIV. HAZOP aplicado al Reactor (Alimentación de bioetanol)

Reactor (Alimentación de bioetanol)				
Palabra guía	Perturbación	Posible Causa	Consecuencias	Medidas mitigatorias
NO	Ausencia de bioetanol	1. Fallo en la bomba de alimentación 2. Bloqueo en la conducción	Interrupción total de la producción	a) Inspecciones regulares para la prevención de bloqueos b) Establecer protocolos de respuesta alternativos. c) Instalación tanque auxiliar
MAS	Mayor flujo	3. Fallo en el sistema de control 4. Fallo en la programación de los parámetros de la bomba de alimentación	Condiciones de reacción subóptimas Riesgo de sobrepresión en el reactor Desgaste superior en el catalizador Ausencia de agua en la reacción	d) Monitorización de la corriente de recirculación. Cubierto por b)
MENOS	Menor flujo	5. Bloqueo en la línea de alimentación 6. Fallo en la bomba de alimentación 7. Fallo en la recirculación 8. Válvula de la recirculación cerrada	Interrupción total de la producción Disminución de la selectividad del etileno	Cubierto por a), b) y d)

7.4. CONSIDERACIONES DE IMPACTO AMBIENTAL

La normativa de referencia que se utilizará en este apartado es la correspondiente al Anexo I de la Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de Evaluación Ambiental. En él se recogen todos los proyectos sometidos a evaluación ambiental ordinaria.

El presente proyecto encaja dentro de los criterios definidos en el Grupo 5, apartado a), sección i) de dicho Anexo. Por lo tanto, el proyecto debería ser sometido a una Evaluación Ambiental Ordinaria, lo que requiere la presentación de un Estudio de Impacto Ambiental, cuyo contenido queda fuera del alcance del presente Trabajo de Fin de Grado. Pese a ello, se realizará un análisis cualitativo de los principales impactos ambientales causados por el proyecto, durante las fases de construcción, explotación y demolición.

7.4.1. Fase de Construcción

- **Alteración del hábitat:** La construcción de una planta industrial a menudo implica la eliminación de la vegetación existente y la alteración del paisaje natural. Sin embargo, en este caso, al tratarse de un polígono industrial ya realizado, no se considera un impacto significativo.
- **Contaminación del agua y suelo:** Al tratarse de un polígono industrial, los impactos más significativos se deberían a vertidos accidentales de productos químicos y combustibles que podrían contaminarlos y afectar a su calidad.
- **Generación de residuos:** La construcción de una planta industrial produce una gran cantidad de residuos, que pueden incluir materiales de construcción, empaques, equipos desechados, etc. La eliminación inadecuada de estos residuos puede causar contaminación en suelos y aguas, así como contribuir a la acumulación de desechos en los vertederos.
- **Emisiones atmosféricas:** Durante la fase de construcción, se producirá una pérdida de la calidad del aire como consecuencia del aumento de los niveles de partículas en suspensión (polvo) y emisión de contaminantes de combustión, debida principalmente al uso de la maquinaria y las tareas de excavación, transporte, carga y descarga de materiales y movimiento de tierras. Una medida preventiva para evitar el incremento del nivel de polvo y partículas derivadas de los trabajos de construcción, podría ser el riego periódico de todas aquellas áreas que puedan suponer importantes generaciones de polvo, sobre todo en días con fuerte viento.

- **Ruido y vibraciones:** Las actividades de construcción pueden generar niveles significativos de ruido y vibraciones, lo que puede afectar negativamente a la fauna local y a las comunidades cercanas. El ruido constante y las vibraciones pueden causar estrés en los animales y perturbar el bienestar de las personas que viven o trabajan cerca del sitio de construcción.

7.4.2. Fase de Explotación

- **Consumo de recursos naturales:** La operación de la planta implica un consumo de recursos naturales, como agua y energía. El uso excesivo de estos recursos puede contribuir a la escasez de agua, lo que puede tener efectos negativos en los ecosistemas locales.
- **Contaminación del aire:** Las emisiones atmosféricas durante la operación de la planta pueden contribuir a la mala calidad del aire y tener efectos adversos en la salud humana y en los ecosistemas cercanos. Se cumplirá la normativa vigente según la Ley 8/2002, de 18 de diciembre, de protección del ambiente atmosférico de Galicia.
- **Vertidos de aguas residuales:** Durante la operación, la planta industrial puede generar aguas residuales contaminadas con productos químicos. Si estas aguas residuales no se tratan adecuadamente, pueden contaminar cuerpos de agua cercanos y afectar la vida acuática y la calidad del agua. En Galicia, ubicación de la planta, se encuentra en vigor la Ley 9/2010, de 4 de noviembre, de aguas de Galicia, donde se establecen los límites de concentración que han de cumplirse.
- **Generación de residuos:** La operación de la planta puede generar una gran cantidad de residuos, que pueden incluir desechos sólidos, aguas residuales tratadas y otros desechos. La eliminación adecuada de estos residuos es crucial para prevenir la contaminación del suelo, el agua y el aire. Se recomienda el uso de materiales biodegradable y el reaprovechamiento de los residuos que así lo permitan.
- **Ruido y vibraciones:** Las operaciones de la planta pueden generar niveles significativos de ruido y vibraciones. Estos impactos pueden perturbar a la fauna local y afectar el bienestar de las comunidades cercanas. La Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido define los valores límite de ruidos en horario diurno (70 dB) y en horario nocturno (60 dB). Se recomienda el uso de EPIs de audición y el encapsulamiento de los equipos, cuando sea posible, para reducir el impacto sonoro.

7.4.3. Fase de Demolición

- **Generación de residuos:** La demolición de la planta produciría una gran cantidad de residuos, que pueden incluir materiales de construcción, metales, cemento, plásticos y otros materiales. La eliminación adecuada de estos residuos es crucial para prevenir la contaminación del suelo, el agua y el aire.
- **Contaminación del agua y suelo:** Durante la demolición, pueden liberarse contaminantes peligrosos, como metales pesados, compuestos orgánicos volátiles (COVs) y sustancias tóxicas presentes en los materiales de construcción. Estos contaminantes pueden infiltrarse en el suelo y contaminar las aguas subterráneas y superficiales si no se manejan adecuadamente.
- **Generación de polvo y emisiones de partículas:** La demolición de estructuras puede generar grandes cantidades de polvo y partículas en suspensión en el aire, lo que puede tener efectos adversos en la calidad del aire y la salud humana, así como en los ecosistemas circundantes. Tal y como se explicó anteriormente, una medida preventiva para evitar el incremento del nivel de polvo y partículas podría ser el riego periódico de todas aquellas áreas que puedan suponer importantes generaciones de polvo, sobre todo en días con fuerte viento.
- **Ruido y vibraciones:** El uso de maquinaria pesada y herramientas de demolición, pueden generar altos niveles de ruido y vibraciones. Esto puede perturbar la fauna local y afectar el bienestar de las comunidades cercanas.
- **Alteración del paisaje:** Aunque la demolición puede alterar significativamente el paisaje, eliminando estructuras y modificando la topografía del área, al tratarse de un polígono industrial no se considera que esto pueda afectar a la estética del entorno y tener consecuencias sobre la fauna y flora local.

Junto con el Estudio de Impacto Ambiental, se deberá realiza un Plan de Vigilancia Ambiental (PVA), con el objetivo de garantizar que se cumplan las medidas correctivas y preventivas establecidas en dicho estudio.

8. EVALUACIÓN ECONÓMICA

El análisis económico es una parte fundamental del proyecto, cuyo objetivo es estudiar la rentabilidad de la planta. Para ello, se analizan los diferentes costes e ingresos del proceso.

En primer lugar, se clasifican los costes según las categorías definidas según la bibliografía (Peters et al, 2003):

- **Capital de Inversión Total (TCI):** Tiene en cuenta el capital fijo, el capital circulante y el coste de la adquisición del terreno.
- **Capital de operación:** Definido por los costes productivos de la planta (mano de obra, materias primas, utilities...), depreciación del capital fijo, impuestos sobre beneficios, ingresos de ventas de productos...

Por otro lado, se estudiarán los **ingresos anuales** obtenidos de la venta de los productos.

8.1. CAPITAL DE INVERSIÓN TOTAL

8.1.1. Capital fijo

El capital fijo incluye todos los recursos necesarios para la instalación de los equipos y la puesta en funcionamiento de la planta. Es importante distinguir entre **costes directos** (instalación de equipos, tuberías, sistemas eléctricos...) y **costes indirectos** (ingeniería, gastos de construcción...).

Para el cálculo del capital fijo se parte de los costes de adquisición de los equipos detallados en las secciones correspondientes. En la sección del reactor se ha obtenido un coste de 542 k€ y en la sección de separación se ha obtenido un coste de 882 k€. Además, con el objetivo de realizar una evaluación económica lo más realista posible, que tenga en cuenta el conjunto de la planta, se han considerado los costes de (Bajo y Méndez, 2023), que ascienden a 1492 k€.

En total, la adquisición de los equipos asciende hasta 2915 k€, valor sobre el que se añade un 10% adicional como gastos de transporte (Peters et al, 2003) resultando en un importe final de 3207 k€.

Para el cálculo de los costes directos e indirectos se utilizan los factores de Lang, como un porcentaje sobre el coste de los equipos entregados. Los factores de Lang están tabulados en función de si la planta opera con sólidos, fluidos, o sólidos y fluidos. Como la planta objeto de análisis es de fluidos, los factores de Lang se recogen en la Tabla XV, así como la estimación de los respectivos costes:

Tabla XV. Estimación de costes

		Factor de Lang	Coste estimado
Costes directos	Coste de equipos entregados	1	3 206 485 €
	Instalación de equipos	0.47	1 507 047 €
	Instrumentación y control	0.36	1 154 334 €
	Tuberías	0.68	2 180 409 €
	Sistemas eléctricos	0.11	352 713 €
	Edificaciones	0.18	577 167 €
	Mejoras parcela	0.1	320 648 €
	Instalaciones de servicios	0.7	2 244 539 €
Total			11 543 341 €
Costes indirectos	Ingeniería y supervisión	0.33	1 058 140 €
	Gastos de construcción	0.41	1 314 658 €
	Gastos legales	0.04	128 259 €
	Contratistas	0.22	705 426 €
	Contingencias	0.44	1 410 853 €
	Total		

Sumando los costes directos e indirectos, se obtiene un **capital fijo** de **16.2 millones de €**.

8.1.2. Capital circulante

El capital circulante, también conocido como capital de trabajo (WC), se refiere a los recursos financieros que una empresa necesita para sus operaciones diarias.

El capital de trabajo incluye, entre otros, la inversión destinada a materias primas y suministros en inventario, productos terminados, efectivo disponible para el pago mensual de gastos operativos... (Peters et al, 2003)

Para una planta que trabaja con fluidos el factor de Lang para el capital circulante es de 0.89, ascendiendo por lo tanto hasta 2.86 millones de €.

8.1.3. Adquisición del terreno

Tal y como se explica en el apartado "3.1. Localización de la planta", el terreno a adquirir cuenta con una superficie de 2343 m², que a 36,95 €/ m² (*La Opinión*, 2023) resulta en un coste de adquisición del terreno de 0.87 millones de €.

En definitiva, el **capital de inversión total** asciende a **19.3 millones de €**, según se recoge en el resumen de la Tabla XVI:

Tabla XVI. Resumen del capital de inversión total

Tipo de coste	Coste
Capital Fijo	16 160 677 €
Capital circulante	2 853 770 €
Adquisición del terreno	86 574 €
Capital de inversión total	19 101 021 €

8.2. CAPITAL DE OPERACIÓN

El capital de operación se divide en dos categorías: costes fijos y costes variables.

8.2.1. Costes de operación fijos

Los costes de operación fijos son aquellos que son prácticamente independientes de la tasa de producción. En esta categoría se incluyen los gastos por depreciación, impuestos, seguros y financiamiento (intereses de préstamos). Estos costes pueden ser estimados como un porcentaje del capital fijo según la bibliografía (Peters et al, 2003) y se muestran en la Tabla XVII.

Tabla XVII. Estimación de los costes de operación fijos

Tipo de coste	Porcentaje del capital fijo (FCI)	Coste
Depreciación	10 %	1 616 068 €
Impuestos	2 %	323 214 €
Seguros	1 %	161 607 €
Intereses	5 %	808 034 €
Costes de operación fijos		2 908 922 €

8.2.2. Costes de operación variables

Los costes de operación variables son aquellos necesarios para la explotación de la planta de producción. Se incluye el coste de la compra de materias primas, el coste de la mano de obra, el coste de *utilities* (agua, electricidad, gas natural...), así como los costes de mantenimiento.

En cuanto al coste de las **materias primas**, se obtiene su precio de fuentes externas, siendo estas: Bioetanol (*Trading Economics*, 2024) y 1-butanol (*Chemanalyst*, 2024), se presentan los resultados en la Tabla XVIII.

Tabla XVIII. Estimación del coste anual de materias primas

Materia prima	Precio (€/kg)	Cantidad (t/año)	Coste (€/año)
Bioetanol	0.56	15 490	8 674 400 €
1-butanol	1.72	24.31	41 813 €
Coste total de materias primas			8 716 213 €

Para la estimación de la mano de obra, se emplea la Figura D. 1 del Anexo D. Evaluación económica. Los trabajadores por turno y equipo se muestran en la Tabla XIX.

Tabla XIX. Trabajadores por turno según el equipo

Equipo	Trabajadores por turno
Reactor	0.5
Compresor	0.2
Condensador	0.1
Separador	0.5
Destilación y cambiadores	0.7
Total	2.0

Al igual que en el caso del capital de inversión, además de la mano de obra requerida para las secciones del presente proyecto, también se incluirá la mano de obra de los equipos del resto de la planta, de forma que se puede obtener una visión más global del proyecto. Dicho documento incluye 4 cambiadores de calor, 2 compresores, 1 caldera de combustión, 1 torre de lavado y 1 una columna de destilación; que requerirán un total de 2.5 trabajadores técnicos por turno.

En total, y como se han considerado turnos de 8 horas, trabajando las 24 horas del día (tres turnos), la mano de obra requerida es de 14 trabajadores.

Suponiendo un salario anual para el personal técnico de 28.1 k€ (*GLASSDOOR*, 2024), el coste anual por **mano de obra** asciende a 393.4 k€. Además, se estima un coste adicional para **supervisión y administración**, calculado como un 15% del coste de mano de obra (Peters et al, 2003), lo que asciende a 59 k€.

Respecto al coste de **utilities**, se ha estimado como un 10% sobre el coste materias primas y mano de obra (Peters et al, 2003). El coste anual de esta partida asciende a 916.8 k€.

Por último, también se han tenido en cuenta los costes de **mantenimiento** de la planta, así como las posibles reparaciones que podrían surgir. Se ha estimado como un coste anual del 7% del capital fijo (Peters et al, 2003), ascendiendo a 1.131 millones de €.

A continuación, en la Tabla XX se muestra un resumen de los costes de operación variables:

Tabla XX. Costes de operación variables

Tipo de coste	Coste
Coste de materias primas	8 716 213 €
Coste de mano de obra	452 410 €
Coste de <i>utilities</i>	916 862 €
Coste de mantenimiento	1 131 247 €
Costes de operación variable	11 216 247 €

Unificando los costes de operación fijos y variables, se obtienen unos **costes anuales de operación de 14.13 millones de €.**

8.3. INGRESOS ANUALES

En este apartado se estiman los ingresos procedentes de los precios de venta del bioetileno (*Business Analytiq*, 2024), dietiléter (*ChemAnalyst*, 2024), acetaldehído (*ChemAnalyst*, 2024) y gel hidroalcohólico (*MIX PROFESIONAL*, 2024). Los precios y los ingresos anuales se muestran en la Tabla XXI.

Tabla XXI. Estimación de los ingresos anuales por venta de productos

Producto	Precio (€/kg)	Producción (t/año)	Ingresos (€/año)
Etileno	1.30	9 120	11 856 000 €
Dietiléter	3.29	86	282 940 €
Acetaldehído	1.32	46	60 720 €
Gel hidroalcohólico	5.4	86	467 006 €
Ingresos anuales por venta de productos			12 666 666 €

8.4. RENTABILIDAD DE LA PLANTA Y CONCLUSIONES

En la Tabla XXII se muestra el resumen de costes e ingresos estimados durante el proyecto:

Tabla XXII. Resumen de costes e ingresos anuales

Tipo de coste	Coste
Capital de inversión	19 101 021 €
Capital de operación	14 125 655 €
Ingresos	12 666 666 €

A simple vista se puede apreciar como los costes de operación son mayores que los ingresos esperados, por lo que nunca se recuperaría la fuerte inversión inicial.

Por otro lado, se ha aplicado una tasa de actualización de precios del 2.5% anual, para poder obtener un análisis detallado a lo largo de los años. Se ha optado por ese valor ya que, históricamente, la tasa de inflación en muchas economías desarrolladas ha oscilado alrededor del 2%. Además, como desde la invasión rusa de Ucrania las tasas han variado de un año a otro, un 2.5% ofrece un margen de seguridad adicional para cubrir variaciones inesperadas y asegurar unas previsiones más conservadoras. Esta actualización de costes se ha ejecutado sobre los costes de operación y los ingresos estimados, tal y como se muestra en la Tabla D.1 del Anexo D “Evaluación económica”; en este Anexo se encuentran también estudios a 10 años con otras condiciones hipotéticas.

Bajo estas condiciones, el flujo de caja a origen en 10 años se situaría en una deuda de más de 35 millones de euros, no resultando el proyecto económicamente viable.

9. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Acetaldehyde Price Trend and Forecast. [en línea]. [Consulta: 30 mayo 2024]. Disponible en:
<https://www.chemanalyst.com/Pricing-data/acetalddehyde-1124>
- Bajo C., Méndez A.N., 2023. Producción de bioetileno a partir de bioetanol por deshidratación catalítica
- Bio-Based Ethylene Market Forecast to 2028 - COVID-19 Impact and Global Analysis By Raw Material and End-User Industry. [en línea]. [Consulta: 7 junio 2023]. Disponible en:
<https://www.theinsightpartners.com/reports/bio-based-ethylene-market>
- Bioethanol Trading Economics. [en línea]. [Consulta: 30 mayo 2024]. Disponible en:
<https://tradingeconomics.com/commodity/bioethanol>
- Bioethylene price index. [en línea]. [Consulta: 30 mayo 2024]. Disponible en:
<https://businessanalytiq.com/procurementanalytics/index/bioethylene-price-index/>
- Braskem – I'm green (Bio-Based). [en línea]. [Consulta: 12 junio 2023]. Disponible en:
<https://www.braskem.com.br/imgreen>
- Curtis Industrial. [en línea]. [Consulta: 11 mayo 2023]. Disponible en:
<https://www.curtis-industrial.com/>
- Ethylene Market – Global Industry Analysis, Size, Share, Growth, Trends, Regional Outlook, and Forecast 2024-2033. [en línea]. [Consulta: 15 mayo 2024]. Disponible en:
<https://www.precedenceresearch.com/ethylene-market>
- Ethylene Market – Global Industry Assessment & Forecast. [en línea]. [Consulta: 7 junio 2023]. Disponible en:
<https://www.vantagemarketresearch.com/industry-report/ethylene-market-1920>
- Ficha de seguridad Bioetileno. [en línea]. [Consulta: 2 marzo 2023]. Disponible en:
https://www.fishersci.es/chemicalProductData_uk/wercs?itemCode=10235114&lang=ES
- Ficha de seguridad Bioetileno. [en línea]. [Consulta: 2 marzo 2023]. Disponible en:
https://lopezparra.es/index.php?controller=attachment&id_attachment=681
- Gel hidroalcohólico higienizante de manos. [en línea]. [Consulta: 1 junio 2024]. Disponible en:
<https://mixprofesional.com/gel-mix-profesional>

INSHT, NTP N°238, 1989. Los análisis de peligros y de operabilidad en instalaciones de proceso. [en línea]. [Consulta: 28 mayo 2024]. Disponible en:

https://www.insst.es/documents/94886/327166/ntp_238.pdf/35c7cdc8-c208-46f9-8504-f80531791450

Kemp, I.C., 2020. Pinch analysis for energy and carbon footprint reduction, 3rd ed. Elsevier.

La Opinon A Coruña. [en línea]. Consulta: 31 mayo 2024. Disponible en:

<https://www.laopinioncoruna.es/gran-coruna/2023/08/02/subasta-29-parcelas-poligono-teixeiro-90569415.html>

Ley 8/2002, de 18 de diciembre, de protección del ambiente atmosférico de Galicia

Ley 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido

Ley 9/2010, de 4 de noviembre, de aguas de Galicia

Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de Evaluación Ambiental, Anexo I

n-Butanol Price Trend and Forecast. [en línea]. Consulta: 30 mayo 2024. Disponible en:

<https://www.chemanalyst.com/Pricing-data/n-butanol-78>

Peters, M.S., Timmerhaus, K.D., West, R.E., 2003. Plant Design and Economics for Chemical Engineers, Fith Edition

Polígono Industrial Curtis-Teixeiro [en línea]. [Consulta: 11 mayo 2024]. Disponible en:

<https://www.google.es/maps/>

Sede Electrónica del Catastro. [en línea]. [Consulta: 15 mayo 2024]. Disponible en:

<https://www1.sedecatastro.gob.es/>

Sueldos de Técnico. [en línea]. [Consulta: 15 mayo 2024]. Disponible en:

https://www.glassdoor.es/Sueldos/t%C3%A9cnico-sueldos-SRCH_KO0,7.htm

The Business Research Company: Ethylene Market Report 2023, Market Size, Trends and Global Forecast 2023-2032. [en línea]. [Consulta: 7 junio 2023]. Disponible en:

<https://www.thebusinessresearchcompany.com/report/ethylene-global-market-report>

VERTEX BIOENERGY [en línea]. [Consulta: 15 marzo 2023]. Disponible en:

<https://www.vertexbioenergy.com/>

10. ANEXOS

A. LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descripción	Unidad
ΔH	Entalpía	kW
ΔH_{acum}	Entalpía acumulada	kW
ΔH_{int}	Entalpía del intervalo	kW
ΔT_{int}^*	Diferencia de temperaturas modificadas del intervalo	°C o K
ΔT_{min}	Diferencia mínima de temperatura	°C o K
AFO	Análisis Funcional de Operabilidad	-
CAGR	Tasa compuesta anual	-
CP	Capacitancia	kW/°C
CP_{int}	Capacitancia del intervalo	kW/°C
$CP_{\text{calientes}}$	Capacitancia de las corrientes calientes	kW/°C
$CP_{\text{frías}}$	Capacitancia de las corrientes frías	kW/°C
EPA	Agenda de Protección Ambiental de EEUU	-
EPI	Equipo de Protección Individual	-
FCI	Inversión de Capital Fijo	-
FDS	Ficha de Seguridad	-
HAZOP	Hazard and Operability	-
HDPE	Polietileno de alta densidad	-
INSHT	Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo	-
LII	Límite Inferior de Inflamabilidad	-
LSI	Límite Superior de Inflamabilidad	-
NTP	Norma Técnica de Prevención	-
OCLV	Oxy Low Carbon Ventures	-
PE	Polietileno	-
PP	Polipropileno	-
PVA	Plan de Vigilancia Ambiental	-

PVC	Cloruro de polivinilo	-
ROI	Retorno sobre la inversión	-
T	Temperatura	°C o K
T*	Temperatura modificada	°C o K
T _{in}	Temperatura de entrada	°C
T _{in} *	Temperatura de entrada modificada	°C o K
T _{out}	Temperatura de salida	°C
T _{out} *	Temperatura de salida modificada	°C o K
TCI	Capital de Inversión Total	-
VC	Cloro vinilos	-
WC	Capital de trabajo	-
ZSM5	Zeolita Socony Mobile	-

B. LOCALIZACIÓN DE LA PLANTA

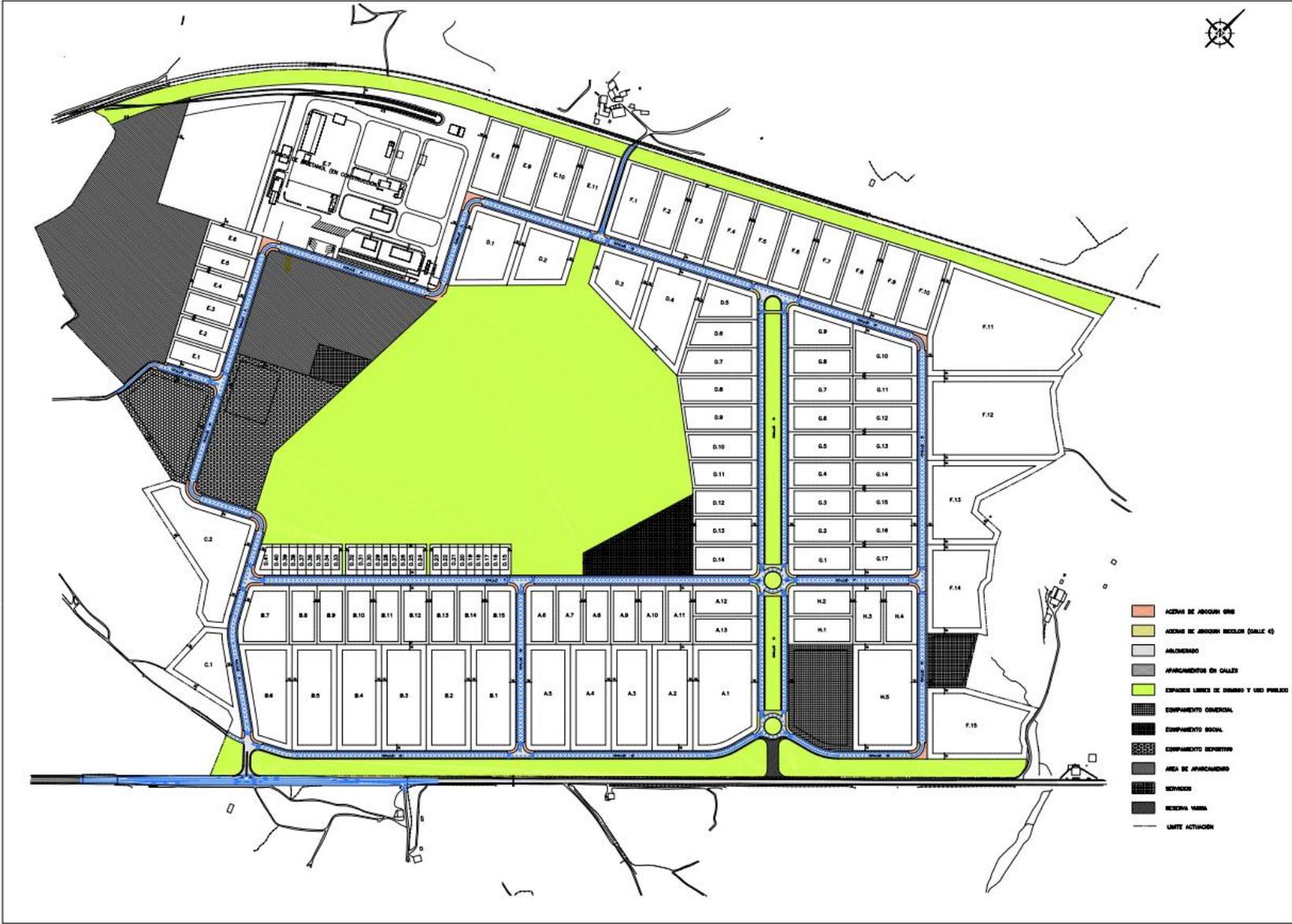


Figura B. 1. Plano del polígono de Teixeira

C. TOPOLOGÍA DE LA RED DE CAMBIADORES

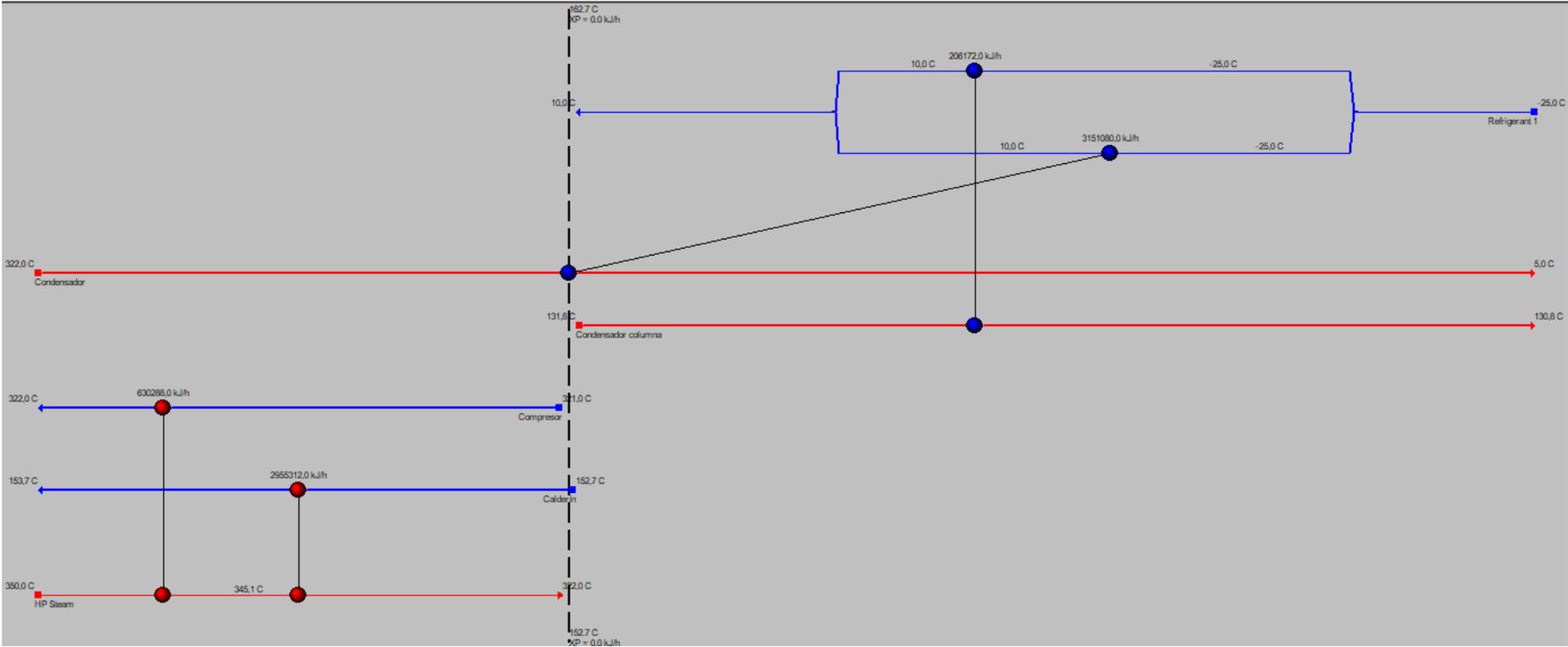


Figura C. 1. Propuesta de diseño de red de intercambiadores mediante Aspen Energy Analyzer

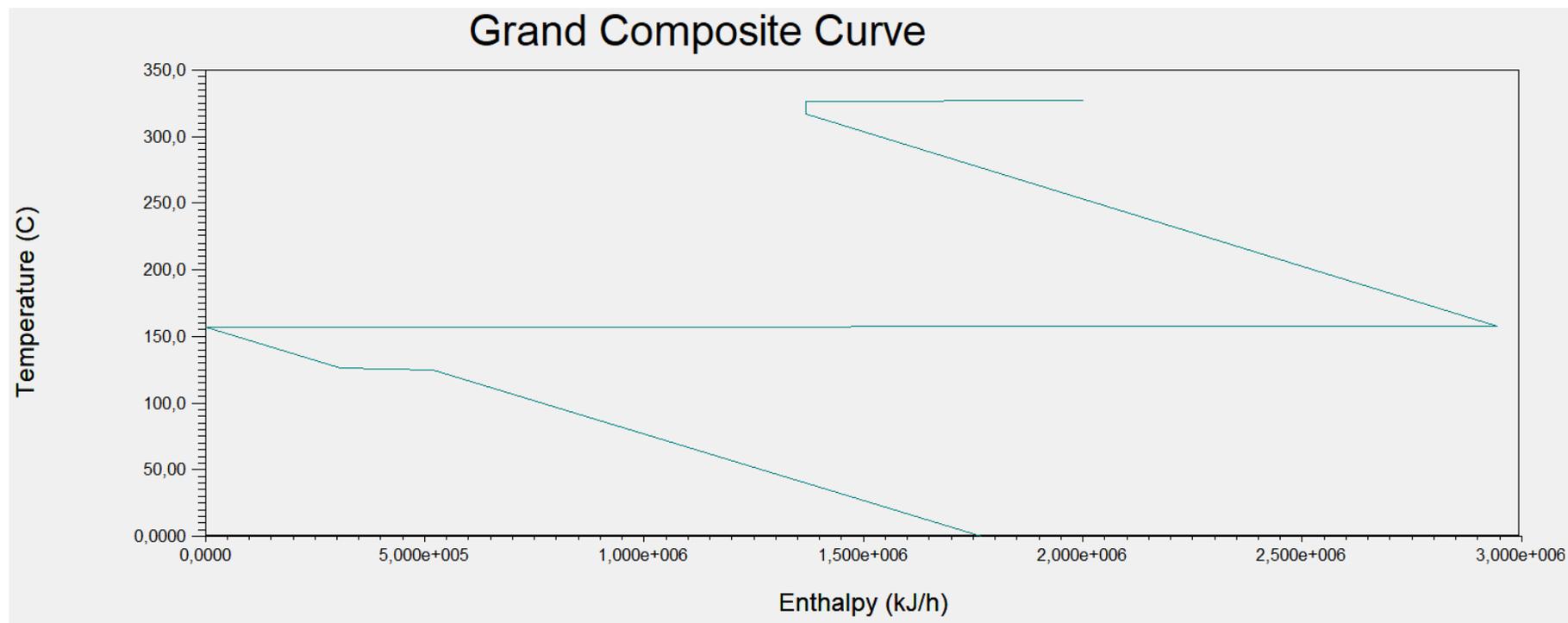


Figura C. 2. Curva compuesta global del proceso obtenida mediante Aspen Energy Analyzer

D. EVALUACIÓN ECONÓMICA

Table 6-13 Typical labor requirements for process equipment[†]

Type of equipment	Workers/unit/shift
Blowers and compressors	0.1–0.2
Centrifugal separator	0.25–0.50
Crystallizer, mechanical	0.16
Dryer, rotary	0.5
Dryer, spray	1.0
Dryer, tray	0.5
Evaporator	0.25
Filter, vacuum	0.125–0.25
Filter, plate and frame	1.0
Filter, rotary and belt	0.1
Heat exchangers	0.1
Process vessels, towers (including auxiliary pumps and exchangers)	0.2–0.5
Reactor, batch	1.0
Reactor, continuous	0.5

[†]For expanded process equipment labor requirements see G. D. Ulrich, *A Guide to Chemical Engineering Process Design and Economics*, J. Wiley, New York, 1984.

Figura D. 1. Requerimientos de mano de obra por equipo y turno (*Peters et al, 2003*)

D.1. Evaluación económica a 10 años

Idealmente, el flujo de caja de un proyecto sigue la estructura de la Figura D. 2, con una gran inversión inicial que se va recuperando con los años hasta llegar al punto donde los ingresos igualan los costes, a partir del cual el proyecto generará un beneficio.

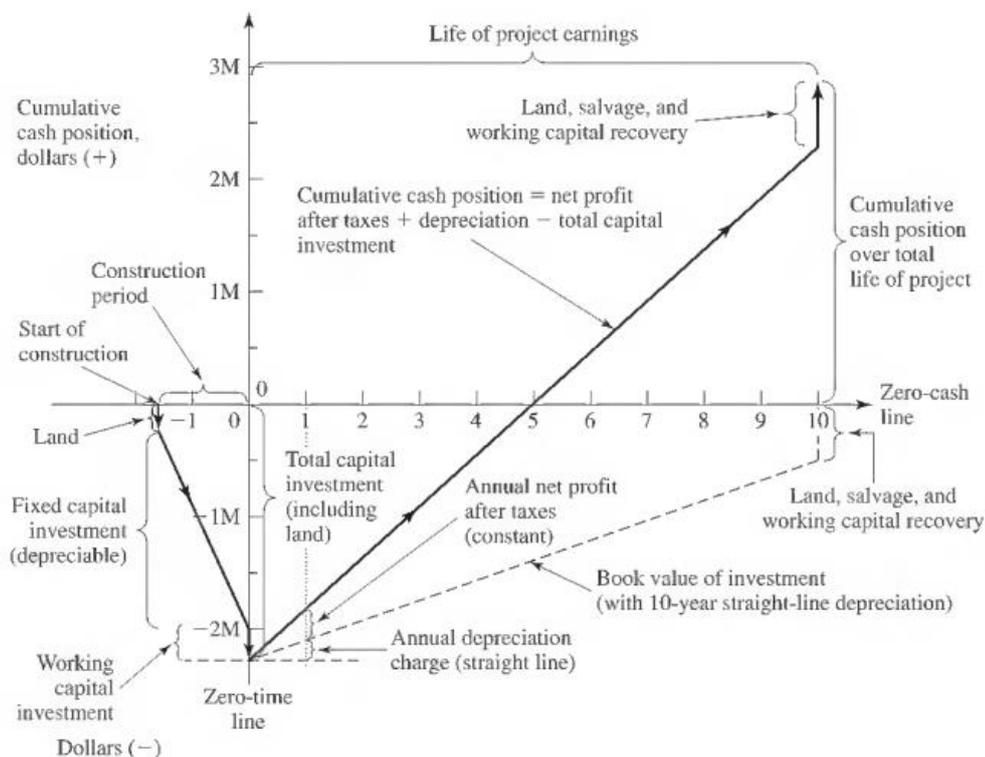


Figura D. 2. Estructura económica de un proyecto industrial rentable (*Peters et al, 2003*)

Para demostrar esta estructura se ha supuesto un nuevo precio de venta de etileno (el producto principal de la planta, y el que defines los ingresos), pasando de 1.3 €/kg considerado inicialmente a 1.8 €/kg. Bajo este supuesto se ha obtenido la Tabla D. 2, donde se puede observar cómo se consiguen beneficios a partir del año 6, superando los 15.6 millones para el año 10. A su vez, bajo este supuesto se consigue una TIR (Tasa Interna de Retorno) de 18.53%.

Por otro lado, hay que tener en cuenta que el dinero disponible en el presente vale más que la misma cantidad de dinero en el futuro, debido a su potencial para ganar intereses o rendimientos en ese intervalo de tiempo. Por lo tanto, un euro hoy es más valioso que un euro en el futuro.

Por lo tanto, cuando se evalúan flujos de efectivo futuros, se aplican **tasas de descuento** para reflejar este valor temporal del dinero. El uso de una tasa de descuento ajusta los flujos de efectivo futuros a su valor presente, considerando que el dinero hoy tiene más valor que el dinero en el futuro.

El VAN (Valor Actual Neto) es una medida financiera utilizada para evaluar la viabilidad de un proyecto de inversión. Representa la diferencia entre el valor presente de los flujos de efectivo futuros generados por la inversión y el costo inicial de esa inversión.

Se ha aplicado una tasa de descuento (actualización del capital) del 5%, obteniéndose un VAN a 10 años de 7.4 millones de euros. Bajo la suposición con un precio de venta superior, la planta sí que sería económicamente rentable, los resultados se presentan en la Tabla D.3.

Tabla D. 1. Evaluación económica del proyecto a 10 años

AÑO	INVERSION	VENTA BASE	RATIO	VENTA	OPERACIÓN Y MANTENIMIENTO BASE	RATIO	OPERACIÓN Y MANTENIMIENTO	FLUJO DE CAJA ANUAL	FLUJO DE CAJA A ORIGEN
0	19 101 021 €							-19 101 021 €	-19 101 021 €
1		12 666 666 €	1.00	12 666 666 €	14 125 655 €	1.00	14 125 655 €	-1 458 989 €	-20 560 010 €
2		12 666 666 €	1.03	12 983 332 €	14 125 655 €	1.03	14 478 796 €	-1 495 464 €	-22 055 474 €
3		12 666 666 €	1.05	13 307 916 €	14 125 655 €	1.05	14 840 766 €	-1 532 850 €	-23 588 324 €
4		12 666 666 €	1.08	13 640 614 €	14 125 655 €	1.08	15 211 785 €	-1 571 172 €	-25 159 496 €
5		12 666 666 €	1.10	13 981 629 €	14 125 655 €	1.10	15 592 080 €	-1 610 451 €	-26 769 947 €
6		12 666 666 €	1.13	14 331 170 €	14 125 655 €	1.13	15 981 882 €	-1 650 712 €	-28 420 659 €
7		12 666 666 €	1.16	14 689 449 €	14 125 655 €	1.16	16 381 429 €	-1 691 980 €	-30 112 639 €
8		12 666 666 €	1.19	15 056 685 €	14 125 655 €	1.19	16 790 965 €	-1 734 279 €	-31 846 918 €
9		12 666 666 €	1.22	15 433 102 €	14 125 655 €	1.22	17 210 739 €	-1 777 636 €	-33 624 555 €
10		12 666 666 €	1.25	15 818 930 €	14 125 655 €	1.25	17 641 007 €	-1 822 077 €	-35 446 632 €

Tabla D. 2. Evaluación económica del proyecto a 10 años con un nuevo precio de venta

AÑO	INVERSION	VENTA BASE	RATIO	VENTA	OPERACIÓN Y MANTENIMIENTO BASE	RATIO	OPERACIÓN Y MANTENIMIENTO	FLUJO DE CAJA ANUAL	FLUJO DE CAJA A ORIGEN
0	19 101 021 €							-19 101 021 €	-19 101 021 €
1		17 226 666 €	1.00	17 226 666 €	14 125 655 €	1.00	14 125 655 €	3 101 011 €	-16 000 010 €
2		17 226 666 €	1.03	17 657 332 €	14 125 655 €	1.03	14 478 796 €	3 178 536 €	-12 821 474 €
3		17 226 666 €	1.05	18 098 766 €	14 125 655 €	1.05	14 840 766 €	3 258 000 €	-9 563 474 €
4		17 226 666 €	1.08	18 551 235 €	14 125 655 €	1.08	15 211 785 €	3 339 450 €	-6 224 025 €
5		17 226 666 €	1.10	19 015 016 €	14 125 655 €	1.10	15 592 080 €	3 422 936 €	-2 801 089 €
6		17 226 666 €	1.13	19 490 391 €	14 125 655 €	1.13	15 981 882 €	3 508 509 €	707 421 €
7		17 226 666 €	1.16	19 977 651 €	14 125 655 €	1.16	16 381 429 €	3 596 222 €	4 303 643 €
8		17 226 666 €	1.19	20 477 092 €	14 125 655 €	1.19	16 790 965 €	3 686 128 €	7 989 770 €
9		17 226 666 €	1.22	20 989 020 €	14 125 655 €	1.22	17 210 739 €	3 778 281 €	11 768 051 €
10		17 226 666 €	1.25	21 513 745 €	14 125 655 €	1.25	17 641 007 €	3 872 738 €	15 640 789 €

Tabla D. 3. Evaluación económica del proyecto con una tasa de descuento del 5%

AÑO	RATIO ACTUALIZACIÓN DE CAPITAL	INVERSIÓN	VENTA	O&M	FLUJO DE CAJA ANUAL	FLUJO DE CAJA A ORIGEN
0	1.00	19 101 021 €			-19 101 021 €	-19 101 021 €
1	0.95		16 406 348 €	13 453 005 €	2 953 344 €	-16 147 678 €
2	0.91		16 015 721 €	13 132 695 €	2 883 026 €	-13 264 651 €
3	0.86		15 634 394 €	12 820 012 €	2 814 383 €	-10 450 269 €
4	0.82		15 262 147 €	12 514 773 €	2 747 374 €	-7 702 895 €
5	0.78		14 898 762 €	12 216 803 €	2 681 960 €	-5 020 935 €
6	0.75		14 544 030 €	11 925 926 €	2 618 104 €	-2 402 832 €
7	0.71		14 197 744 €	11 641 976 €	2 555 768 €	152 936 €
8	0.68		13 859 702 €	11 364 786 €	2 494 916 €	2 647 852 €
9	0.64		13 529 709 €	11 094 196 €	2 435 514 €	5 083 366 €
10	0.61		13 207 573 €	10 830 048 €	2 377 525 €	7 460 891 €



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**SECCIÓN I: REACTOR
MULTITUBULAR DE LECHO FIJO**

por

Guillermo Burón Rodríguez

Oviedo, Julio de 2024

INDICE

1. INTRODUCCIÓN	71
2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA	72
3. DISEÑO DE EQUIPOS	74
3.1. diseño del reactor	75
3.1.1. Estudio de la reacción	75
3.1.1. <i>Regeneración del catalizador</i>	77
3.1.2. Estudio de la cinética	78
3.1.3. Balance de materia	79
3.1.4. Balance de energía	81
3.1.5. Red de tuberías	91
4. ANÁLISIS DE COSTES	98
4.1. reactor	99
5. BIBLIOGRAFÍA	101
6. ANEXOS	103
A. Lista de símbolos	104
B. Tablas, figuras y cálculos	108
C. Iteración en excel	115
D. Gráficas para estimación de costes	116

INDICE DE TABLAS

Tabla I. 1 Balances de materia de la sección del reactor	73
Tabla I. 2 Balances de energía de la sección del reactor	73
Tabla I. 3 Condiciones de operación utilizadas en el diseño del reactor	80
Tabla I. 4 Características de los tubos utilizados en el reactor	82
Tabla I. 5 Valores calculados para el diseño de tuberías mediante el flujo volumétrico a la entrada de un tubo	92
Tabla I. 6 Diámetros correspondientes dentro de los valores normalizados	92
Tabla I. 7 Velocidades obtenidas tras el cálculo con los diámetros normalizados	93
Tabla I. 8 Diámetros normalizados corregidos	93
Tabla I. 9 Velocidades corregidas según los diámetros normalizados	93
Tabla I. 10 Valores del número de Reynolds para el diámetro normalizado	94
Tabla I. 11 Cálculo del primer término para la obtención de la potencia de la bomba	94
Tabla I. 12 Cálculo del segundo término para la obtención de la potencia de la bomba	95
Tabla I. 13 Cálculo del tercer término para la obtención de la potencia de la bomba	95
Tabla I. 14 Cálculo del cuarto término para la obtención de la potencia de la bomba	95
Tabla I. 15 Accesorios utilizados en la sección del reactor	96
Tabla I. 16 Valor del coeficiente de fricción para los accesorios utilizados en la sección del reactor	96
Tabla I. 17 Resumen de los términos para la obtención de la potencia de la bomba	96
Tabla I. 18. Costes de la sección del reactor actualizados	100

INDICE DE FIGURAS

Figura I. 1 Diagrama de flujo de la sección del reactor	73
Figura I. 2. Rutas reversibles de la deshidratación de bioetanol	75
Figura I. 3 Demostración gráfica del punto frío de la reacción en los experimentos realizados por <i>Kagyrmánova A. P.</i> , se representa en una gráfica de Temperatura frente a Longitud	76
Figura I. 4 Esquema de un reactor multitubular de lecho fijo, el catalizador se encuentra dentro de los tubos en forma monolítica	76
Figura I. 5 Representación de cómo circula el flujo por la forma de catalizador usado	78
Figura I. 6 Disposición triangular de los tubos en el reactor	84
Figura I. 7 Bomba centrífuga de la serie CO, modelos COM	97

1. INTRODUCCIÓN

El proceso de deshidratación del etanol para producir etileno implica una serie de pasos de reacción clave, algunos de los cuales aún son objeto de investigación activa. La reacción principal es la deshidratación de etanol en presencia de un catalizador ácido, en este caso, la zeolita Zeolite Socony Mobil-5 (H-ZSM5).

El reactor diseñado para este proceso es un reactor catalítico multitubular, optimizado para la deshidratación de bioetanol utilizando un monolito de zeolitas H-ZSM5 como catalizador. Este reactor cuenta con múltiples tubos que facilitan una distribución uniforme de calor y aseguran un contacto óptimo entre el reactivo y el catalizador. Las condiciones operativas se han fijado para maximizar la conversión y la selectividad.

La entrada al reactor proviene de la sección de acondicionamiento (Bajo y Méndez, 2023). Utilizando los balances de materia y energía, se ha calculado la masa de catalizador y las dimensiones del reactor asegurando una operación eficiente y segura que cumple con los objetivos de conversión del 98% y selectividad del 99%.

2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

La Figura I. 1 muestra el diagrama de flujo de la sección del reactor, y en la Tabla I. 1 y en la Tabla I. 2 un resumen de los balances de materia expresado por corrientes y el balance de energía del reactor respectivamente.

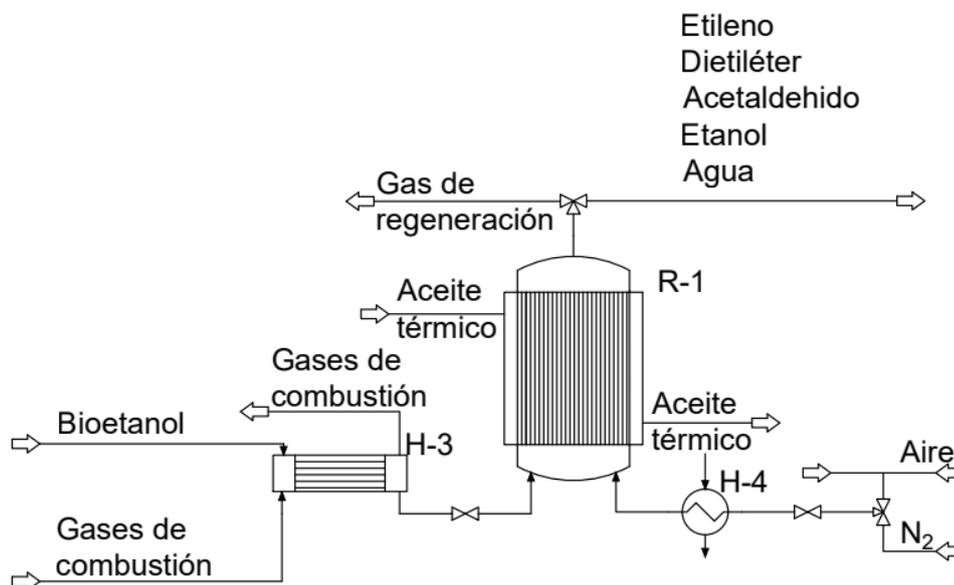


Figura I. 1 Diagrama de flujo de la sección del reactor

Tabla I. 1 Balances de materia de la sección del reactor

	Entrada (kg/h)	Salida (kg/h)
Agua	2	777
Bioetanol	1956	12
Etileno	-	1151
Dietiléter	-	12
Acetaldehído	-	6
Total	1958	1958

Tabla I. 2 Balances de energía de la sección del reactor

Equipo	Energía (kW)
Reactor	528.18

3. DISEÑO DE EQUIPOS

3.1. DISEÑO DEL REACTOR

3.1.1. Estudio de la reacción

El paso de reacción es el corazón del proceso de deshidratación de bioetanol para producir bioetileno, el mecanismo E1 de la reacción se basa en la adsorción del etanol en los sitios ácidos de la zeolita (Véase la Figura I. 2), seguida de la eliminación de una molécula de agua para formar etileno (Yu Yingzhe and Zhang Minhua, 2013); el mecanismo E2, en un solo paso, el hidrógeno es abstraído por una base al mismo tiempo que el grupo saliente se desprende; el mecanismo E1cB, es un mecanismo de eliminación unimolecular que pasa por la formación de una base conjugada como intermediario. Las distintas rutas para la deshidratación del bioetanol son las siguiente:

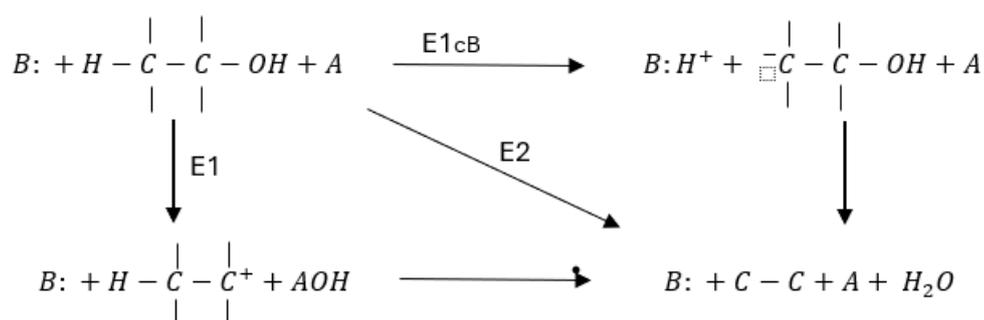


Figura I. 2. Rutas reversibles de la deshidratación de bioetanol (Yu Yingzhe and Zhang Minhua, 2013).

Se ha observado que la reacción viene controlada por la existencia de un punto frío ("cold spot") (Kagymanova A. P. et al, 2011), como se observa en la Figura I. 3 el perfil de temperatura a la largo de la longitud del reactor demuestra que existe una disminución de la temperatura de reacción (se puede observar la comparación con el aceite térmico en la Figura I. B. 1), la cual provoca la formación de dietiléter que se descompone a medida que la temperatura vuelve a los valores preestablecidos.

La existencia de este punto frío se demostró de manera experimental y posteriormente se verificó mediante la simulación del sistema en HYSYS (Kagymanova A. P. et al, 2011). Por lo tanto, es necesario tener en cuenta la disminución de temperatura en el tramo inicial del reactor, dicha disminución implica que se debe de introducir la corriente a una temperatura ligeramente superior.

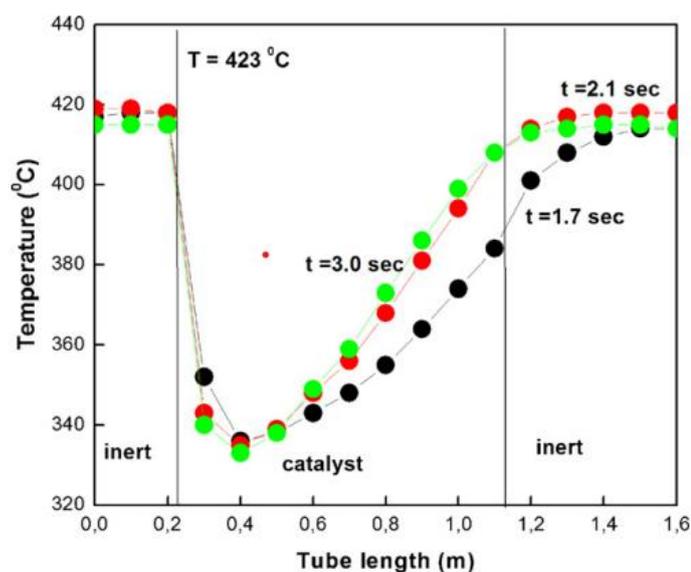


Figura I. 3 Demostración gráfica del punto frío de la reacción en los experimentos realizados por *Kagymanova A. P.*, se representa en una gráfica de Temperatura frente a Longitud (*Kagymanova A. P. et al., 2011*).

Este proceso se realiza en un reactor multitubular de lecho fijo, como se observa en la Figura I. 4, dicho lecho fijo está compuesto por partículas de una zeolita modificada como es la H-ZSM5, la cual tiene una superficie específica alta ($362 \text{ m}^2/\text{g}$) y un tamaño de poro definido (5 \AA). La H-ZSM5 es una zeolita que presenta un gran número de centros activos, por lo que requiere una modificación para la reducción de éstos, aumentando la vida útil del catalizador.

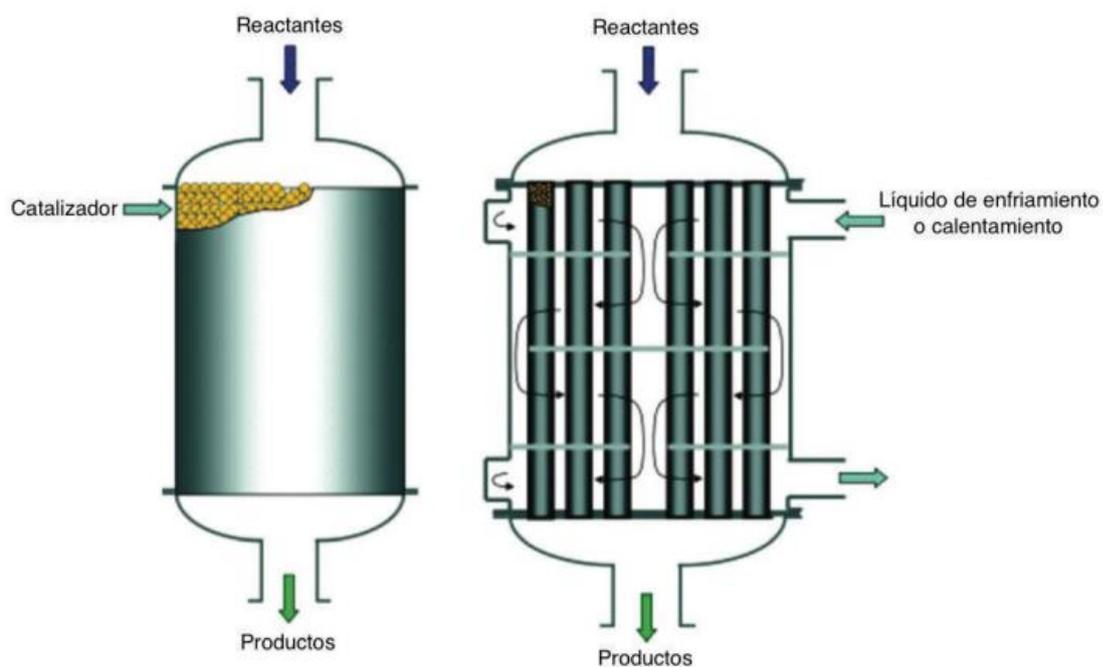


Figura I. 4 Esquema de un reactor multitubular de lecho fijo, el catalizador se encuentra dentro de los tubos en forma monolítica (*Elizabeth Iliana, 2019*)

El catalizador H-ZSM5, se emplea en forma de monolito en lugar de las tradicionales bolas de catalizador. Un monolito de zeolitas es una estructura continua y porosa que permite la una distribución uniforme del catalizador a lo largo del reactor. Esta configuración ofrece ventajas; mayor eficiencia catalítica, esta estructura proporciona una mayor área de superficie activa; mejor distribución de flujo, permite un flujo más uniforme de los reactantes; reducción de la caída de presión y mejora en la selectividad, menor resistencia al flujo lo que mejora la eficiencia catalítica.

3.1.1 Regeneración del catalizador

Se realiza el estudio sobre la regeneración de H-ZSM5, es necesario poner un énfasis especial en la relación entre la actividad recuperada del reactor y las condiciones de regeneración.

La regeneración del catalizador requiere un tratamiento de envejecimiento del coque (depositado sobre la superficie del catalizador) previo a la combustión utilizada para regenerar el catalizador (envejecimiento realizado con N₂), esta etapa garantiza una combustión homogénea y reproducible, evitando la combustión incontrolada (Aguayo, A. T. et al, 2005). Se analiza la combustión del coque mediante su ecuación cinética en la ecuación [1].

Se determina una ecuación cinética para la reactivación del catalizador, se estudia la relación entre la actividad recuperada y el tiempo de combustión con aire (Ecuación [2]). Se observa una recuperación de la actividad muy rápida si el nivel de desactivación es bajo. Esta reactivación corresponde a una gran fracción de los sitios activos, recuperando la actividad correspondiente al catalizador fresco.

Combustión del coque:

$$-\frac{dC_c}{dt} = k_r C_c P_{O_2} = A_r \exp\left(\frac{-E_r}{RT}\right) C_c P_{O_2} \quad [1]$$

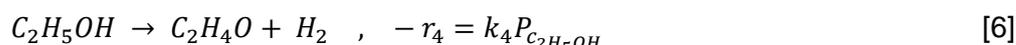
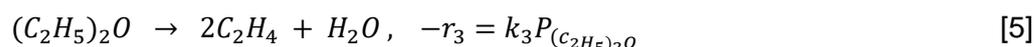
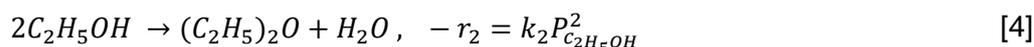
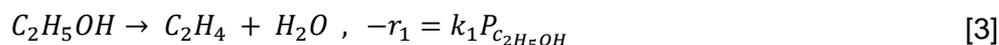
Actividad recuperada:

$$a_0 = 1 - (1 - a) \exp\left[-\left((4,0a - 2,0)10^{-4}t_c + ((0,240a - 0,037)t_c^2)\right)\right] \quad [2]$$

Una vez realizado un estudio preliminar de la regeneración, se observa la viabilidad de esta. Ya que la vida útil del catalizador es aproximadamente de un año, no se dispondrá de regenerador durante el primer año de actividad del proyecto, permitiendo así el estudio de la actividad del catalizador y su influencia en la reacción.

3.1.2. Estudio de la cinética

El proceso de deshidratación de bioetanol a etileno es una reacción catalítica compleja que puede incluir varias reacciones (Véase las ecuaciones [3], [4], [5] y [6]) secundarias además de la reacción principal (Ecuación [3]), entre las reacciones secundarias más comunes se encuentra la formación de dietiléter (Ecuación [4]).



Tras el estudio de las reacciones se estimó que la formación directa de etileno se obtiene en un intervalo determinado de temperaturas (dependiendo del catalizador usado), mientras que la reacción por la cual se produce éter dietílico ocurre a una temperatura inferior a la mencionada previamente. Por lo tanto, se llega a la conclusión que el éter dietílico es un intermedio de la reacción que se produce durante el punto frío de esta.

A partir de las investigaciones experimentales (Zhao Zk., 2005), observando la forma de catalizador elegido se llega a la conclusión de que se puede despreciar la resistencia de transferencia de materia tanto en el interior como en el exterior del catalizador. La estructura abierta y el área superficial accesible de los monolitos de las zeolitas contribuyen a la reducción de la resistencia externa a la transferencia de materia, la estructura de canales interconectados facilita la difusión rápida de los reactantes y los productos disminuyendo la resistencia interna.

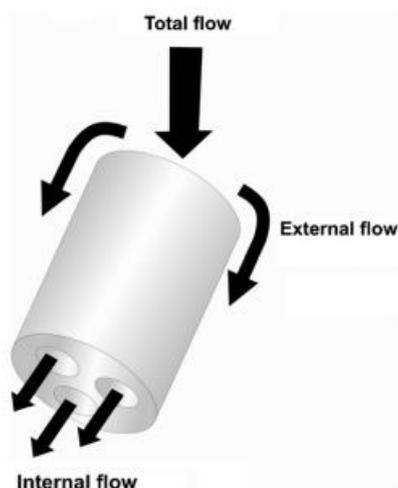


Figura I. 5 Representación de cómo circula el flujo por la forma de catalizador usado. (Kagymanova A. P. et al, 2007)

Por tanto, la cinética de la reacción de deshidratación de etanol puede ser modelada mediante el mecanismo de *Langmuir- Hinsheldwood* (ecuación [7]), que asume que la reacción en la superficie es la etapa controlante.

$$-r_{Etanol} = \frac{k \left(P_{Etanol} - \frac{P_{Etileno} P_{Agua}}{K} \right)}{\left(1 + K_{Etanol} P_{Etanol} + K_{Agua} P_{Agua} + K_{Éter} P_{Éter} \right)} \quad [7]$$

3.1.3. Balance de materia

En primer lugar se determina el peso de catalizador necesario (W), para lo que se utiliza la ecuación [8] de diseño para un reactor catalítico, se resuelven las incógnitas de la ecuación mediante las ecuaciones [9] y [10]

$$W_T = (F_{Et,0}) \int \frac{dx_{Et}}{[-r_{Et}(Tr, x_{Et})]} \quad [8]$$

$$\text{Donde } W_T = \frac{W}{N_T} \text{ es la masa de catalizador por tubo} \quad [9]$$

$$(F_{Et,0}) = \frac{F_{Et,total}}{N_i} \text{ el caudal de alimento por tubo} \quad [10]$$

Donde la presión parcial de cada componente se desarrolla mediante la siguiente ecuación [11].

$$P_i = C_{0etanol} \frac{F_{ie} - \frac{v_i}{v_{etanol}} x_A}{(1 - \varepsilon \cdot x_A)} \left(\frac{P_T}{P_e} \right) \cdot R \cdot T \quad [11]$$

Se realiza un sistema de ecuaciones para el cálculo del reactor, utilizando la ecuación cinética (basada en el peso del catalizador). Para completar dicho sistema de ecuaciones se necesita plantear el balance de energía (Ecuación [12]).

$$w_t \hat{C}_{p,f} dT = (\Delta \hat{H}^*) \frac{(F_{A,0})_t}{v_A} dx_A + d\dot{Q}_t \quad [12]$$

El calor que el tubo intercambia con el fluido de calentamiento depende del área de intercambio así como del coeficiente de transmisión global de intercambio de calor, este mismo depende de la conducción en el metal y la convección de los reactantes y los productos de reacción de un lado y del otro de la convección del fluido calefactor, expresándose en la ecuación [13].

$$d\dot{Q} = U (T_R - T) dA_t \quad [13]$$

Se diseña dicho reactor atendiendo a la cinética de la ecuación [7]. Debido a la existencia de un punto frío, se producen dos reacciones en paralelo las cuales crean una complejidad en el diseño manual. Por lo tanto, se obtienen los parámetros básicos del sistema mediante la bibliografía (Kagymanova A. P. et al, 2007).

Una vez obtenida la conversión del sistema, se calcula el peso del catalizador, el volumen del reactor se caracteriza mediante dicho peso del catalizador (véase la ecuación [14]).

$$V_{\text{tubo de reactor}} = \frac{W}{\rho_{\text{catalizador}}(1 - \varepsilon)} \quad [14]$$

Siendo la densidad del catalizador:

$$\rho_{\text{catalizador}} = 187 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

La porosidad del lecho ha sido validada mediante la experimentación de *Chung-Yen Wu* y tiene un valor de:

$$\varepsilon = 0,45$$

Para simplificar el diseño del reactor catalítico multitubular, se han utilizado condiciones de operación derivadas de estudios bibliográficos y datos experimentales de estos (Tabla I. 3). Estas condiciones permiten determinar el peso de catalizador y el volumen del reactor. A partir de estos parámetros, se procede al diseño detallado del equipo, asegurando que cumpla con los requisitos de operación óptimos para la deshidratación de etanol.

Tabla I. 3 Condiciones de operación utilizadas en el diseño del reactor

Condiciones de operación	
Presión del sistema (atm)	1.3
Temperatura del sistema (°C)	240-300 °C
Tiempo de residencia (s)	3
Conversión	0,99
Selectividad	0,99

3.1.4. Balance de energía

Se precisa realizar el balance de energía para determinar las necesidades del sistema. En particular, el cálculo del coeficiente global de transmisión de calor (U), es esencial para dimensionar el reactor (Iborra Montserrat, 2013). Inicialmente, se asume un valor estimado de U, este valor inicial se utiliza para dimensionar el reactor y calcular el número de tubos necesarios. A partir de estos resultados preliminares se realiza el cálculo del coeficiente de transmisión que satisfaga las necesidades de la reacción.

- Calor de reacción Q (J/s)

Para diseñar el sistema de manera efectiva, es fundamental conocer el valor el calor de reacción Q, el cual es un parámetro crítico en reacciones endotérmicas como la que se considera. Dicho valor no solo influye en el diseño del reactor y los materiales seleccionados, sino que también determina los requisitos de energía para mantener la reacción activa. Mediante la bibliografía se ha podido conocer el calor de reacción necesario para la deshidratación del bioetanol (Chung-Yen Wu et al, 2017).

$$\Delta H_{reacción} = 45.5 \frac{KJ}{mol} \text{ etileno producido}$$

Una vez obtenido el calor necesario por mol producido, se calcula el calor necesario por hora, para ello es necesario conocer el caudal molar de bioetanol, se resuelve la ecuación [15].

$$Q_{necesitado} = F_{bioetanol} \cdot \Delta H_{reacción} \quad [15]$$

$$Q_{necesitado} = 41790 \frac{kmol}{h} \cdot 45.5 \frac{kJ}{mol} = 1901445 \frac{kJ}{h} = 528.18 \frac{kJ}{s} [=] kW$$

- Área de intercambio calor. Cálculo del coeficiente de transmisión global U

Mantener condiciones isotérmicas es crucial en procesos químicos controlados. Para ello, se calcula el área de intercambio de calor necesaria mediante la ecuación [16], suponiendo un coeficiente de transferencia de calor global U. Este cálculo garantiza que se pueda suministrar suficiente calor para mantener la temperatura deseada a lo largo de toda la reacción.

$$A = \frac{Q}{U \cdot (T_1 - T_2)} \quad [16]$$

La temperatura T_2 es la temperatura del fluido en el interior de los tubos y la temperatura T_1 es la temperatura del fluido en el interior de la carcasa.

$$A = \frac{528.18 \frac{KJ}{s}}{21 \frac{J}{sm^2 \cdot ^\circ C} \cdot (300^\circ C - 250^\circ C)} = 503.03 m^2$$

- Dimensionado de los tubos

Se estima el tamaño de cada tubo, para ello se atiende a la bibliografía especializada en el diseño de intercambiadores de carcasa y tubos, se obtienen los valores vistos en la Tabla I. 4, dicho volumen es esencial para determinar la escala del equipo.

Tabla I. 4 Características de los tubos utilizados en el reactor (Valero Francesc et al, 2016)

CARACTERÍSTICAS DE LOS TUBOS DEL REACTOR	
Diámetro externo (D_{ext})	0.0300 m
Grosor	0.0032 m
Diámetro interior (D_{int})	0.0236 m
Longitud (L)	7m

Una vez se obtienen las características de los tubos, se calcula el número de tubos necesarios en el reactor (Ecuación [18]), mediante el cálculo del área de intercambio de calor de cada tubo (Ecuación [17]), se puede obtener el número de tubos total (N_T) utilizando el área total de intercambio

$$A_{tubo} = \pi D_E L \quad [17]$$

$$A_{tubo} = \pi \cdot 0.03 \cdot 7 = 0.660 m^2$$

Por lo tanto, una vez conocido el área de cada tubo:

$$N_{tubos} = \frac{A}{A_{tubo}} \quad [18]$$

$$N_{tubos} = \frac{A}{A_{tubo}} = \frac{503.03 m^2}{0.660 m^2} = 762.57 \sim 763 Tubos$$

Para obtener la conversión deseada, el reactor se debe sobredimensionar, ya que el cálculo realizado del volumen del reactor mediante la ecuación [19] es puramente teórico, es necesario mantener un margen de seguridad.

$$V = N_{tubos} L \pi \left(\frac{D_{int}}{2} \right)^2 = 2.4 m^3 \quad [19]$$

Dicho valor es dependiente del catalizador usado, se obtiene un valor menor al obtenido mediante el cálculo teórico de la bibliografía (Kagymanova A. P. et al, 2011), a modo de diseñar el reactor final se debe atender a la conversión obtenida de manera experimental y así ajustar la cantidad de catalizador usado.

Este volumen implica una menor cantidad de catalizador usado en el proceso, aplicando la ecuación [14], se calcula el peso de catalizador usado.

$$W = V_{\text{tubo de reactor}} \cdot \rho_{\text{catalizador}} \cdot (1 - \varepsilon) = 246.84 \approx 250 \text{ kg de catalizador}$$

- Tiempo de residencia en cada uno de los tubos

Mediante el uso del volumen de los tubos, se puede calcular el tiempo de residencia en cada uno de los mismos (Ecuación [20]), debe de ser un tiempo de residencia suficiente para asegurar la conversión de la reacción.

$$\tau = \frac{V_{1\text{tubo}}}{L} \quad [20]$$

El volumen de un tubo se calcula mediante la ecuación [21]

$$V_{1\text{tubo}} = \frac{Q_{1\text{tubo}}}{A_{\text{paso 1 tubo}}} \quad [21]$$

El caudal volumétrico del fluido se conoce mediante la ecuación [22].

$$Q_{1\text{tubo}} = \frac{Q_{\text{total}} \cdot N_{tp}}{N_{\text{tubos}}} \quad [22]$$

$$Q_{1\text{tubo}} = \frac{Q_{\text{total}}}{N_{\text{tubos}}} = \frac{0.50 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{763} = 0.0042 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$

Siendo por tanto el tiempo de residencia:

$$\tau = \frac{9.6 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{7\text{m}} = 1.37 \text{ s}$$

El tiempo obtenido es muy similar al consultado en la bibliografía (Kagymanova A. P, 2011), por lo tanto las hipótesis son correctas.

- Velocidad de los gases que circulan por los tubos

Posteriormente, se realiza el cálculo de la velocidad de los gases dentro de los tubos (véase la ecuación [23]), confirmando así que las dimensiones asumidas son adecuadas para el proceso. Esta velocidad debe ser la óptima para evitar problemas de erosión, vibración y transferencia de calor ineficiente.

$$v_t = \frac{m_{tEt}}{\rho_{fluido} \cdot A_{paso\ 1\ tubo} \cdot N_{tp}} \quad [23]$$

Utilizando el caudal másico que circula por cada tubo, conocida el área de un tubo individual, se calcula mediante la ecuación [24], así como el número de tubos por paso (N_{tp}), se calcula la velocidad de los gases, dicha velocidad debe de tener un valor típico para este tipo de gases (mayor a 6 m/s), en caso contrario se debe de aumentar el número de tubos por paso.

$$A_{paso\ 1\ tubo} = \frac{\pi}{4} \cdot (D_{int})^2 \quad [24]$$

$$A_{paso\ 1\ tubo} = \frac{\pi}{4} \cdot (D_{int})^2 = \frac{\pi}{4} \cdot (0.0236m)^2 = 0.00044\ m^2$$

Ya que dicha velocidad no alcanza el mínimo valor se realiza el cálculo con 8 tubos por paso, se realizó el cálculo con 4 tubos por paso pero la velocidad fue inferior a 6 m/s (Véase el anexo B. tablas, figuras y cálculos)

$$v_t = \frac{0.54\ \frac{kg}{s}}{1.08\ \frac{kg}{m^3} \cdot 0.00044\ m^2 \cdot \frac{763\ tubos}{8\ tubos\ por\ paso}} = 11.91\ \frac{m}{s}$$

- Cálculo del diámetro de la carcasa, valorando el pitch y utilizando una herramienta gráfica

El diámetro de la carcasa del intercambiador de calor se calcula considerando el pitch, de este modo se optimiza el espacio y la eficiencia en el intercambio de calor. Se emplean herramientas gráficas para visualizar y ajustar la configuración.

El pitch se define como la distancia entre el centro de dos tubos consecutivos, existen diversas configuraciones para el posicionamiento de los tubos, en este caso se escoge el pitch triangular como se observa en la Figura I. 6, el cual proporciona una gran transferencia de calor.

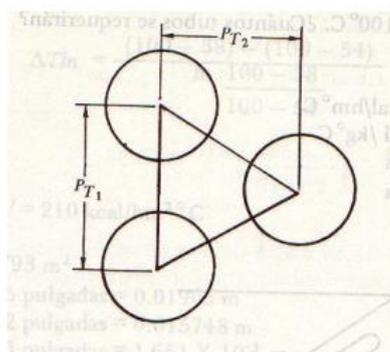


Figura I. 6 Disposición triangular de los tubos en el reactor (Valero Francesc et al, 2016)

$$pitch = 1.25 \cdot D_e = 1.25 \cdot 0.03 = 0.0375 \text{ m}$$

Por lo tanto, una vez seleccionado el pitch, se calcula el diámetro del conjunto de los tubos mediante la ecuación [25].

$$D_b = D_{ext} \left(\frac{N_{tubos}}{K_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} \quad [25]$$

$$D_b = D_{ext} \left(\frac{N_{tubos}}{K_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} = 0,03 \cdot \left(\frac{763}{0,0365} \right)^{\frac{1}{2,675}} = 1.23 \text{ m}$$

Se calcula el diámetro estudiando los nuevos valores de la ecuación n_1 y K_1 , estas constantes son dependientes del pitch y del número de tubos por paso.

Tras haber determinado el diámetro del conjunto de tubos, se necesita determinar qué tipo de cabezal del intercambiador se selecciona, en esta ocasión el diámetro valorado en la bibliografía es el de tipo *Spill-ring floating head*, se estudia la Figura I. B. 2, obteniendo un diámetro de la carcasa (Se necesita realizar una iteración):

$$D_s = 1.321 \text{ m}$$

Es necesario comprobar la relación entre la longitud de los tubos y el diámetro de la carcasa, ya que dependiendo de su valor se puede incidir en complicaciones; si la relación es superior a 6, el manejo de los tubos así como la regeneración se vuelve más costosa; si la relación es inferior a 4, la distribución del fluido se aleja de la idealidad.

$$\frac{L}{D_s} = \frac{7 \text{ m}}{1.312 \text{ m}} = 5.3 \quad \text{lo que implica } 4 < 5.3 < 6$$

- Cálculo de las pantallas deflectoras

El último concepto que se debe dimensionar son las pantallas deflectoras, dichas pantallas son esenciales para dirigir el flujo de los fluidos a través del reactor, maximizando así la eficiencia del intercambio de calor. El diseño y cálculo de estas pantallas requiere una consideración cuidadosa de la dinámica de fluidos y la distribución de temperatura.

Para definir el cálculo de las pantallas deflectoras se necesitan determinar dos factores, cuántas pantallas tiene el reactor (Ecuación [26]) y cuál será la separación entre las mismas. Para determinar el número de pantallas deflectoras se utiliza la siguiente fórmula, donde l_b es el espacio entre pantallas y viene especificado en la bibliografía:

$$N_{pantallas} = \left(\frac{L}{l_b} \right) - 1 \quad [26]$$

$$N_{pantallas} = \left(\frac{L}{I_b}\right) - 1 = \left(\frac{7}{0.3 \cdot 1.312}\right) - 1 = 16.78 \sim 17 \text{ pantallas}$$

- Cálculo del coeficiente individual de convección del fluido que pasa por los tubos, mediante la correlación de *Sieder y Tate* (*ht*).

El coeficiente de convección individual de los tubos se calcula basándose en los números de Reynolds y Prandtl mediante las ecuaciones [27] y [28], respectivamente. Estos números permite evaluar cómo las propiedades del fluido y las condiciones de flujo afectan a la transferencia de calor.

$$Re_{tubos} = \frac{D_{int} \cdot G_{tubos}}{\mu} \quad [27]$$

$$Pr_{tubos} = \frac{C_p \cdot \mu}{k} \quad [28]$$

Se calculan los valores de ambas ecuaciones.

Caudal másico por unidad de área se calcula mediante la ecuación [29]:

$$G_{tubos} = \frac{m_t}{A_{paso \text{ total}}} \quad [29]$$

$$G_{tubos} = \frac{m_t}{A_{paso \text{ total}}} = \frac{0.54 \frac{kg}{s}}{0.042 m^2} = 12.87 \frac{kg}{m^2 s}$$

Donde, $m_t = 0.54 \frac{kg}{s}$ y $A_{paso \text{ total}} = N_t \cdot \frac{A_{paso \text{ 1 tubo}}}{N_{tp}} = 763 \cdot \frac{0.00044}{8} = 0.042 m^2$

Calor específico de la mezcla, la media entre el calor específico de la entrada y la salida.

$$\bar{c}_p = \frac{c_{p \text{ entrada}} + c_{p \text{ salida}}}{2} = \frac{1.95 \frac{kJ}{kgK} + 2.05 \frac{kJ}{kgK}}{2} = 2 \frac{kJ}{kgK} = 2000 \frac{J}{kgK}$$

La viscosidad de la mezcla, al igual que el calor específico, se debe de realizar una media entre la viscosidad de entrada y de salida.

$$\bar{\mu} = \frac{\mu_{entrada} + \mu_{salida}}{2} = \frac{0.0145 cP + 0.174 cP}{2} = 0.0159 cP = 1.595 \cdot 10^{-5} \frac{kg}{ms^2}$$

Se prosigue calculando la conductividad térmica del fluido, se realiza la media entre la entrada y la salida.

$$\bar{k} = \frac{k_{entrada} + k_{salida}}{2} = \frac{0.018 \frac{W}{mK} + 0.02 \frac{W}{mK}}{2} = 0.019 \frac{W}{mK}$$

Se puede calcular el Reynolds así como el Prandtl una vez obtenidos los resultados previos.

$$Re_{tubos} = \frac{D_{int} \cdot G_{tubos}}{\mu} = \frac{0.0236 \text{ m} \cdot 12.87 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{ s}}}{1.595 \cdot 10^{-5} \frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}} = 19042.75 \quad \text{Régimen turbulento}$$

$$Pr_{tubos} = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = \frac{2000 \frac{\text{J}}{\text{kgK}} \cdot 1.595 \cdot 10^{-5} \frac{\text{kg}}{\text{m s}^2}}{0.019 \frac{\text{W}}{\text{m K}}} = 1.68$$

A continuación, se utiliza la correlación de *Sieder y Tate* para calcular el Nusselt (Nu), dicha correlación se expresa mediante la ecuación [30], se considera que no existe variación en la viscosidad del fluido por lo tanto la fórmula es la siguiente.

$$Nu = 0.027 \cdot Re^{0.8} \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \quad [30]$$

$$Nu = 0.027 \cdot Re^{0.8} \cdot Pr^{\frac{1}{3}} = 0.027 \cdot 19042.75^{0.8} \cdot 1.68^{\frac{1}{3}} = 63.93$$

Por último, se calcula el valor del coeficiente individual de convección en los tubos del reactor mediante su relación con el Nusselt (Ecuación [31]).

$$ht = \frac{Nu \cdot k}{D_{int}} \quad [31]$$

$$ht = \frac{Nu \cdot k}{D_{int}} = \frac{63.93 \cdot 0.019}{0.0236} = 51.48 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}}$$

- Cálculo del coeficiente individual en la carcasa, mediante la correlación de *Zhukauskas* (h_s).

De forma similar al paso anterior, el coeficiente de convección de la carcasa también se evalúa, para ello se utiliza la ecuación de *Zhukauskas*, dependiente del Reynolds y el Prandtl.

Se comienza calculando el área transversal de la carcasa, necesaria para el cálculo del caudal másico por unidad de área circulante por la carcasa, el área transversal es dependiente del diámetro de la carcasa y se expresa mediante la ecuación [32].

$$A_{ST} = \frac{I_B \cdot D_s \cdot (\text{pitch} - D_{ext})}{\text{pitch} \cdot n_{ps}} \quad [32]$$

Donde,

$$I_B (\text{Espaciado entre pantallas}) = 0.3 \cdot D_s = 0.3 \cdot 1.312 = 0.394 \text{ m}$$

$$D_s (\text{Diámetro de la carcasa}) = 1.312 \text{ m}$$

$$n_{ps}(\text{número de pasos por carcasa}) = 1$$

$$pitch = 1,25 \cdot D_{ext} = 0.0375 \text{ m}$$

$$D_{ext} (\text{Diámetro externo}) = 0.03 \text{ m}$$

$$A_{ST} = \frac{0.394 \text{ m} \cdot 1.312 \text{ m} \cdot (0.0375 \text{ m} - 0.03 \text{ m})}{0.0375 \text{ m} \cdot 1} = 0.102 \text{ m}^2$$

A continuación, se calcula el caudal másico de fluido de calentamiento (Ecuación [33]), para dicho cálculo se utiliza el balance de energía del sistema de calentamiento del reactor.

$$Q = m_s \cdot C_p \cdot \Delta T \quad [33]$$

Donde,

Calor específico de la mezcla, la media entre el calor específico de la entrada y la salida.

$$\bar{c}_p = \frac{c_{p \text{ entrada}} + c_{p \text{ salida}}}{2} = \frac{2.40 \frac{\text{kJ}}{\text{kgK}} + 2.59 \frac{\text{kJ}}{\text{kgK}}}{2} = 2.49 \frac{\text{kJ}}{\text{kgK}} = 2490 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$$

La temperatura del aceite térmico se establece en el punto anterior.

Calor necesitado en la reacción.

$$m_s = \frac{Q}{C_p \cdot \Delta T} = \frac{528179.2 \frac{\text{J}}{\text{s}}}{2490 \frac{\text{J}}{\text{kgK}} \cdot (50 + 273)\text{K}} = 0.66 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$$

Tras lograr el cálculo del caudal másico del fluido de calentamiento, se estudia el caudal másico por unidad de área en la carcasa así como la velocidad del fluido, siendo la densidad del aceite térmico que calienta la reacción la siguiente:

Densidad de la mezcla, la media entre la densidad de la entrada y la salida.

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_{\text{entrada}} + \rho_{\text{salida}}}{2} = \frac{843 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} + 882 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}}{2} = 862.5 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$G_s = \frac{m_s}{A_{ST}} = \frac{0.66 \frac{\text{kg}}{\text{s}}}{0.051 \text{ m}^2} = 12.70 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{ s}}$$

$$v_s = \frac{m_s}{A_{ST} \cdot \rho_s} = \frac{0.66 \frac{\text{kg}}{\text{s}}}{0.102 \text{ m}^2 \cdot 862.5 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} = 0.0078 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Por consiguiente, se procede a calcular el Reynolds y el Prandtl en la carcasa, dichos números se expresan mediante las ecuaciones [34] y [35], respectivamente.

$$Re_s = \frac{D_{eq} \cdot G_s}{\mu} \quad [34]$$

$$Pr_s = \frac{C_p \cdot \mu}{k} \quad [35]$$

Donde,

D_{eq} (diámetro equivalente de la carcasa)

$$D_{eq} = \frac{1.10}{0.03} \cdot (0.0375^2 - 0.917 \cdot 0.03^2) = 0.0213 \text{ m}$$

$\bar{\mu}$ (viscosidad media del fluido de calentamiento)

$$\bar{\mu} = \frac{\mu_{entrada} + \mu_{salida}}{2} = \frac{0.542 \text{ cP} + 0.375 \text{ cP}}{2} = 0.458 \text{ cP} = 4.585 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kg}}{\text{ms}^2}$$

\bar{k} (conductividad térmica media)

$$\bar{k} = \frac{k_{entrada} + k_{salida}}{2} = \frac{0.0937 \frac{\text{W}}{\text{m K}} + 0.1004 \frac{\text{W}}{\text{m K}}}{2} = 0.0975 \frac{\text{W}}{\text{m K}}$$

Por lo tanto, los valores de Reynolds y Prandtl son:

$$Re_s = \frac{D_{eq} \cdot G_s}{\mu} = \frac{0.0213 \text{ m} \cdot 12.70 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{ s}}}{4.585 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kg}}{\text{ms}^2}} = 589.99 \quad \text{Régimen turbulento}$$

$$Pr_s = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = \frac{2490 \frac{\text{J}}{\text{kg K}} \cdot 4.585 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kg}}{\text{ms}^2}}{0.0975 \frac{\text{W}}{\text{m K}}} = 11.70$$

En consecuencia, se realiza el cálculo de la ecuación de Zhukauskas obteniendo un valor de Nusselt, la ecuación de Zhukauskas se expresa mediante la ecuación [36].

$$Nu = 0.35 \cdot Re^{0.6} \cdot Pr^{-0.7} \quad [36]$$

$$Nu = 0.35 \cdot Re^{0.6} \cdot Pr^{-0.7} = 0.35 \cdot 589.99^{0.6} \cdot 11.70^{-0.7} = 2.90$$

Una vez obtenido el valor de Nusselt se procede a calcular el coeficiente individual de la carcasa mediante la ecuación [37].

$$hs = \frac{Nu \cdot k}{D_{ext}} \quad [37]$$

$$hs = \frac{Nu \cdot k}{D_{ext}} = 9.44$$

- Se comprueba el coeficiente global de transmisión de calor

Para calcular el coeficiente global de transmisión de calor, es necesario combinar los coeficientes individuales de convección interna y externa, así como la resistencia asociada a la pared. Un coeficiente global de transmisión de calor preciso es crucial para garantizar un diseño eficiente y optimizado del intercambiador de calor, ya que afecta directamente a la capacidad de transferencia de calor y, por lo tanto, la eficacia y el rendimiento del proceso químico y térmico asociado. La ecuación [38] es la ecuación general.

$$\frac{1}{U_r} = \frac{1}{h_s} + \frac{1}{h_t} + \frac{D_{ext} \cdot \ln\left(\frac{D_{ext}}{D_{int}}\right)}{2 \cdot k_{acero}} + \frac{D_{ext}}{D_{int}} \cdot \frac{1}{R_t} + \frac{D_{ext}}{D_{int}} \cdot \frac{1}{h_r} \quad [38]$$

Los valores nuevos de dicha ecuación son los siguientes:

h_r (factor de ensuciamiento del fluido que circula por los tubos) = se selecciona un valor típico para este tipo de gas en cuestión: $5000 \frac{W}{^{\circ}Cm^2}$

R_t (factor de ensuciamiento del fluido que circula por la carcasa) = valor habitual para un aceite térmico de este tipo varía entre los $1000 - 5000 \frac{W}{^{\circ}Cm^2}$, dependiendo del diseño y los materiales utilizados, se escoge un valor medio de: $2500 \frac{W}{^{\circ}Cm^2}$

k_{acero} (conductividad del material que separa ambos fluidos) = se escoge acero inoxidable para el valor del reactor: $17 \frac{W}{^{\circ}Cm^2}$

$$\frac{1}{U_r} = \frac{1}{9.44} + \frac{1}{51.48} + \frac{0.03 \cdot \ln\left(\frac{0.03}{0.0236}\right)}{2 \cdot 17} + \frac{0.03}{0.0236} \cdot \frac{1}{2500} + \frac{0.03}{0.0236} \cdot \frac{1}{5000} =$$

$$U_r = 8.23 \frac{W}{^{\circ}Cm^2}$$

Una vez obtenido el resultado, se compara con el resultado supuesto al principio del cálculo, se puede observar que el coeficiente es menor y por lo tanto implica un aumento del área, implicando un mayor número de tubos.

Finalmente, una vez calculado el coeficiente de transmisión global, es necesario calcular la pérdida de presión del fluido durante la circulación por los tubos y la carcasa, a modo de facilitar el cálculo de este parámetro, se proporcionan unas gráficas obtenidas de la bibliografía para evaluar el factor de fricción mediante el uso de Reynolds, dichas variaciones de presión se calculan mediante las ecuaciones [39] y [40].

- Pérdida de presión del fluido interior.

$$\Delta P_t = 8 \cdot j_f \cdot \frac{\rho \cdot v_t^2}{2} \cdot \left(\frac{L}{D_{int}} \right) \quad [39]$$

Estudiando la Figura I. B. 3, se obtiene un valor de 0,004 para el factor de fricción, necesario para calcular la pérdida de presión ocasionada por el fluido que circula por los tubos, esta pérdida de presión es complementaria a la pérdida de presión ocasionada por el catalizador en el carbón activo, por lo tanto, la pérdida de presión total en el interior de los tubos es la siguiente:

$$\Delta P_{tubos} = 8 \cdot 0.004 \cdot \frac{1.08 \frac{kg}{m^3} \cdot \left(11.91 \frac{m}{s} \right)^2}{2} \cdot \left(\frac{7 m}{0.0236 m} \right) = 727.03 \frac{N}{m^2} = 727.03 \cdot 10^{-5} bar$$

$$\Delta P_{total} = \Delta P_{tubos} + \Delta P_{Ergun} = 727.03 \cdot 10^{-5} bar + 0.082 bar = 0.0892 bar$$

- Pérdida de presión del fluido exterior.

Para realizar el cálculo de la pérdida de presión del fluido de calentamiento, se utiliza la siguiente ecuación:

$$\Delta P_s = n_s \cdot 8 \cdot j_f \cdot \frac{\rho \cdot v_t^2}{2} \cdot \left(\frac{D_s}{D_{eq}} \right) \cdot \left(\frac{L}{I_b} \right) \quad [40]$$

Accediendo a la Figura I. B. 4, se obtiene un valor de 0,010 para el factor de fricción, se calcula la pérdida de presión en la carcasa.

$$\begin{aligned} \Delta P_{tubos} &= 2 \cdot 8 \cdot 0.010 \cdot \frac{862.5 \frac{kg}{m^3} \cdot \left(0.0147 \frac{m}{s} \right)^2}{2} \cdot \left(\frac{1.312 m}{0.0213 m} \right) \cdot \left(\frac{7 m}{0.394 m} \right) = 16.31 \frac{N}{m^2} \\ &= 1.631 \cdot 10^{-4} bar \end{aligned}$$

3.1.5. Red de tuberías

En este apartado se especifica el método utilizado para realizar el dimensionamiento de las tuberías utilizadas en la carga del reactor. Se determinan dos parámetros clave en el diseño del proceso; el diámetro de las tuberías, dependiente de la velocidad de paso del fluido; la potencia de la bomba, necesaria para el cálculo de las bombas utilizadas en el proceso.

- **Cálculo del diámetro de las tuberías.**

A modo de obtener el diámetro de las tuberías utilizadas, la selección de la velocidad de paso del fluido es crítica y está basada en los valores típicos establecidos, se selecciona un valor en base a las velocidades recomendadas (McCabe et al, 2007) que se muestran en la Figura I. B. 5. Una vez seleccionado un valor para la entrada y otro para la salida, se calcula la sección de la tubería y el diámetro mediante las ecuaciones [41] y [42].

$$S = \frac{Q}{v} \quad [41]$$

$$D_i = \sqrt{\frac{4S}{\pi}} \quad [42]$$

Se exponen los valores obtenidos en la Tabla I. 5.

Tabla I. 5 Valores calculados para el diseño de tuberías mediante el flujo volumétrico a la entrada de un tubo

Parámetros	Valor
Velocidad a la entrada [m/s]	8
Velocidad a la salida [m/s]	22
Superficie a la entrada [m ²]	0.0063
Superficie a la salida [m ²]	0.0027
Diámetro interno a la entrada [m]	0.028
Diámetro interno a la salida [m]	0.017

Para los diámetros obtenidos se buscará el valor normalizado utilizado en los tamaños estándar (Tioga, 2013), dichos valores se muestran en la Tabla I. 6.

Tabla I. 6 Diámetros correspondientes dentro de los valores normalizados

Parámetros según norma	Valor [m]
Diámetro interno entrada (D_{inorma})	0.033
Diámetro interno salida (D_{onorma})	0.023

Una vez obtenidos los diámetros normalizados de la Tabla I. 6, se calculan las velocidades de flujo reales en las tuberías normalizadas (Véase la Tabla I. 7), dichos valores deben de estar situados dentro del rango definido previamente.

Tabla I. 7 Velocidades obtenidas tras el cálculo con los diámetros normalizados

Parámetros según norma	Valor [m/s]
V_{inorma}	6
V_{0norma}	11

Ya que la velocidad a la entrada no corresponde con el rango previamente expuesto, se modifica el diámetro interno de la tubería, obteniendo un valor normalizado dentro del rango válido, se establecen los valores de las velocidades corregidas en la Tabla I. 9

Tabla I. 8 Diámetros normalizados corregidos

Parámetros según norma	Valor [m]
Diámetro interno entrada (D_{inorma})	0.027
Diámetro interno salida (D_{0norma})	0.023

Tabla I. 9 Velocidades corregidas según los diámetros normalizados

Parámetros según norma	Valor [m/s]
V_{inorma}	9
V_{0norma}	11

- **Cálculo de la potencia de la bomba**

Con las tuberías seleccionadas, el siguiente paso es calcular la potencia y altura que debe de tener la bomba encargada de impulsar el fluido. Para este propósito se utiliza la ecuación [43] propuesta por (Díaz, 2015) para fluidos incomprensibles.

1. Variación de energía cinética: representado por el primer término, este factor se ajusta con el coeficiente α , el cual depende del número de Reynolds.
2. Diferencia de altura (h): es el segundo término, tiene en cuenta la diferencia de altura que debe de superar la bomba.
3. Diferencia de presión: el tercer término indica las diferencias de presión entre en punto de entrada y el punto de salida del sistema.

4. Pérdidas por fricción: los dos últimos términos representan las pérdidas por fricción en la tubería y en los distintos accesorios, respectivamente.

$$\frac{1}{2\alpha}\Delta v^2 + g\Delta h + \frac{\Delta p}{\rho} + \sum \frac{1}{2}v^2 \frac{L}{R_H} f + \sum \frac{1}{2}v^2 e_v + \hat{w}_s = 0 \quad [43]$$

Se procede a desglosar cada término para la resolución de este.

1. Variación de energía cinética

Se comienza con el cálculo de Reynolds para cada tramo de tubería mediante la ecuación [44].

$$Re_{tubos} = \frac{D_{int} \cdot \rho \cdot v}{\mu} \quad [44]$$

Se obtienen los resultados de la Tabla I. 10

Tabla I. 10 Valores del número de Reynolds para el diámetro normalizado

Parámetros según norma	Valor
Re_i	9
Re_0	11

Debido al resultado obtenidos, ambos valores se consideran régimen turbulento, por lo tanto, el valor de α es 1, por lo tanto se calcula el primer término como se observa en la Tabla I. 11.

Tabla I. 11 Cálculo del primer término para la obtención de la potencia de la bomba

Parámetros según norma	Valor
α	1
$\frac{1}{2\alpha}\Delta v^2$	2

2. Diferencia de altura

Se procede al cálculo del segundo término, para ello la gravedad (g) tendrá u valor de $9,81\text{m/s}^2$ y la diferencia de altura será de 5 metros (Véase la Tabla I. 12)

Tabla I. 12 Cálculo del segundo término para la obtención de la potencia de la bomba

Parámetros	Valor
Δh [m]	5
$g\Delta h$	49

3. Diferencia de presión

La presión en cada lado se calculará según la altura inicial del fluido en el tanque y la posición de este. Para este caso, se debe de tener en cuenta la altura del fluido en la circulación mediante la ecuación [45].

$$P = \rho g h_{\text{fluido}} + P_{\text{atm}} \quad [45]$$

Una vez obtenida la variación de presión mediante el balance de energía, se utiliza dicho valor para el cálculo de este término, se exponen los valores en la Tabla I. 13.

Tabla I. 13 Cálculo del tercer término para la obtención de la potencia de la bomba

Parámetros	Valor
Δp [kPa]	8.9
ρ [kg/m ³]	1.08
$\frac{\Delta p}{\rho}$ [m ² /s ²]	8.24

4. Pérdidas por fricción

Una vez determinado el factor de fricción durante el diseño del equipo, se requiere conocer la longitud de la tubería (L_t) y el radio hidráulico (R_H). De acuerdo con la bibliografía se accede a los valores típicos de estos parámetros (véase la Tabla I. 14)

Tabla I. 14 Cálculo del cuarto término para la obtención de la potencia de la bomba

Parámetros	Valor
L [m]	30
f	0.004
$\sum \frac{1}{2} v^2 \frac{L}{R_H} f$	10.21

Por último, se realiza el cálculo del término de fricción para los accesorios, el cálculo de este es dependiente del valor de e_v , coeficiente de fricción en accesorios. Dicho coeficiente se encuentra tabulado para los distintos accesorios en la Tabla I. B. 2 donde se muestran los valores para los accesorios utilizados.

Tabla I. 15 Accesorios utilizados en la sección del reactor

Entrada (v_i)	Salida (v_0)
Codo 90° (3)	Válvula globo abierta
Válvula globo abierta	

Se aplican los respectivos valores para este término, se obtienen los valores vistos en la Tabla I. 16.

Tabla I. 16 Valor del coeficiente de fricción para los accesorios utilizados en la sección del reactor

Parámetros	Valor
Codo 90° (3)	0.75
Válvula globo abierta	6.00
$\sum \frac{1}{2} v^2 e_v$	14.25

Por lo tanto, se resuelven los valores de cada factor se calcula la potencia de la bomba (véase la Tabla I. 17).

Tabla I. 17 Resumen de los términos para la obtención de la potencia de la bomba

Parámetros	Valor
$\frac{1}{2} \Delta v^2$	2
$g\Delta h$	49
$\frac{\Delta p}{\rho}$	8.24
$\sum \frac{1}{2} v^2 \frac{L}{R_H} f$	10.21
$\sum \frac{1}{2} v^2 e_v$	14.25
\hat{w}_s	74.7

Obtenida la potencia de la bomba se calcula la altura de la bomba en metros mediante la ecuación [46].

$$H_w = \frac{\hat{w}_s}{g} \quad [46]$$

$$H_w = \frac{\hat{w}_s}{g} = 7.6 \text{ m}$$

En base a los requerimientos identificados, se procede a seleccionar una bomba comercial que cumpla con las necesidades de bombeo especificadas. Para ello, se consulta el catálogo proporcionado por Salvador Escoda, con el objetivo de encontrar una bomba que satisfaga las exigencias de caudal y altura establecidas.

Se selecciona la bomba centrífuga monofásica de la serie CO, modelo COM 350/15, fabricada en acero AISI-136 (Véase la Figura I. 7). Esta bomba es capaz de manejar un flujo de 6 a 21 m³/h a una altura entre 4 y 9.2 metros, con una potencia de 0.75 CV es apta para el sistema. Se muestran los datos de la bomba en la Figura I. B. 6



Figura I. 7 Bomba centrífuga de la serie CO, modelos COM

La bomba cuenta con una entrada estándar de 1 1/2" (40 mm) y una salida de 1 1/4" (32 mm), lo que introduce un estrechamiento en la entrada y un ensanchamiento en la salida. Se recalcula el balance de energía mecánica para incluir estos factores y observar su impacto en la altura requerida de la bomba.

$$H_w = 7 \text{ m}$$

Este resultado confirma que la bomba seleccionada es adecuada, dicha bomba tiene un coste de 1,200 € (2002) que se añadirá al reactor.

4. ANÁLISIS DE COSTES

4.1. REACTOR

Los costes de un reactor multitubular se pueden estimar considerando la unidad del reactor con un intercambiador de carcasa y tubos.

En este caso es un reactor multitubular de lecho fijo con catalizador dentro de los tubos, el volumen del reactor debe de ser igual al volumen dentro de los tubos, atendiendo a los cálculos vistos en el balance de energía, se toma el área de intercambio de calor para el cálculo de los costes.

$$A = \frac{528,179.92 \frac{J}{s}}{8.23 \frac{J}{sm^2 \cdot C} \cdot (300^{\circ}C - 250^{\circ}C)} = 1283.55 m^2$$

Se utiliza la Figura I. D 1, los costes de un intercambiador de carcasa y tubo, para la menor presión posible y un cambiador de acero inoxidable. Dicha gráfica otorga los valores para un reactor constituido por unos tubos de 4.88m de longitud, 0.019 m de diámetro y una presión de 690 kPa, estos valores deben de ser ajustados a los valores reales.

Se obtiene un valor de 84 k\$ ($28 \text{ k\$} \cdot 3 \text{ Factor acero inoxidable}$), se necesita ajustar dicho resultado ya que los valores reales para el diámetro, longitud de los tubos y presión son distintos a los suministrados por la bibliografía (Peters S. Max et al, 2003).

- Se recomienda multiplicar el valor obtenido por 3 en los cambiadores de carcasa y tubos.
- El valor del diámetro real es de 0.0236 m, se debe de ajustar los 0.019 m tomados como referencia mediante la Figura I. D 2
- La longitud calculada es de 7m, se ajusta mediante la Figura I. D 3 el valor de 4.88 m que se toma como referencia.
- La presión valorada es de 131 kPa frente a los 690 kPa tomados como referencia, se ajustan mediante la Figura I. D 4

Una vez obtenidos los valores de ajuste se estructura la ecuación final.

$$\text{Coste total} = \text{coste inicial} \cdot 3 \cdot \left(\frac{\text{Ajuste actual diámetro}}{\text{Ajuste referencia diámetro}} \right) \cdot \left(\frac{\text{Ajuste actual altura}}{\text{Ajuste referencia altura}} \right) \cdot \left(\frac{\text{Ajuste actual presión}}{\text{Ajuste referencia presión}} \right)$$

$$84 \text{ k\$} \cdot 3 \cdot \left(\frac{0.96}{0.91} \right) \cdot \left(\frac{0.9}{1} \right) \cdot \left(\frac{0.94}{0.96} \right) = 234 \text{ k\$}$$

Por lo tanto, se calcula el coste del catalizador, ya que se necesitan 246.84 Kg, se valora su coste actualmente.

$$\text{Coste catalizador} = \text{Peso catalizador} \cdot \text{Coste por cada Kg}$$

$$246.84 \text{ kg} \cdot 25 \frac{\$}{\text{kg}} = 6.2 \text{ k\$}$$

Por último, se calcula la suma total del coste del reactor, se debe sumar un 20 % el coste del reactor debido al emplazamiento de conexiones para alimentar el mismo.

$$\text{Coste total (2002)}: 234.3 \text{ k\$} \cdot 1.2 + 6.2 \text{ k\$} = 287 \text{ k\$}$$

Se resumen los costes en la Tabla I. 18 tanto en dólares como en euros. Además, se ajustan los precios mediante el uso de los índices de costes de 2002 (395.6) y febrero de 2024 (800.3) obtenidos de *Towering Skills* (el precio del catalizador no requiere ajuste ya que es actual).

$$\text{Coste actual} = \text{Coste 2002} \cdot \frac{\text{Índice de costes 2024}}{\text{Índice de costes 2002}}$$

Tabla I. 18. Costes de la sección del reactor actualizados

	Coste 2002 (k\$)	Coste 2024 (k\$)	Coste 2024 (k€)
Reactor	287.3	589.08	542.01

5. BIBLIOGRAFÍA

-
- AGUAYO, A. T., et al. Regeneration of a HZSM-5 zeolite catalyst deactivated in the transformation of aqueous ethanol into hydrocarbons. *Catalysis today*, 2005, vol. 107.
- Bajo C., Méndez A.N., 2023. Producción de bioetileno a partir de bioetanol por deshidratación catalítica
- HERNÁNDEZ, Orlando Franco, et al. Catalizadores de alumina y estudio cinético de la deshidratación de etanol a etileno. *Ingeniería e Investigación*, 1983.
- KAGYRMANOVA, A. P., et al. Catalytic dehydration of bioethanol to ethylene: Pilot-scale studies and process simulation. *Chemical Engineering Journal*, 2011, vol. 176.
- McCabe, W.L., Smith, J.C., Harriott, P. *Operaciones unitarias en ingeniería química*, 7a edición. ed. 2007.
- MOON, Sanggil; CHAE, Ho-Jeong; PARK, Min Bum. Dehydration of bioethanol to ethylene over H-ZSM-5 catalysts: A scale-up study. *Catalysts*, 2019, vol. 9.
- Perry, R.H., Green, D.W., 1985. *Manual del Ingeniero Químico*. McGraw Hill
- Peters, M.S., Timmerhaus, K.D., West, R.E., 2003. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*, Fifth Edition
- SCHULZ, Jürgen; BANDERMANN, Friedhelm. Conversion of ethanol over zeolite H-ZSM-5. *Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology*, 1994, vol. 17.
- Tioga. *Tioga: Pipe Dimensions and Weights*
- Walas S.M., *Chemical Process Equipment: Selection and Design*, Butterworth-Heinemann, Woburn, MA, 1988
- WU, Chung-Yen; WU, Ho-Shing. Ethylene formation from ethanol dehydration using ZSM-5 catalyst. *ACS omega*, 2017, vol. 2.
- ZHANG, Minhua; YU, Yingzhe. Dehydration of ethanol to ethylene. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2013, vol. 52.

6. ANEXOS

A. LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descripción	Unidad
Δh	Diferencia de altura	m
$\Delta H_{reacción}$	Entalpía de la reacción	$\frac{KJ}{mol}$
ΔT	Variación de temperatura	K
ε	Factor de expansión volumétrico	-
$\bar{\mu}$	Viscosidad media del fluido	$\frac{kg}{ms^2}$
$\rho_{catalizador}$	Densidad del catalizador	$\frac{kg}{m^3}$
$\bar{\rho}$	Densidad media del fluido	$\frac{kg}{m^3}$
τ	Tiempo de residencia	s
a	Actividad de la reacción	-
a_0	Actividad recuperada	-
A	Centro ácido del catalizador	-
A_r	Factor pre-exponencial Arrhenius para el coque	$Pa^{-1}s^{-1}$
A_{ST}	Área transversal de la carcasa	m
A_t	Área de intercambio de calor	m ²
B	Centro básico del catalizador	-
C	Carbono (formulación orgánica)	-
$C_{0etanol}$	Concentración inicial del etanol	$\frac{mol}{L}$
C_c	Concentración del coque	$\frac{mol}{L}$
\bar{c}_p	Calor específico medio del fluido	$\frac{J}{kgK}$
$\hat{C}_{p,f}$	Capacidad calorífica media de cada componente	
D	Diámetro	m
D_{eq}	Diámetro equivalente	m

D_{ext}	Diámetro del exterior de los tubos	m
D_{int}	Diámetro del interior de los tubos	m
D_s	Diámetro de la carcasa	m
E1	Reacción eliminación molécula individual nº1	-
E1cB	Reacción eliminación base conjugada	-
E2	Reacción eliminación molécula individual nº2	-
$-E_i$	Energía activación para la reacción	$\frac{kcal}{mol}$
e_v	Coefficiente de fricción de los accesorios	-
F_{Et}	Flujo molar del bioetanol	$\frac{mol}{h}$
F_{ie}	Flujo molar de cada componente en la entrada	$\frac{mol}{h}$
G	Velocidad másica del fluido	$\frac{kg}{m^2s}$
H	Altura de carga de la bomba	m
H-ZSM5	ZSM5 Ácido	-
h_r	Factor de ensuciamiento del fluido que circula por los tubos	$\frac{W}{\text{°Cm}^2}$
h_s	Coefficiente individual de convección en la carcasa	$\frac{W}{\text{°Cm}^2}$
h_t	Coefficiente individual de convección en los tubos	$\frac{W}{\text{°Cm}^2}$
l_b	Espacio entre pantallas	m
j_f	Factor de fricción del fluido que circula por los tubos	-
\bar{k}	Conductividad térmica media del fluido	$\frac{W}{m K}$
K_i	Constante de equilibrio de cada componente	$\frac{1}{kgcat s atm}$
k_i	Constante cinética de cada componente	$\frac{mol}{kgcat s atm}$
k_r	Constante desactivación del coque	$Pa^{-1}s^{-1}$

m_t	Flujo másico de cada componente	$\frac{kg}{h}$
m_{tEt}	Flujo másico de bioetanol	$\frac{kg}{s}$
$N_{pantallas}$	Número de pantallas	-
n_{ps}	Número de pasos por carcasa	-
N_T	Número de tubos del reactor	-
N_{tp}	Número de tubos por cada paso	-
Nu	Nusselt	-
P_e	Presión a la entrada del reactor	<i>atm</i>
P_i	Presión parcial de cada componente en la reacción	<i>atm</i>
P_{O_2}	Presión parcial del oxígeno	<i>atm</i>
Pr	Número de Prandtl	-
P_T	Presión total del sistema	<i>atm</i>
Q_{1tubo}	Caudal volumétrico que circula por un tubo	$\frac{m^3}{s}$
Q_{total}	Caudal volumétrico total	$\frac{m^3}{s}$
\dot{Q}_t	Calor intercambiado en el reactor	<i>kW</i>
R	Constante ideal de los gases	$\frac{kcal}{mol K}$
Re	Número de Reynolds	-
R_H	Radio hidráulico	m
R_t	Factor de ensuciamiento del fluido que circula por la carcasa	$\frac{W}{\text{°Cm}^2}$
$-r_i$	Velocidad de desaparición de un compuesto	$\frac{1}{kgcat s}$
S	Superficie de circulación del fluido	m^2
T	Temperatura del bioetanol entrada	°C
t_c	Tiempo de combustión	min

T_r	Temperatura de reacción	$^{\circ}\text{C}$
T_R	Temperatura del fluido de calentamiento	$^{\circ}\text{C}$
U	Coeficiente global de transmisión de calor	$\frac{\text{W}}{^{\circ}\text{Cm}^2}$
V	Volumen del reactor	m^3
v_i	Fracción molar de cada componente	-
W	Masa del catalizador del reactor	kg
W_T	Masa del catalizador por tubo	kg
\hat{w}_s	Potencia de la bomba	W
x_A	Conversión del reactor	-
ZSM5	Zeolita Socony Mobile	-

B. TABLAS, FIGURAS Y CÁLCULOS

Se presentan las masas moleculares utilizadas en el cálculo de Tabla I. B. 1 Masas molares de los compuestos utilizados.

Tabla I. B. 1 Masas molares de los compuestos utilizados

Masas molares de los compuestos utilizados (kg/kmol)	
Etanol	46.8
Etileno	28.05
Agua	18
Éter dietílico	74.12
Acetaldehído	4405

Cálculos para el flujo de etanol

$$1956 \frac{kg}{h} \cdot \frac{1 kmol}{46.8 Kg} = 41.79 \frac{kmol}{h}$$

$$41.79 \frac{kmol}{h} \cdot \frac{1 h}{3600 s} = 0.0116 \frac{kmol}{s}$$

$$0.0116 \frac{kmol}{s} \cdot \frac{1000 mol}{1 kmol} = 11.6 \frac{mol}{s}$$

Cálculos para el flujo volumétrico.

$$1956 \frac{kg}{h} \cdot \frac{1 h}{3600 s} \cdot \frac{1 m^3}{1.08 kg} = 0.50 \frac{m^3}{s}$$

Cálculos para el calor de reacción (ecuación [15]).

$$1.901.445 \frac{kJ}{h} \cdot \frac{1 h}{3600 s} = 528.18 \frac{kJ}{h}$$

$$528.18 \frac{kJ}{s} \cdot \frac{1 kcal}{4.18 kJ} = 126.23 \frac{kcal}{s} = 414456.26 \frac{kcal}{h}$$

B.1. Cálculo del reactor con el coeficiente de transmisión global real

Se realiza el cálculo del reactor para el coeficiente de transmisión global obtenido del balance de energía.

$$A = \frac{Q}{U \cdot (T_1 - T_2)}$$

La temperatura T_2 es la temperatura del fluido en el interior de los tubos y la temperatura T_1 es la temperatura del fluido en el interior de la carcasa.

$$A = \frac{528.18 \frac{KJ}{s}}{8.23 \frac{J}{sm^2 \cdot ^\circ C} \cdot (300^\circ C - 250^\circ C)} = 1283.55 m^2$$

- Dimensionado de los tubos

Se estima el tamaño de cada tubo, para ello se atiende a la bibliografía especializada en el diseño de intercambiadores de carcasa y tubos (Cameron Gregory et al, 2012), dicho volumen es esencial para determinar la escala del equipo.

Una vez se obtienen las características de los tubos, se calcula el número de tubos necesarios en el reactor, mediante el cálculo del área de intercambio de calor de cada tubo, se puede obtener el número de tubos total (N_T) utilizando el área total de intercambio.

$$A_{tubo} = \pi \cdot 0.03 \cdot 7 = 0.660 m^2$$

Por lo tanto, una vez conocido el área de cada tubo:

$$N_{tubos} = \frac{A}{A_{tubo}} = \frac{1283.55 m^2}{0.660 m^2} = 1944.8 \sim 1945 Tubos$$

A modo de obtener la conversión deseada, el reactor se debe sobredimensionar, ya que el cálculo realizado es puramente teórico, es necesario mantener un margen de seguridad.

$$V = 1945 \cdot 7 \cdot \pi \left(\frac{0.0236}{2} \right)^2 = 6.1 m^3$$

Este volumen implica una menor cantidad de catalizador usado en el proceso, aplicando la ecuación [14], se calcula el peso de catalizador usado.

$$W = V_{tubo \ de \ reactor} \cdot \rho_{catalizador} \cdot (1 - \varepsilon) = 143.99 \text{ kg de catalizador}$$

B.2. Cálculo de la velocidad del fluido para el reactor con 4 tubos por paso

$$v_t = \frac{0.54 \frac{kg}{s}}{1.08 \frac{kg}{m^3} \cdot 0.00044 m^2 \cdot \frac{763 \text{ tubos}}{4 \text{ pasos por tubo}}} = 5.95 \frac{m}{s}$$

B.3. Relaciones utilizadas en el cálculo del reactor

Las relaciones utilizadas durante el cálculo de reactor se definen en las ecuaciones

$$V = \frac{\pi D^2 L}{4}, \text{ el volumen del lecho} \quad [47]$$

$$\rho_L = \frac{w}{V}, \text{ densidad aparente del lecho} \quad [48]$$

$$\varepsilon_L = \frac{V - \text{volumen de las partículas}}{V} = \frac{V - V \frac{\rho_L}{\rho_p}}{V} = 1 - \frac{\rho_L}{\rho_p} \quad [49]$$

Siendo ρ_p la densidad de la partícula, las relaciones entre las densidades son las siguientes.

$$\rho_L = \rho_p(1 - \varepsilon_L) = \rho_s(1 - \varepsilon_p)(1 - \varepsilon_L) \quad [50]$$

En un tubo cilíndrico se deben de cumplir las siguientes relaciones.

$$dA_t = \pi d_t dz \quad [51]$$

$$dW_t = \rho_L dV' = \rho_L \pi d_t^2 \frac{dz}{4} \quad [52]$$

B.4. Figuras utilizadas en el diseño del reactor

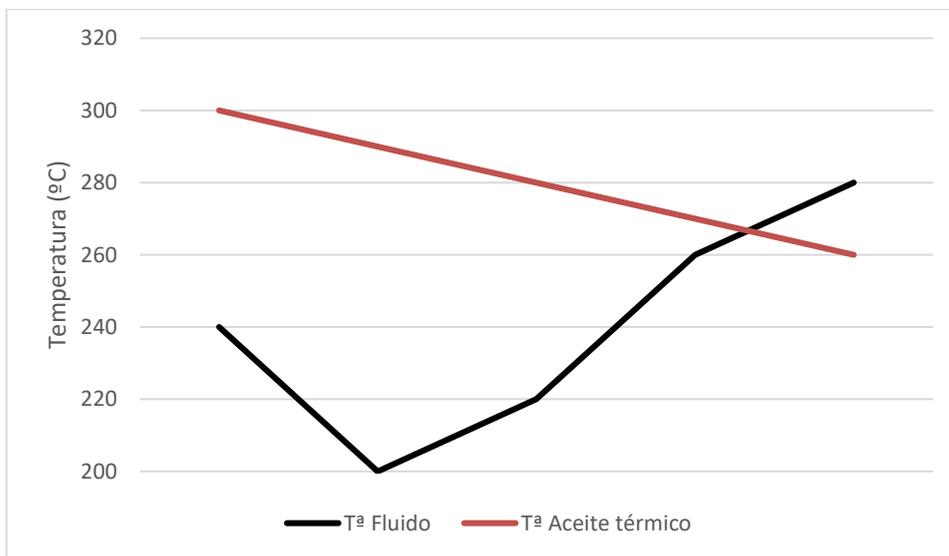


Figura I. B. 1 Perfil de temperaturas en el reactor, de negro la corriente interior a los tubos, en rojo el aceite térmico que calienta al reactor

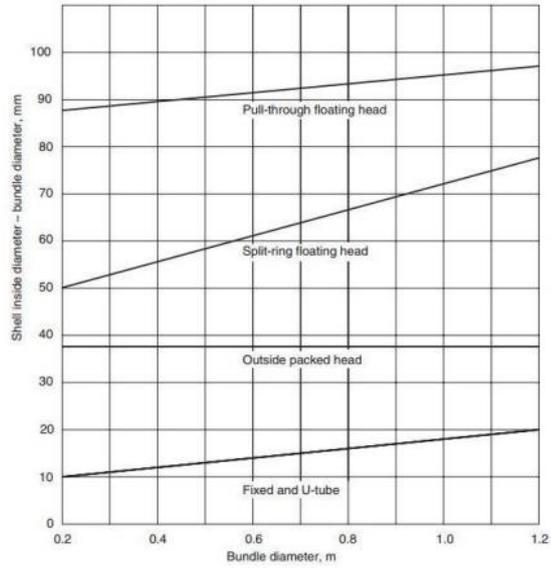


Figura I. B. 2 Diámetro de la carcasa según el tipo de carcasa y el diámetro de los tubos (Couper R., James y et al, 2004)

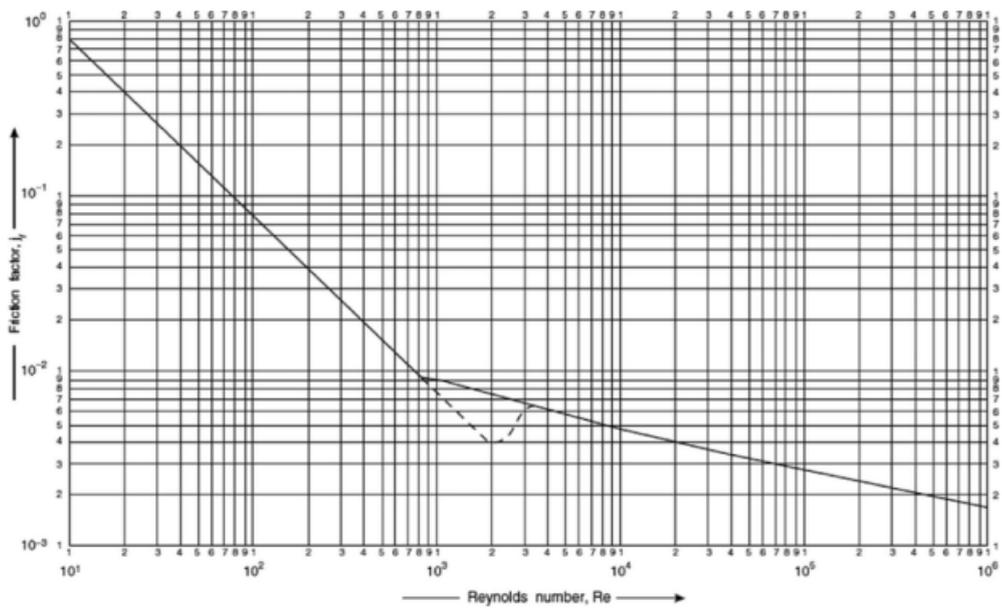


Figura I. B. 3 Factor de fricción del fluido que circula por los tubos, se calcula mediante el Reynolds (Couper R., James et al, 2004)

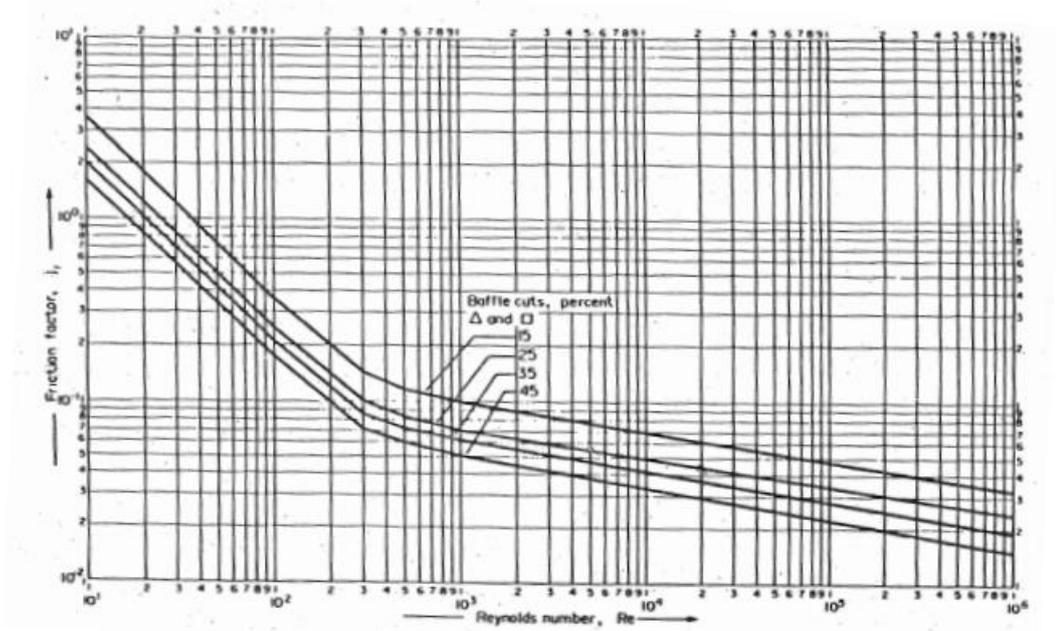


Figura I. B. 4. Factor de fricción del fluido que circula por la carcasa, se calcula mediante el Reynolds. (Couper R., James et al, 2004)

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID			
		ASME		INCH	MM	LBS/FOOT	KG/METER	INCH	MM		
1/8 6	10.3	10	105	0.049	1.24	0.19	0.28	0.307	7.82		
		STD 40	405	0.068	1.73	0.24	0.37	0.269	6.84		
		XS 80	805	0.095	2.41	0.31	0.47	0.215	5.48		
1/4 8	13.7	10	105	0.065	1.65	0.33	0.49	0.410	10.40		
		STD 40	405	0.088	2.24	0.43	0.63	0.364	9.22		
		XS 80	805	0.119	3.02	0.54	0.80	0.302	7.66		
3/8 10	17.1	10	105	0.065	1.65	0.42	0.63	0.545	13.80		
		STD 40	405	0.091	2.31	0.57	0.84	0.493	12.48		
		XS 80	805	0.126	3.20	0.74	1.10	0.423	10.70		
1/2 15	21.3	5	55	0.065	1.65	0.54	0.80	0.710	18.00		
		10	105	0.083	2.11	0.67	1.00	0.674	17.08		
		STD 40	405	0.109	2.77	0.85	1.27	0.622	15.76		
		XS 80	805	0.147	3.73	1.09	1.62	0.546	13.84		
		160	160	0.188	4.78	1.31	1.95	0.464	11.74		
3/4 20	26.7	5	55	0.065	1.65	0.69	1.03	0.920	23.40		
		10	105	0.083	2.11	0.86	1.28	0.884	22.48		
		STD 40	405	0.113	2.87	1.13	1.69	0.824	20.94		
		XS 80	805	0.154	3.91	1.48	2.20	0.742	18.88		
		160	160	0.219	5.56	1.95	2.90	0.612	15.58		
1 25	33.4	5	55	0.065	1.65	0.87	1.29	1.185	30.10		
		10	105	0.109	2.77	1.41	2.09	1.097	27.86		
		STD 40	405	0.133	3.38	1.68	2.50	1.049	26.64		
		XS 80	805	0.179	4.55	2.17	3.24	0.957	24.30		
		160	160	0.250	6.35	2.85	4.24	0.815	20.70		
1-1/4 32	42.2	5	55	0.065	1.65	1.11	1.65	1.530	38.90		
		10	105	0.109	2.77	1.81	2.69	1.442	36.64		
		STD 40	405	0.140	3.56	2.27	3.39	1.380	35.08		
		XS 80	805	0.191	4.85	3.00	4.47	1.278	32.50		
		160	160	0.250	6.35	3.77	5.61	1.160	29.50		
1-1/2 40	48.3	5	55	0.065	1.65	1.28	1.90	1.770	45.00		
		10	105	0.109	2.77	2.09	3.11	1.682	42.76		
		STD 40	405	0.145	3.68	2.72	4.05	1.610	40.94		
		XS 80	805	0.200	5.08	3.63	5.41	1.500	38.14		
		160	160	0.281	7.14	4.86	7.25	1.338	34.02		
1-1/2 40	48.3	5	55	0.065	1.65	1.28	1.90	1.770	45.00		
		10	105	0.109	2.77	2.09	3.11	1.682	42.76		
		STD 40	405	0.145	3.68	2.72	4.05	1.610	40.94		
		XS 80	805	0.200	5.08	3.63	5.41	1.500	38.14		
		160	160	0.281	7.14	4.86	7.25	1.338	34.02		
2 50	60.3	5	55	0.065	1.65	1.61	2.39	2.245	57.00		
		10	105	0.109	2.77	2.64	3.93	2.157	54.76		
		STD 40	405	0.154	3.91	3.66	5.44	2.067	52.48		
		XS 80	805	0.218	5.54	5.03	7.48	1.939	49.22		
		160	160	0.344	8.74	7.47	11.11	1.687	42.82		
2-1/2 65	73.0	5	55	0.083	2.11	2.48	3.69	2.709	68.78		
		10	105	0.120	3.05	3.53	5.26	2.635	66.90		
		STD 40	405	0.203	5.16	5.80	8.63	2.469	62.68		
		XS 80	805	0.276	7.01	7.67	11.41	2.323	58.98		
		160	160	0.375	9.53	10.02	14.92	2.125	53.94		
3 80	88.9	5	55	0.083	2.11	3.03	4.52	3.334	84.68		
		10	105	0.120	3.05	4.34	6.46	3.260	82.80		
		STD 40	405	0.216	5.49	7.58	11.29	3.068	77.92		
		XS 80	805	0.300	7.62	10.26	15.27	2.900	73.66		
		160	160	0.438	11.13	14.34	21.35	2.624	66.64		
3-1/2 90	101.6	5	55	0.083	2.11	3.48	5.18	3.834	97.38		
		10	105	0.120	3.05	4.98	7.41	3.760	95.50		
		STD 40	405	0.226	5.74	9.12	13.57	3.548	90.12		
		XS 80	805	0.318	8.08	12.52	18.64	3.364	85.44		
		160	160	0.636	16.15	22.87	34.03	2.728	69.30		
4 100	114.3	5	55	0.083	2.11	3.92	5.84	4.334	110.08		
		10	105	0.120	3.05	5.62	8.37	4.260	108.20		
		STD 40	405	0.156	3.96	7.24	10.78	4.188	106.38		
		XS 80	805	0.237	6.02	10.80	16.08	4.026	102.26		
		120	120	0.337	8.56	15.00	22.32	3.826	97.18		
		160	160	0.438	11.13	19.02	28.32	3.624	92.04		
		160	160	0.531	13.49	22.53	33.54	3.438	87.32		
		160	160	0.674	17.12	27.57	41.03	3.152	80.06		
		4-1/2 115	127.0	STD 40	405	0.247	6.27	12.55	18.67	4.506	114.46
		XS 80		805	0.355	9.02	17.63	26.24	4.290	108.96	
4-1/2 115	127.0	XX		0.710	18.03	32.56	48.45	3.580	90.94		

Figura I. B. 5 Dimensiones normalizadas para tuberías utilizadas en el diseño de la red de tuberías (Tioga, 2013)



TARIFA DE PRECIOS
I.V.A. no incl. Consulte posibles actualizaciones

BOMBAS CENTRÍFUGAS INOX AISI-316

Serie CO



Código	Modelo	Conexión		Caudal m³/h	Altura m.c.a.	Potencia CV	€
		Entrada	Salida				
<ul style="list-style-type: none"> • Impulsor abierto • Permite paso de pequeños sólidos • Paso de sólidos CO 350 11 mm, CO 500 de 20 mm 							
MONOFÁSICAS 1 × 230 V							
EB 20 322	COM 350/03	1 1/2"	1 1/4"	18-6	3-6,8	0,5	920,00
EB 20 324	COM 350/05			4-9,2	0,75	946,00	
EB 20 326	COM 350/07			21-6	5,8-11,2	1	982,00
EB 20 328	COM 350/09			5,9-12,7	1,2	991,00	
EB 20 330	COM 350/11			24-6	6,8-14,3	1,5	1.069,00
EB 20 331	COM 350/15			30-6	7,2-16,9	2	1.128,00
EB 20 333	COM 500/15	2"	1 1/2"	42-6	5,8-15	2	1.139,00
TRIFÁSICAS 3 × 230/400 V							
EB 20 302	CO 350/03	1 1/2"	1 1/4"	18-6	3-6,8	0,5	920,00
EB 20 304	CO 350/05			4-9,2	0,75	946,00	
EB 20 306	CO 350/07			21-6	5,8-11,2	1	1.059,00
EB 20 308	CO 350/09			5,9-12,7	1,2	1.069,00	
EB 20 310	CO 350/11			24-6	6,8-14,3	1,5	1.128,00
EB 20 311	CO 350/15			30-6	7,2-16,9	2	1.217,00
EB 20 313	CO 500/15	2"	1 1/2"	42-6	5,8-15	2	1.231,00
EB 20 315	CO 500/22			48-9	7,7-18,5	3	1.244,00
EB 20 318	CO 500/30			54,9	9-23,2	4	1.470,00

Hoja técnica: pág. 107

BOMBAS PERIFÉRICAS

Serie PM



Código	Modelo	Conexión		Caudal m³/h	Altura m.c.a.	Potencia CV	€
		Entrada	Salida				
<ul style="list-style-type: none"> • Bomba de reducidas dimensiones • Modelo Br cuerpo en bronce, para evitar oxidación y agarrotamiento 							
MONOFÁSICAS 1 × 230 V							
EB 10 140	PM-45 M	1"	1"	2,4-0,3	5-35	0,5	147,00
EB 10 145	PM-45M BR			2,4-0,3	5-35	0,5	303,00
EB 10 143	PM-80 M			3-0,3	18-61	1	203,00
TRIFÁSICAS 3 × 230/400 V							
EB 10 142	PM-45 T	1"	1"	2,4-0,3	5-35	0,5	147,00
EB 10 144	PM-80 T			3-0,3	18-61	1	203,00

Hoja técnica: pág. 108

Figura I. B. 6 Catálogo del modelo de bombas utilizadas, en específico el modelo superior de la imagen (Salvador Escoda, 2020)

Tabla I. B. 2 Coeficientes de fricción para los accesorios usados

Accesorio	e_v
Codo de 90°	0,75
Válvula de globo abierta	6,00

C. ITERACIÓN EN EXCEL

Se realiza la iteración del balance de energía.

Fluido en los tubos	
Gtubos	12.8819721
Cp	2000
$\bar{\mu}$	0.0000159
k	0.019

Figura I. C. 1. Resultados de los parámetros utilizados en la caracterización del fluido en los tubos

Aceite de la carcasa	
Gs	12.882
Cp	2490
$\bar{\mu}$	0.000
k	0.098
Deq	0.021

Figura I. C. 2 Resultados de los parámetros utilizados en la caracterización del fluido en la carcasa

Calculo Gtubos	
mt	0.54000
A paso total	0.04192
Nt	762.165
A paso1tubo	0.00044
Ntp	8.00000

Figura I. C. 3 Resultados de los parámetros utilizados en el cálculo del flujo másico de los tubos, término dependiente

Cálculo de U					
hint	68.70	hext	9.44	1/U	0.12
Reint	19120.41	Reext	599.10	hr	5000
Print	1.67	Prext	11.70	Rt	2500
Nuint	85.33	Nuext	2.90	kacero	17.00
Dint	0.02	Dext	0.03	U	8.23

Figura I. C. 4 Resultados de los parámetros del balance de energía

Resultados	
Área	1283.55
Ntubos	1944.770

Figura I. C. 5. Resultados finales del área y número de tubos total

D. GRÁFICAS PARA ESTIMACIÓN DE COSTES

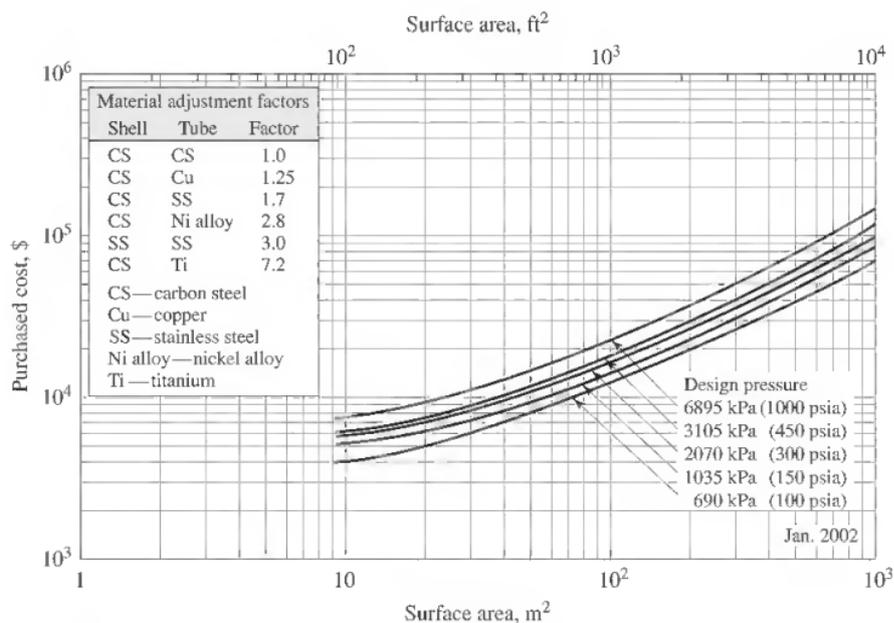


Figura I. D 1 Coste de un cambiador de calor de carcasa y tubos para distintos materiales y presiones que tiene las siguientes especificaciones: 4.88 m de longitud, 0.019m de diámetro y 690 kPa de presión interna. (Peters S. Max et al, 2003)

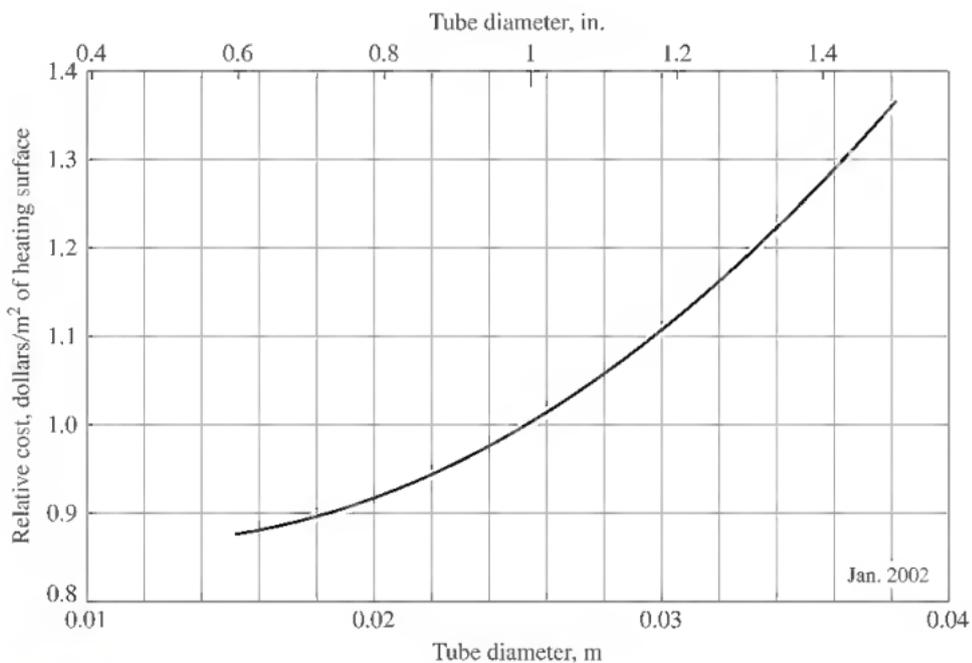


Figura I. D 2 Ajuste del diámetro del tubo para el coste del reactor. (Peters S. Max et al, 2003)

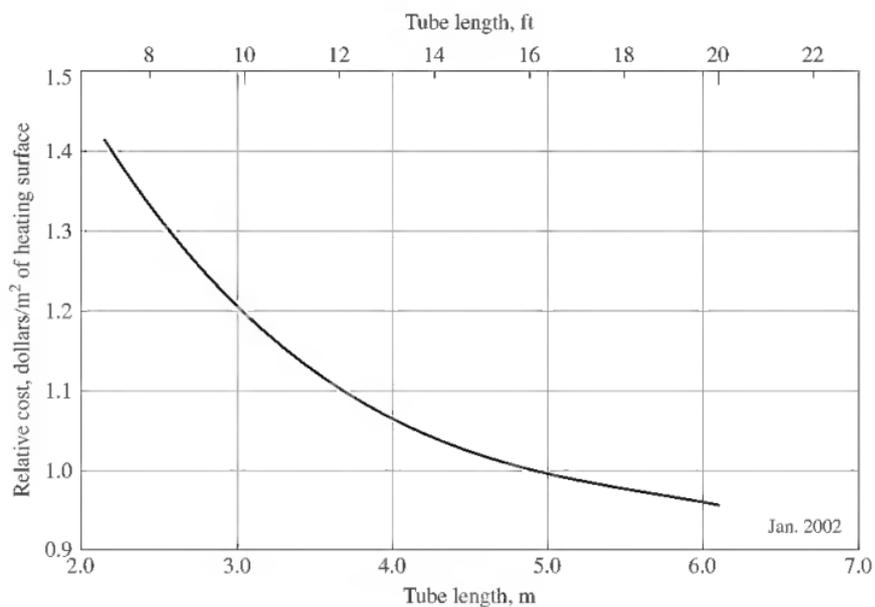


Figura I. D 3 Ajuste de la altura del tubo para el coste del reactor (Peters S. Max et al, 2003)

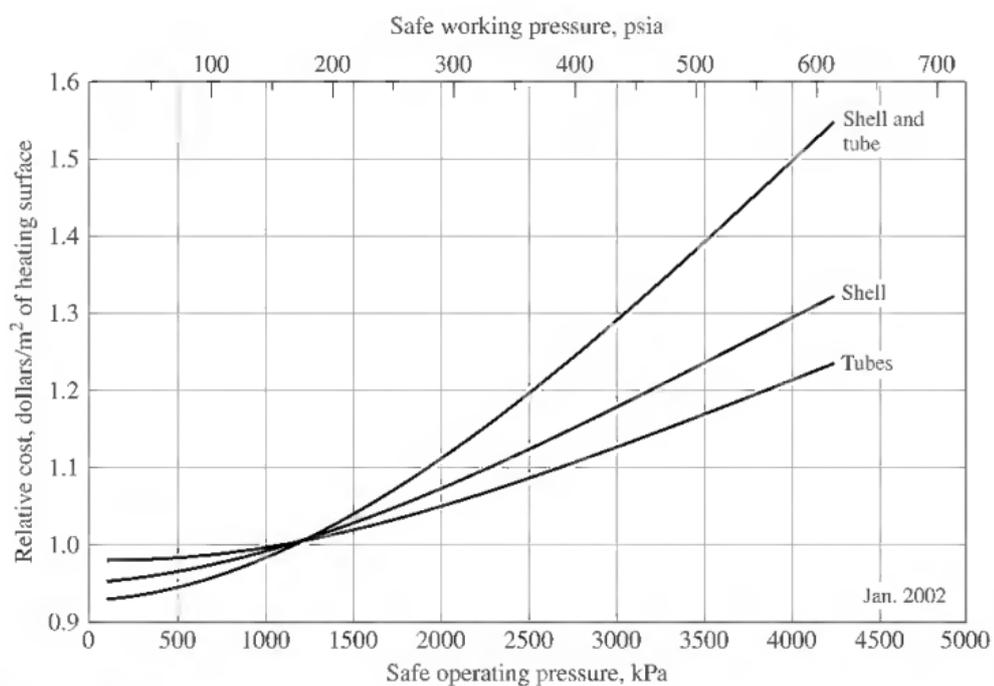


Figura I. D 4 Ajuste de la presión del sistema para el coste del reactor. (Peters S. Max et al, 2003)



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**SECCIÓN II: SEPARACIÓN Y
PURIFICACIÓN DEL BIOETANOL**

por

Aida González Rodríguez

Oviedo, Julio de 2024

INDICE

1. INTRODUCCIÓN	125
2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANDES DE MATERIA Y ENERGÍA	127
3. DISEÑO DE EQUIPOS	129
3.1. Compresor – Condensador - Separador	130
3.1.1. Compresor	132
3.1.2. Condensador	132
3.1.3. Separador	134
3.2. Columna de destilación	136
3.2.1. Alternativas descartadas para la destilación	149
4. ANÁLISIS DE COSTES	158
4.1. Compresor	159
4.2. Condensador	159
4.3. Separador	159
4.4. Columna de destilación	160
5. BIBLIOGRAFÍA	162
6. ANEXOS	164
A. Lista de símbolos	165
B. Simulación para la determinación de las condiciones de operación en el sistema Compresor – Condensador - Separador	169
C. Equilibrio para el sistema etanol - agua	180
D. Alternativas descartadas para la destilación	184
E. Gráficas para estimación de costes	199

INDICE DE TABLAS

Tabla II. 1. Balances de materia de la sección de separación	128
Tabla II. 2. Balances de energía de la sección de separación	128
Tabla II. 3. Resultados de la simulación para cada presión	131
Tabla II. 4. Balances de materia para el compresor y el condensador	131
Tabla II. 5. Balances de materia para el separador	131
Tabla II. 6. Potencia del compresor para cada caso	132
Tabla II. 7. Flujos de energía necesarios para el condensador	132
Tabla II. 8. Flujo refrigerante condensador	133
Tabla II. 9. Cálculo del área del condensador	133
Tabla II. 10. Resultados de los balances de materia para la columna de destilación	136
Tabla II. 11. Pendientes y composiciones para reflujo mínimo y condiciones de operación	138
Tabla II. 12. Resumen del cálculo de platos	140
Tabla II. 13. Resumen de los cálculos de la altura de la columna	140
Tabla II. 14. Resultados de las relaciones de reflujo mínima y óptima	141
Tabla II. 15. Flujos molares de vapor y condensado y líquido recirculado	141
Tabla II. 16. Flujos molares de líquido evaporado y vapor de retorno	141
Tabla II. 17. Constantes para la Ecuación [22]	142
Tabla II. 18. Condiciones de operación para el condensador	142
Tabla II. 19. Condiciones de operación para el calderín	142
Tabla II. 20. Propiedades de etanol y agua según temperatura	143
Tabla II. 21. Resultados para el cálculo del flujo volumétrico de vapor y su densidad	143
Tabla II. 22. Resultados para la estimación del diámetro de la columna	144
Tabla II. 23. Composiciones de la columna de destilación introducidas en Aspen Hysys	146
Tabla II. 24. Composiciones de la columna de destilación obtenidas con Aspen Hysys	146
Tabla II. 25. Cálculo del calor requerido en el condensador de la columna de la destilación	147
Tabla II. 26. Cálculo del flujo del fluido refrigerante para el condensador de la columna de destilación	148

Tabla II. 27. Cálculo del área del condensador de la columna de destilación	148
Tabla II. 28. Cálculo del calor requerido en el calderín de la columna de la destilación	149
Tabla II. 29. Cálculo del flujo del fluido calefactor para el calderín de la columna de destilación	149
Tabla II. 30. Cálculo del área del calderín de la columna de destilación	149
Tabla II. 31. Resultados de los balances de materia para $x_D = 0.87$	150
Tabla II. 32. Condiciones de operación del condensador y calderín para $x_D = 0.87$	150
Tabla II. 33. Resumen de resultados para una columna de destilación para $x_D = 0.87$	151
Tabla II. 34. Verificación de resultados según heurísticas para $x_D = 0.87$	151
Tabla II. 35. Resultados de los balances de materia para $x_D = 0.80$	151
Tabla II. 36. Condiciones de operación del condensador y calderín para $x_D = 0.80$	152
Tabla II. 37. Resumen de resultados para una columna de destilación para $x_D = 0.80$	152
Tabla II. 38. Verificación de resultados según heurísticas para $x_D = 0.80$	153
Tabla II. 39. Resultados de los balances de materia para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)	153
Tabla II. 41. Condiciones de operación del condensador y calderín para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)	154
Tabla II. 42. Resumen de resultados para una columna de destilación para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)	154
Tabla II. 43. Verificación de resultados según heurísticas para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)	155
Tabla II. 44. Resultados de los balances de materia para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)	155
Tabla II. 45. Condiciones de operación del condensador y calderín para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)	156
Tabla II. 46. Resumen de resultados para una columna de destilación para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)	156
Tabla II. 47. Verificación de resultados según heurísticas para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)	157
Tabla II. 48. Costes de la sección de separación actualizados	161

INDICE DE FIGURAS

Fig. II. 1. Diagrama de flujo de la sección de separación	128
Fig. II. 2. Esquema simulación Aspen HYSYS	130
Fig. II. 3. Esquema de "Knockout Drums" en disposición vertical	135
Fig. II. 4. Esquema de "Knockout Drums" en disposición horizontal	135
Fig. II. 5. Detalle del diagrama x-y con líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación	138
Fig. II. 6. Detalle de la estimación de los platos teóricos con ampliación al primer plato	139
Fig. II. 7. Estimación de los platos teóricos	139
Fig. II. 8. Diseño de la columna de destilación en Aspen Hysys	145
Fig. II. 9. Composición a lo largo de la columna	147
Fig. II. 10. Estimación de los platos teóricos para $x_D = 0.87$	150
Fig. II. 11. Estimación de los platos teóricos para $x_D = 0.80$	152
Fig. II. 12. Esquema de corrientes para dos columnas de destilación	153
Fig. II. 14. Estimación de los platos teóricos para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)	154
Fig. II. 15. Estimación de los platos teóricos para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)	156
Fig. II. 16. Separador seleccionado	159

1. INTRODUCCIÓN

La sección de separación de este trabajo parte de la corriente de salida del reactor, tras su paso por un intercambiador de calor (Bajo y Méndez, 2023), y cuenta en realidad con dos etapas diferenciadas.

En la primera, se trata de separar los productos de reacción, bioetileno, dietiléter y acetaldehído, de las sustancias sin reaccionar. Según se muestra en el diagrama de flujo de la Figura II.1, la corriente a tratar pasa por un compresor y un condensador, donde alcanza las condiciones de presión y temperatura deseadas, para posteriormente ser enviadas un separador tipo knockout drums, donde se separará el bioetileno y los subproductos de reacción no deseados del bioetanol y el agua. El destino de la corriente formada por producto y subproductos, una purificación del primero (Bajo y Méndez, 2023), no se aborda en este proyecto.

En una segunda separación, que consiste en una columna de rectificación, se obtiene bioetanol por cabezas y se elimina parte del agua por colas. Inicialmente se buscaba obtener las condiciones de alimentación del proceso para recircular esta corriente, pero dadas las complicaciones que supone la existencia del azeótropo etanol-agua a una composición inferior al objetivo, se ha optado por buscar otra salida para esta corriente. Se utilizará el etanol sobrante para la fabricación y posterior venta de gel hidroalcohólico, que tras la crisis sanitaria provocada por el COVID-19 se ha convertido en un producto de uso habitual en el día a día de muchas personas. Las especificaciones del gel hidroalcohólico indican que requiere una composición de etanol entre el 70 y el 90%, por lo que en este intervalo se encuentra el objetivo de la destilación.

2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

En la Fig. II. 1 se muestra el diagrama de flujo de la sección de separación, en la Tabla II. 1 se muestra el resumen de los balances de materia expresado por corrientes y en la Tabla II.2 un resumen de los balances de energía expresado por equipos.

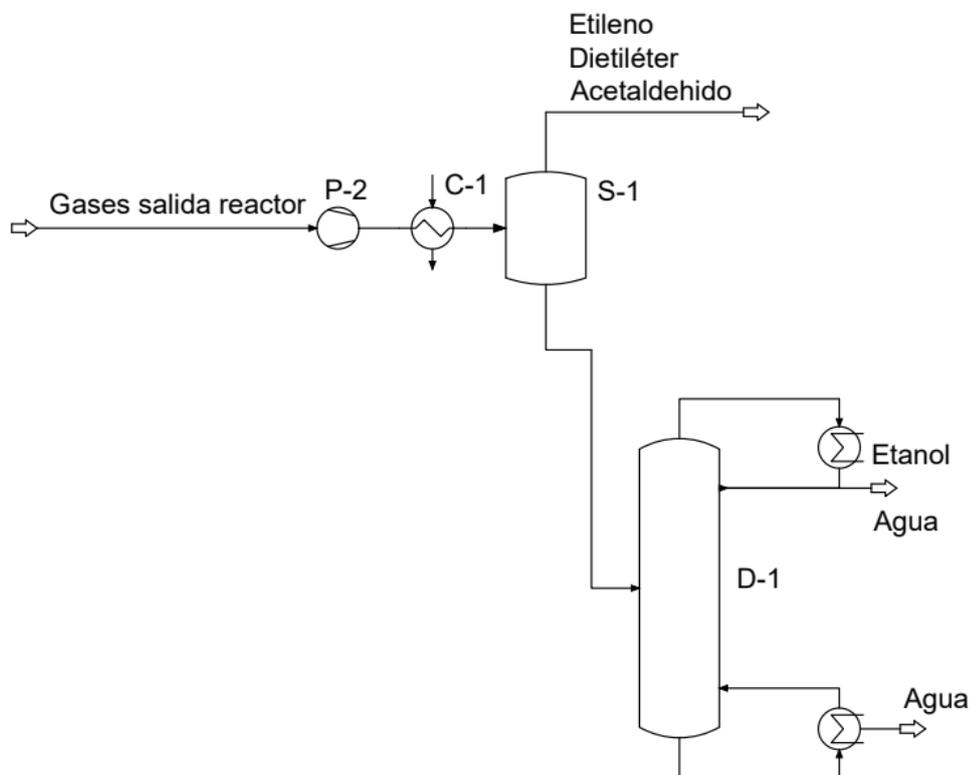


Fig. II. 1. Diagrama de flujo de la sección de separación

Tabla II. 1. Balances de materia de la sección de separación

	Entrada compresor (kmol/h)	Entrada condensador (kmol/h)	Entrada separador (kmol/h)	Salida Gas separador (kmol/h)	Entrada columna (kmol/h)	Destilado (kmol/h)	Residuo (kmol/h)
Agua	43.16	43.16	43.16	0.07	43.08	0.09	42.99
Etanol	0.26	0.26	0.26	0.02	0.24	0.20	0.04
Etileno	41.05	41.05	41.05	41.05	0.00	0.00	0.00
Dietiléter	0.16	0.16	0.16	0.16	0.00	0.00	0.00
Acetaldehído	0.13	0.13	0.13	0.13	0.00	0.00	0.00
Total	84.75	84.75	84.75	41.43	43.32	0.29	43.03

Tabla II. 2. Balances de energía de la sección de separación

Equipo	Potencia requerida (kW)
Compresor	175.1
Condensador	875.3
Condensador Columna	57.3
Calderín	820.9

3. DISEÑO DE EQUIPOS

3.1. COMPRESOR – CONDENSADOR – SEPARADOR

Para realizar el diseño de los equipos previos a la columna de destilación, sistema formado por un compresor, un condensador y un separador, se utilizará el programa de simulación Aspen HYSYS, con su herramienta Case Studies. Se seguirá el esquema indicado en la Fig. II. 2, por lo que en este apartado las corrientes se denominarán acordes a ella.

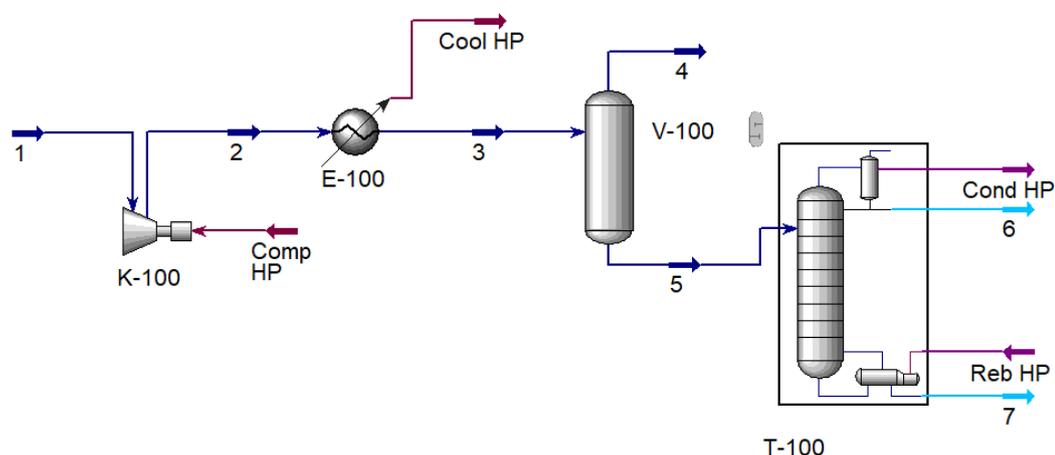


Fig. II. 2. Esquema simulación Aspen HYSYS

El objetivo de la simulación será encontrar las condiciones de operación óptimas para separar la mayor cantidad posible de sustancias sin reaccionar por la corriente **5**, la corriente líquida a la salida del separador, dejando suficientemente purificada la corriente de productos, corriente **4**, la salida gaseosa del separador.

Se estudian presiones entre 1.3 y 7 atm ya que se ve que a partir de las 8 atm el acetaldehído se ve arrastrado junto al etanol y el agua, indicando al programa que muestre tanto las composiciones de etanol y agua en la corriente **5**, como los flujos molares de dicha corriente para un barrido de temperaturas. La simulación y el proceso para llevarla a cabo se muestra en mayor detalle en el Anexo B. Simulación para la determinación de las condiciones de operación en el sistema Compresor – Condensador – Separador.

En la Tabla II. 3 se muestran las mejores condiciones para cada presión de salida del compresor. Se destacan además las combinaciones de presión a la salida del compresor y temperatura a la salida del condensador entre las que se decidirán posteriormente las condiciones óptimas basándose en cuestiones económicas debido a la similitud entre sus resultados.

Tabla II. 3. Resultados de la simulación para cada presión

P_2 (atm)	T_2 (°C)	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$\dot{5}_{etanol}$ (kmol/h)	$\dot{5}_{agua}$ (kmol/h)
1.3	0	0.0051	0.9949	0.22	42.95
2.0	0	0.0054	0.9946	0.23	43.03
3.0	0	0.0055	0.9945	0.24	43.07
4.0	0	0.0056	0.9944	0.24	43.09
5.0	5	0.0056	0.9944	0.24	43.08
6.0	10	0.0055	0.9945	0.24	43.07
	5	0.0056	0.9944	0.24	43.09
7.0	10	0.0055	0.9945	0.24	43.08
	5	0.0056	0.9944	0.24	43.10

De acuerdo a las conclusiones obtenidas en los apartados 3.1.1. Compresor y 3.1.2. Condensador, el compresor seleccionado irá de 1.3 a 5 atm y el condensador de 322 a 5 °C.

Se incluyen los balances de materia para el compresor y el condensador, en la Tabla II. 4, y para el separador, en la Tabla II. 5, todos ellos obtenidos mediante Aspen HYSYS.

Tabla II. 4. Balances de materia para el compresor y el condensador

	Corriente 1 (kmol/h)	Corriente 2 (kmol/h)	Corriente 3 (kmol/h)
Agua	43.16	43.16	43.16
Etanol	0.26	0.26	0.26
Etileno	41.05	41.05	41.05
Dietiléter	0.16	0.16	0.16
Acetaldehído	0.13	0.13	0.13
Total	84.75	84.75	84.75

Tabla II. 5. Balances de materia para el separador

	Corriente 3 (kmol/h)	Corriente 4 (kmol/h)	Corriente 5 (kmol/h)
Agua	43.16	0.07	43.08
Etanol	0.26	0.02	0.24
Etileno	41.05	41.05	0.00
Dietiléter	0.16	0.16	0.00
Acetaldehído	0.13	0.13	0.00
Total	84.75	41.43	43.32

3.1.1. Compresor

Para realizar el diseño del compresor y seleccionar sus condiciones de operación se acude a la simulación en Aspen Hysys detallada en el Anexo B. Simulación para la determinación de las condiciones de operación en el sistema Compresor – Condensador – Separador. Se presentan en la Tabla II. 6 las potencias obtenidas en cada alternativa, resaltando la opción seleccionada.

Tabla II. 6. Potencia del compresor para cada caso

$P_1 \rightarrow P_2$ (atm)	Potencia (kW)
1.3 → 5.0	175.1
1.3 → 6.0	201.9
1.3 → 7.0	225.3

Siguiendo un criterio económico, se selecciona el compresor que menor potencia requiere. Teniendo en cuenta que se estudian a igual flujo, comprimir a menor presión de descarga implicará un menor coste.

3.1.2. Condensador

Para realizar el diseño del condensador, el primer paso es realizar su balance de energía y seleccionar sus condiciones de operación, para ello se acude al Anexo B. Simulación para la determinación de las condiciones de operación en el sistema Compresor – Condensador – Separador; aunque en este punto en la memoria ya se ha seleccionado el compresor y para ese caso únicamente había una opción de condensador, el estudio se realizó al mismo tiempo para el compresor y el condensador, por lo que se estudian todos los casos resaltados en la Tabla II. 3. Se presentan en la Tabla II. 7 los flujos de calor requeridos para cada alternativa, resaltando la opción seleccionada.

Tabla II. 7. Flujos de energía necesarios para el condensador

P_2 (atm)	$T_1 \rightarrow T_2$ (°C)	Q_{Cond} (kW)
5.0	322.0 → 5.0	875.3
6.0	343.5 → 5.0	902.8
7.0	361.9 → 10.0	919.7
	361.9 → 5.0	926.9

Siguiendo un criterio económico, se selecciona el condensador que menor flujo de calor requiere. Teniendo en cuenta que se estudian a igual flujo de entrada, enfriar menos implicará una menor superficie en el cambiador de calor y un menor coste.

Se diseñará únicamente el condensador seleccionado, partiendo del flujo de calor obtenido mediante Aspen HYSYS, 875.3 kW y se calculará el área del mismo.

En primer lugar, se debe seleccionar el fluido refrigerante, para ello se acude a la bibliografía, concretamente a la heurística 7 para intercambiadores de calor (Walas, 1988), se decide utilizar agua ya que en dicha heurística se incluyen las temperaturas máximas de entrada y salida del intercambiador para este fluido, 32 y 49 °C respectivamente.

En segundo lugar, se debe estimar el flujo de este fluido refrigerante, para ello se utiliza la Ecuación [1], en la que el segundo término, $m \cdot \lambda$, se anula porque el agua no cambia de fase. Los resultados se muestran en la Tabla II. 8.

$$Q = mC_p(T_{out} - T_{in}) + m \cdot \lambda \quad [1]$$

Tabla II. 8. Flujo refrigerante condensador

Q_{Cond} (kJ/s)	$T_{agua\ in}$ (°C)	$T_{agua\ out}$ (°C)	C_p (kJ/kg K)	m_{agua} (kg/s)
875.3	32	49	4.18	12.3

En tercer y último lugar, se calcula el área del condensador utilizando la Ecuación [2], en este caso se acude a la heurística 8 para cambiadores de calor de la bibliografía (Walas, 1988), en la que se indica un valor de coeficiente global de transmisión de calor, U, de 851 W/m²°C para condensadores. Se requiere además la Ecuación [3] para la temperatura media logarítmica. En la Tabla II. 9 se muestran los resultados del área del condensador.

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{lm} \quad [2]$$

$$\Delta T_{lm} = \frac{(T_{h,i} - T_{c,i}) - (T_{h,o} - T_{c,o})}{\ln \frac{(T_{h,i} - T_{c,i})}{(T_{h,o} - T_{c,o})}} \quad [3]$$

Tabla II. 9. Cálculo del área del condensador

Q_{Cond} (kW)	U (W/m ² °C)	ΔT_{lm} (°C)	A (m ²)
875.3	851	247.4	4.16

3.1.3. Separador

Para esta operación la bibliografía (Peters et al, 2003) indica que se pueden utilizar distintos equipos, tales como ciclones, venturis, torres de spray y “Knockout Drums”.

Como separador se decide optar por un “Knockout Drums” (también conocidos como “Knockout Pots”, “Separadores de Gotas” o sedimentadores), ya que son eficaces para trabajar con grandes volúmenes de líquido y vapor, cuentan con un diseño simple y robusto y tienen bajos costes de operación y mantenimiento. Su funcionamiento se basa en reducir la velocidad del gas o vapor que entra al recipiente, permitiendo que las gotas de líquido más pesadas se separen y caigan al fondo del recipiente debido a la gravedad. Pueden tener deflectores internos o mallas de separación para mejorar la eficiencia de la separación por el impacto de las gotas en los obstáculos.

En cuanto a las posibles disposiciones, se barajan dos opciones, equipo vertical con boquilla de entrada radial, boquilla de salida vertical y deflectores internos y equipo horizontal donde la entrada se produce por un lateral y la salida por el extremo opuesto, esta opción no tendría deflectores internos. En la opción vertical el agua se acumula en el fondo mientras el gas fluye hacia el cabezal; mientras que en la horizontal el gas entra por un extremo y sale por el otro y el líquido se acumula en el fondo siendo evacuado mediante un simple desagüe (*Multitex Group, 2022*).

Se selecciona la disposición horizontal por ser un diseño más simple y por ello más barato, aunque se presentan en las Fig. II. 3 y Fig. II. 4 un esquema de la disposición vertical y uno de la disposición horizontal respectivamente (*HC Petroleum Equipment, 2019*).

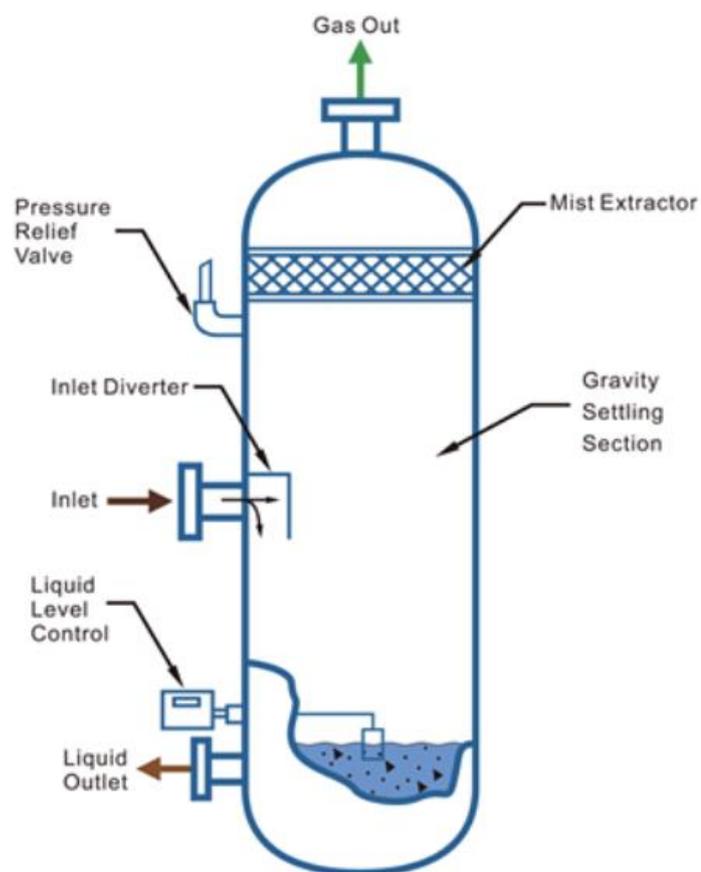


Fig. II. 3. Esquema de “Knockout Drums” en disposición vertical (*HC Petroleum Equipment, 2019*)

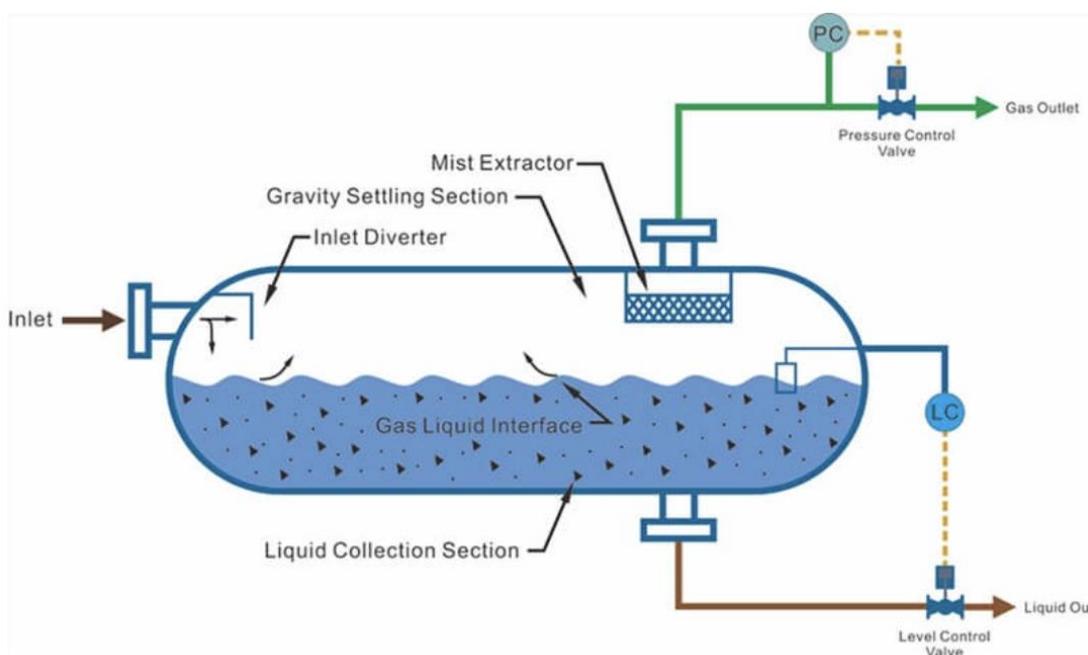


Fig. II. 4. Esquema de “Knockout Drums” en disposición horizontal (*HC Petroleum Equipment, 2019*)

3.2. COLUMNA DE DESTILACIÓN

Hay dos balances de materia básicos en una columna de destilación, ambos necesarios para su diseño. El primero, en la Ecuación [4], se trata de un balance de materia global total, que relaciona los flujos molares de la corriente de entrada, alimentación, y las de salida, tanto destilado como residuo.

$$F = D + W \quad [4]$$

El segundo, en la Ecuación [5], es un balance de materia que se puede hacer a cada componente (se requieren tantos balances como n-1 componentes), realizado en este caso al componente más volátil. De igual forma que el balance de materia global total relaciona la corriente de entrada con las de salida, pero en este caso teniendo en cuenta la composición del componente más volátil, y de interés, en este caso el etanol, en cada una de las corrientes.

$$F \cdot x_F = D \cdot x_D + W \cdot x_W \quad [5]$$

Con el flujo y la composición de la corriente de alimentación conocidos y con las composiciones de ambas salidas fijadas, ambos balances de materia se pueden resolver con un sistema de dos ecuaciones y dos incógnitas, obteniéndose los resultados que figuran en la Tabla II. 10.

Tabla II. 10. Resultados de los balances de materia para la columna de destilación

F (kmol/h)	x_F	D (kmol/h)	x_D	W (kmol/h)	x_W
43.32	0.0056	0.29	0.7000	43.03	0.0010

Para el diseño de la columna de destilación se va a utilizar el método de McCabe-Thiele, a través del cual se calcularán los platos necesarios basándose en una representación gráfica de las etapas sobre un diagrama que enfrenta las fracciones molares del componente más volátil en la fase líquida con las propias en la fase vapor.

En primer lugar, es necesario contar con datos de equilibrio para el sistema a estudiar en la presión a la que se va a trabajar. Se han encontrado datos bibliográficos T-x,y para el sistema etanol-agua a 4.08 atm y a 6.12 atm, por lo que se deben interpolar dichos datos para diseñar una columna que trabaje a 5 atm. Tanto los datos bibliográficos como los interpolados se incluyen en el Anexo C. Equilibrio para el sistema etanol-agua, todos ellos junto a sus representaciones gráficas correspondientes.

La alimentación viene en forma de líquido saturado, ya que se encuentra en fase líquida y a temperatura de ebullición. Las composiciones en el equilibrio entre fases a la presión y temperatura de la alimentación, se determinan directamente en el diagrama x-y con una línea vertical en la composición de alimentación.

En segundo lugar, se procederá a estimar el número de platos necesarios en la columna, para ello se requiere dibujar el diagrama x-y partiendo de los datos interpolados para el sistema etanol-agua a una presión de 5 atm incluidos en el Anexo C. Equilibrio para el sistema etanol-agua. Dicho diagrama se muestra en el mismo Anexo, junto con la Fig. II. C. 5, la utilizada realmente, que está dividida en dos sectores a modo de ajuste.

De esta forma, para obtener la composición en fase vapor correspondiente a una composición en fase líquida menor a 0.44 se utiliza la Ecuación [6] y para composiciones mayores la Ecuación [7].

$$y = -80.642x^4 + 90.41x^3 - 36.22x^2 + 6.6217x + 0.014 \quad [6]$$

$$y = 0.4992x^2 - 0.0065x + 0.5038 \quad [7]$$

El siguiente paso será calcular la pendiente de la línea de operación, para lo que habrá que estudiar previamente las condiciones de reflujo mínimo, que serán las dadas por la línea que partiendo del punto (x_D, x_D) corta a la línea de equilibrio en (x_{eq}, y_{eq}) marcado por las condiciones de alimentación, que son las de líquido saturado o la tangente a la línea de equilibrio si es necesario. A composición conocida en el destilado se pueden calcular las composiciones en el equilibrio, siendo la misma la de la fase líquida, y con la Ecuación [8] calcular la relación de reflujo mínimo. Con la relación de reflujo mínimo y la Ecuación [9] se puede calcular la pendiente de la línea de operación. Ya que el procedimiento es el mismo para todos los casos, el estudio se detallará fijando como objetivo $x_D = 0.7$.

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min} = \frac{x_D - y_{eq}}{x_D - x_{eq}} \quad [8]$$

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{op} = 1.05 \left(\frac{L}{V}\right)_{\min} \quad [9]$$

Una vez obtenida la pendiente de la línea de operación y sabiendo que, gráficamente, al comenzar a trazar dicha línea en el punto (x_D, x_D) , ésta corta a la línea de alimentación en el punto correspondiente a las composiciones de trabajo (x_{op}, y_{op}) . Además, con la Ecuación [10] se pueden calcular las composiciones ya que la composición en fase líquida es conocida, la de equilibrio. Los resultados tanto de las pendientes como de las composiciones para reflujo mínimo y para las condiciones de operación se muestran a continuación en la Tabla II.11.

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{op} = \frac{x_D - y_{op}}{x_D - x_{op}} \quad [10]$$

Tabla II. 11. Pendientes y composiciones para reflujo mínimo y condiciones de operación

x_{eq}	y_{eq}	$\left(\frac{L}{V}\right)_{min}$	$\left(\frac{L}{V}\right)_{op}$	x_{op}	y_{op}
0.0056	0.0500	0.9361	0.9829	0.0056	0.0175

En este punto ya se pueden incluir en la representación gráfica la línea de enriquecimiento, que une los puntos (x_D, x_D) y (x_{op}, y_{op}) , la línea de agotamiento que une los puntos (x_W, x_W) y (x_{op}, y_{op}) y la ya mencionada línea de alimentación. Se incluye en la Fig. II. 5 un detalle de estas líneas con sus correspondientes ecuaciones, ya que una vez dibujados los platos apenas serán visibles. Como la concentración de la alimentación es tan baja, el plato de alimentación es el calderín.

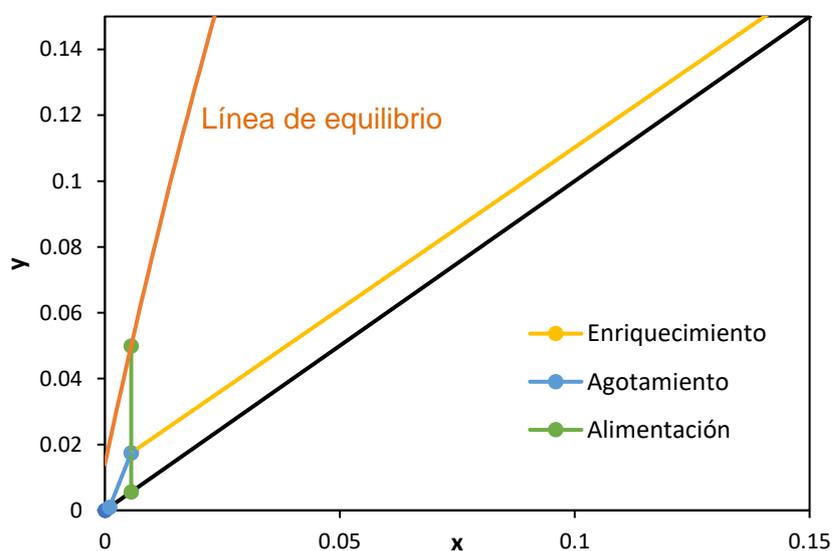


Fig. II. 5. Detalle del diagrama x-y con líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación

En este punto, con ambas rectas ya dibujadas, se pueden estimar los platos teóricos. Para esto se dibujan escalones desde (x_W, x_W) hasta (x_D, x_D) . El procedimiento habitual sería, conocido el punto de partida, calcular la "y" manteniendo constante la "x" anterior, x_W inicialmente. La correspondiente "y" se calcula sustituyendo la "x" fijada en la ecuación de la curva de equilibrio, en este caso, de la forma explicada anteriormente, ya que está dividida en dos ecuaciones. A continuación, se debe fijar la "y" y utilizarla para calcular la "x" correspondiente con la ecuación de la línea de agotamiento, Ecuación [11]. Se repetiría este procedimiento hasta superar la línea de alimentación, momento en el que para calcular las "x" se pasaría a utilizar la ecuación de la línea de enriquecimiento, Ecuación [12].

$$y = 3.5773x - 0.0026 \quad [11]$$

$$y = 0.9829x + 0.012 \quad [12]$$

Como se muestra en la Fig. II. 6, para el caso estudiado la primera “y” calculada se corresponde con un valor de “x” superior al límite de la línea de agotamiento (0.0056), por lo que todos los platos se hacen calculando las “x” con la ecuación correspondiente a la línea de enriquecimiento. Por último, en la Fig. II. 7 se muestran los 6 platos teóricos estimados con el método de McCabe-Thiele.

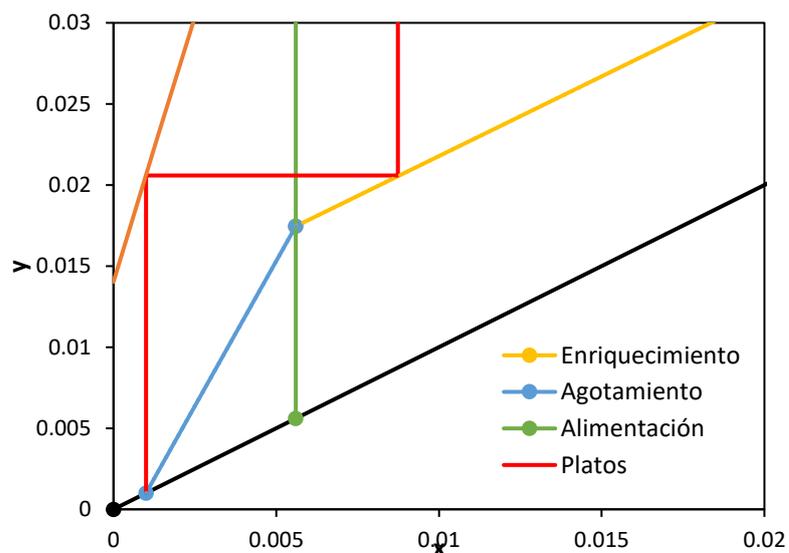


Fig. II. 6. Detalle de la estimación de los platos teóricos con ampliación al primer plato

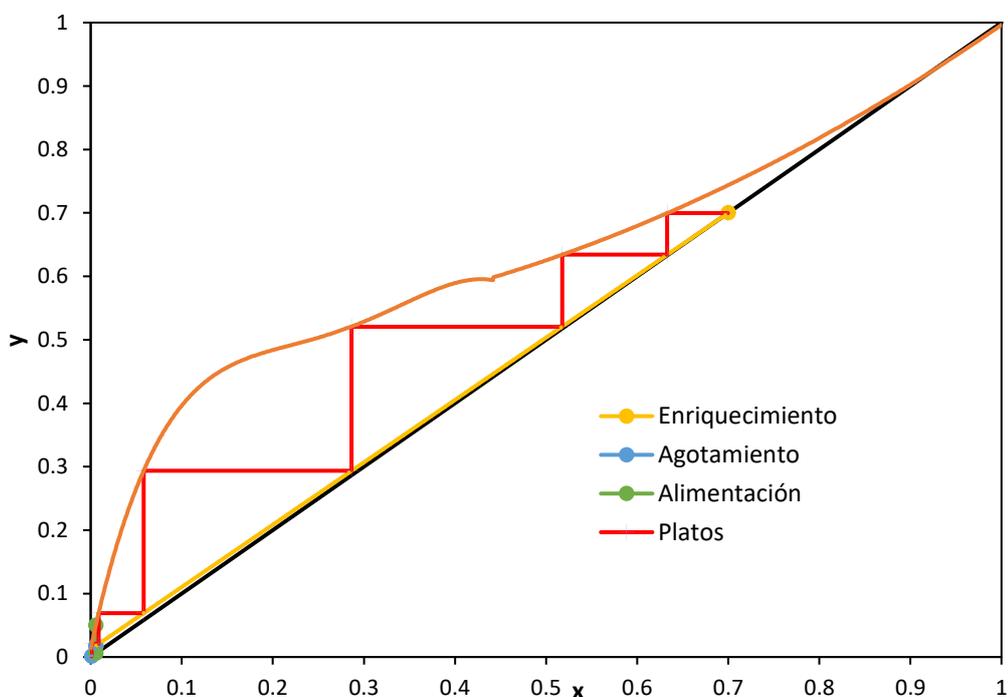


Fig. II. 7. Estimación de los platos teóricos

Una vez obtenidos los platos teóricos se calculan los platos reales teniendo en cuenta la eficacia de plato según la heurística 17 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988). Se toma una eficacia del 75%, valor intermedio de los indicados en dicha heurística, y considerando al calderín como un plato ideal, se utiliza la Ecuación [13] para realizar el cálculo. En la Tabla II. 12 se muestra un resumen de los platos calculados, incluyendo de nuevo el calderín.

$$\text{Platos reales} = \frac{(\text{Platos teóricos} - 1)}{0.75} \quad [13]$$

Tabla II. 12. Resumen del cálculo de platos

Platos teóricos	Platos reales
6	7+1

Siguiendo con el diseño de la columna de destilación, será necesario determinar la altura de esta; para ello se debe calcular primero el número de espacios entre los platos, que se hará con la Ecuación [14] y posteriormente acudir a la Ecuación [15]. De nuevo se acudirá a la bibliografía para el espaciado de platos, según la heurística 13 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), se toma 0.635 m, valor intermedio del intervalo indicado en dicha heurística. En la Tabla II. 13 se presentan los resultados de los cálculos para la altura de la columna.

$$\text{N}^{\circ} \text{ espacios} = \text{Platos reales} - 1 \quad [14]$$

$$L_C = \text{N}^{\circ} \text{ espacios} \cdot \text{Espaciado} \quad [15]$$

Tabla II. 13. Resumen de los cálculos de la altura de la columna

Nº espacios	Espaciado (m)	L_C (m)
6	0.635	3.81

También se pueden determinar otros parámetros como las relaciones de reflujo mínima y óptima y los flujos molares de vapor condensado y líquido recirculado. Para calcular la relación de reflujo mínima se utiliza la Ecuación [16] y, con ella, se acude a la Ecuación [17] para obtener la relación de reflujo óptima. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla II. 14.

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min} = \frac{R_{\min}}{R_{\min} + 1} \quad [16]$$

$$R_{\text{opt}} = 1.05 R_{\min} \quad [17]$$

Tabla II. 14. Resultados de las relaciones de reflujo mínima y óptima

$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min}$	R_{\min}	R_{opt}
0.9361	14.65	15.39

Se realiza un balance de materia global total al condensador con la Ecuación [18] y la Ecuación [19], se determinan los flujos molares de vapor condensado y de líquido recirculado, cuyos resultados se presentan en la Tabla II. 15.

$$V = L + D \quad [18]$$

$$R_{\text{opt}} = \frac{L}{D} \quad [19]$$

Tabla II. 15. Flujos molares de vapor y condensado y líquido recirculado

L (kmol/h)	V (kmol/h)
4.39	4.67

De igual forma se realiza un balance de materia global total al calderín, Ecuación [20], y con ayuda de la pendiente de la línea de agotamiento, Ecuación [21], se obtienen los flujos molares de líquido a evaporar y de vapor de retorno a la columna. Los resultados de estos cálculos se presentan en la Tabla II. 16.

$$L' = V' + W \quad [20]$$

$$\frac{L'}{V'} = \frac{y_{\text{op}} - x_w}{x_{\text{op}} - x_w} \quad [21]$$

Tabla II. 16. Flujos molares de líquido evaporado y vapor de retorno

$\frac{L'}{V'}$	L' (kmol/h)	V' (kmol/h)
3.5773	59.73	16.70

Se calculan también las condiciones de operación dentro de la columna, para ello se usan la Ecuación [22] y las constantes mostradas en la Tabla II. 17, ambas obtenidas de la bibliografía (Perry and Green, 1985).

$$P_V^0 = \exp \left[C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 \ln T + C_4 T^{C_5} \right] \quad [22]$$

Tabla II. 17. Constantes para la Ecuación [22] (Perry and Green)

	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
Etanol	74.475	-7164.3	-7.3270	$3.134 \cdot 10^{-06}$	2
Agua	73.649	-7258.2	-7.3037	$4.1653 \cdot 10^{-06}$	2

Se comienza el cálculo por cabezas, para ello se tantea la temperatura a presión total del condensador conocida, en este caso 5 atm, ya que es la presión a la que vienen definidos los datos de equilibrio (506.6 kPa). Para fijar esta condición se utiliza la Ecuación [23], donde las presiones parciales se calculan mediante la ecuación y las constantes obtenidas previamente de la bibliografía. Los resultados del tanteo para las condiciones de operación del condensador se muestran en la Tabla II. 18.

$$P_D = P_{S,Etanol} \cdot x_{DEtanol} + P_{S,Agua} \cdot x_{DAgua} \quad [23]$$

Tabla II. 18. Condiciones de operación para el condensador

$x_{DEtanol}$	x_{DAgua}	$P_{S,Etanol}$ (kPa)	$P_{S,Agua}$ (kPa)	T (K)
0.7000	0.3000	601.8	284.6	405

Se calculan las condiciones de operación en el calderín, siguiendo el mismo procedimiento que para el condensador, pero será necesario estimar la presión total previamente, teniendo en cuenta que según la heurística 16 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), la diferencia de presión por plato es de 0.1 Pa se puede estimar la diferencia de presión en la columna. La presión total en el calderín se calcula mediante la Ecuación [24].

$$P_W = P_D + \Delta P_{columna} = 0.1 \cdot \text{Platos reales} \quad [24]$$

Se utilizan de nuevo la Ecuación [22] y la Ecuación [23] sustituyendo en este caso los subíndices "D" por "W". Los resultados obtenidos para el tanteo de las condiciones de operación del calderín se muestran en la Tabla II. 19.

Tabla II. 19. Condiciones de operación para el calderín

P_W (kPa)	$x_{WEtanol}$	x_{WAgua}	$P_{S,Etanol}$ (kPa)	$P_{S,Agua}$ (kPa)	T (K)
511.4	0.0010	0.9990	1047.9	510.9	426

Para calcular el diámetro de la columna se toman como constantes las condiciones de cabezas. Se partirá del cálculo del volumen específico de la mezcla, cuya composición es 70% etanol y 30% agua para una temperatura de trabajo en cabezas, calculada previamente, de 405 K. Será necesario ayudarse de la bibliografía (Perry and Green, 1985) con las propiedades del etanol y el agua saturadas para diferentes temperaturas, las que resultan de interés para el caso a estudio se muestran a continuación en la Tabla II. 20 junto con las interpoladas para la temperatura de interés.

Tabla II. 20. Propiedades de etanol y agua según temperatura

T (K)	V_{gEtanol} (m³/kg)	V_{gAgua} (m³/kg)
400	0.1398	0.7310
410	0.1058	0.5530
405	0.1230	0.6428

Para calcular el volumen específico de la mezcla se utiliza la Ecuación [25], de igual manera con la Ecuación [26] se calcula el peso molecular de la mezcla y, con ambas, el flujo molar de vapor calculado previamente y la Ecuación [27] se obtiene el caudal de vapor. Será necesario pasar el caudal de vapor a unidades inglesas para utilizarlo en la Ecuación [28] y calcular la densidad del vapor. Los resultados de estos cálculos se presentan en la Tabla II. 21.

$$V_g = V_{gEtanol} \cdot x_{DEtanol} + V_{gAgua} \cdot x_{DAgua} \quad [25]$$

$$PM = PM_{Etanol} \cdot x_{Etanol} + PM_{Agua} \cdot x_{Agua} \quad [26]$$

$$Q_g = V_g \cdot PM \cdot V \quad [27]$$

$$\rho_v = \frac{1}{V_g} \quad [28]$$

Tabla II. 21. Resultados para el cálculo del flujo volumétrico de vapor y su densidad

T (K)	V_g (m³/kg)	PM (kg/kmol)	Q_g (m³/h)	Q_g (m³/s)	ρ_v (kg/m³)
405	0.2789	37.65	49.1	0.0136	3.59

Ya con la densidad de vapor en unidades inglesas, se acude a la heurística 14 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), en la que se indica la Ecuación [29] que se puede utilizar para obtener la velocidad. Dicha heurística recomienda un valor de factor de vapor entre 1.2 y $1.5 \frac{m}{s} \sqrt{\frac{kg}{m^3}}$, por lo que se tomará el valor medio, $1.3 (m/s) \sqrt{kg/m^3}$. Se indica además que, para presiones moderadas la velocidad debe estar en torno a 2 ft/s; mientras que para vacío debe estar en torno a 1.83 m/s. El caso a estudio a 5 atm está más próximo a presión moderada que a vacío por lo que la velocidad esperada estará más próxima a 0.61 m/s.

$$F_s = u \cdot \sqrt{\rho_V} \quad [29]$$

Conocida la velocidad se pueden utilizar la Ecuación [30] y la Ecuación [31] respectivamente para estimar el área de la columna de destilación y el diámetro que requerirá la misma. Los resultados para la estimación del diámetro de la columna se muestran en la Tabla II. 22, ya con unidades en el Sistema Internacional.

$$A = \frac{Q_g}{u} \quad [30]$$

$$D_c = \sqrt{\frac{4A}{\pi}} \quad [31]$$

Tabla II. 22. Resultados para la estimación del diámetro de la columna

F_s (ft/s) $\sqrt{lb/ft^3}$	u (m/s)	A (m ²)	D_c (m)
1.1	0.71	0.02	0.16

Se acude de nuevo a la bibliografía en busca de la heurística 30 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), en la que se indica que para columnas de diámetros de 3 ft es necesario añadir 4 ft a la altura en la parte superior y 10 ft en la parte inferior. En este caso el diámetro es de 0.51 ft, por lo que este ajuste no será necesario.

Por último, se revisa en la bibliografía la heurística 31 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), que fija como altura máxima por seguridad 175 ft, en este caso sería de 12.5 ft por lo que no habría problema. Además, indica que la Ecuación [32] debe cumplirse y en este caso se obtiene 24.35 por lo que el diseño de la columna de destilación es válido.

$$\frac{L_c}{D_c} < 30 \quad [32]$$

Se incluye a continuación la simulación correspondiente a esta columna de destilación utilizando Aspen Hysys, para ella se sigue el esquema mostrado anteriormente en la Fig. II. 2, por lo que en este punto la nomenclatura de las corrientes será la indicada en ella.

En primer lugar se deberán nombrar las corrientes como se muestra en la Fig. II. 8 y se indicarán las condiciones de operación obtenidas en cálculos previos, de forma que la presión será de 506.6 kPa en el condensador y de 511.5 kPa en el calderín, el condensador se toma como total ya que se ha utilizado uno ideal en cálculos previos y la columna consta de 6 platos porque, pese a obtenerse 7 teóricos, se debe tener en cuenta que uno de ellos corresponde al calderín. Se debe indicar también en qué plato se introduce la alimentación a la columna, en este caso entra por el último plato como se puede ver en el diagrama que sigue el método de McCabe previamente presentado (Fig. II. 7).

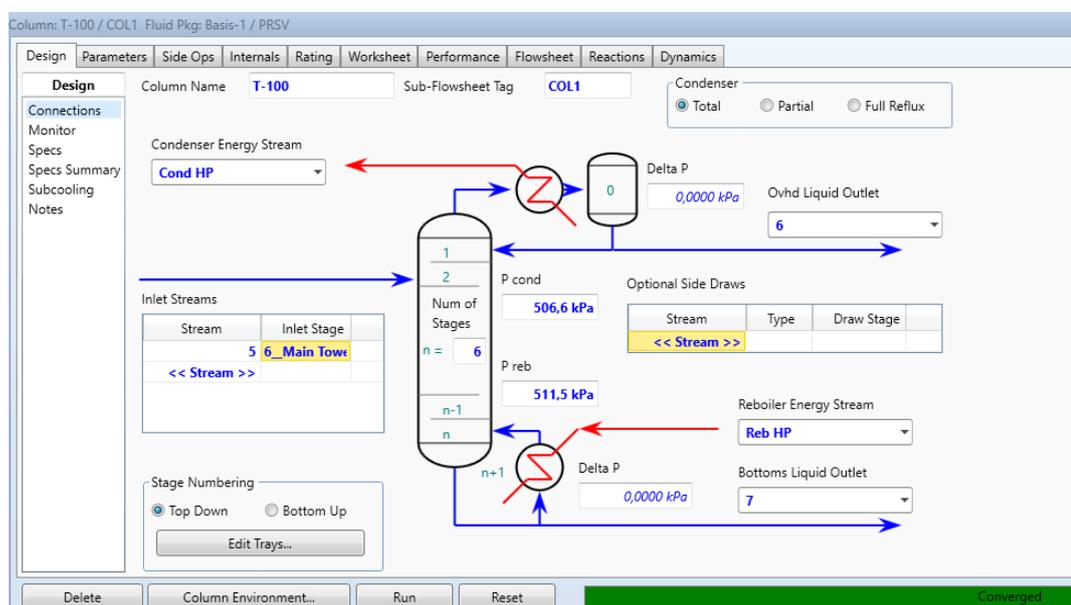


Fig. II. 8. Diseño de la columna de destilación en Aspen Hysys

Se introducen las composiciones objetivo de las corrientes de salida como se indica en la Tabla II. 23, las composiciones de la corriente de entrada ya vienen predefinidas por las corrientes anteriores. Se deben fijar también los flujos molares de las corrientes, de nuevo la de la corriente 5 viene prefijada en 43.32 kmol/h y los de las corrientes 6 y 7 son 0.29 kmol/h y 43.03 kmol/h respectivamente.

Tabla II. 23. Composiciones de la columna de destilación introducidas en Aspen Hysys

Componente	Fracción molar 5	Fracción molar 6	Fracción molar 7
Agua	0.9944	0.3000	0.9990
Etanol	0.0056	0.7000	0.0010
Etileno	0.0000	0.0000	0.0000
Dietiléter	0.0000	0.0000	0.0000
Acetaldehído	0.0000	0.0000	0.0000
Total	1.0000	1.0000	1.0000

Es necesario fijar también algunas especificaciones para completar los grados de libertad, en este caso se indica una ratio de destilado de 0.29 kmol/h y una ratio de reflujo de 15.39.

En este punto se puede iniciar la simulación. El programa señala un aviso de error de consistencia ya que las especificaciones no coinciden con los valores calculados, lo que resulta lógico ya que los cálculos realizados manualmente se han realizado en condiciones ideales a diferencia de la simulación del programa. Por otra parte, en la simulación todos los platos tienen eficacia total a diferencia de los calculados manualmente para tratar de compensar los errores debidos a las idealizaciones en el método manual. Los resultados obtenidos por Aspen HYSYS se presentan en la Tabla II. 24.

Tabla II. 24. Composiciones de la columna de destilación obtenidas con Aspen HYSYS

Componente	Fracción molar 5	Fracción molar 6	Fracción molar 7
Agua	0.9944	0.3435	0.9988
Etanol	0.0056	0.6561	0.0012
Etileno	0.0000	0.0000	0.0000
Dietiléter	0.0000	0.0000	0.0000
Acetaldehído	0.0000	0.0004	0.0000
Total	1.0000	1.0000	1.0000

En la Fig. II. 9 se muestra la evolución de las composiciones en etanol y agua a lo largo de la columna, estando estos numerados los platos partiendo desde cabezas. Se puede observar que las composiciones no varían notablemente del plato 4 hacia arriba, debido a la mayor dificultad de separación a composiciones más próximas al azeótropo.



Fig. II. 9. Composición a lo largo de la columna

Para finalizar con el diseño de la columna de destilación, se detallan a continuación los balances de energía para los cambiadores de la columna de destilación, condensador y calderín.

Comenzando por el diseño del condensador, para calcular el calor requerido se deben conocer las entalpías de vaporización de los compuestos presentes en esa parte del proceso, etanol y agua, a las condiciones de trabajo que serían 405 K (132 °C) (*Wolfram Alpha*, 2024), además del flujo molar de vapor que entra en el condensador, 4.67 kmol/h, y su composición. Con todo ello se acude a la Ecuación [33], cuyos resultados junto con los cálculos intermedios requeridos se muestran en la Tabla II. 25.

$$Q = V \cdot \sum \Delta H_{\text{vaporización}} \cdot X_i \quad [33]$$

Tabla II. 25. Cálculo del calor requerido en el condensador de la columna de la destilación

Compuesto	X_D	$\Delta H_{\text{vaporización}}$ (kJ/kg)	$\Delta H_{\text{vaporización}}$ (kJ/kmol)	Q_{CondCol} (kJ/s)
Etanol	0.7000	913	42043	57.27
Agua	0.3000	2723	49014	

Se plantea utilizar agua como fluido refrigerante ya que, revisando la bibliografía, la heurística 7 para cambiadores de calor (Walas, 1988) indica las temperaturas máximas de entrada y salida del cambiador para este fluido. El siguiente paso en el diseño del condensador es estimar el flujo de fluido refrigerante necesario, para ello se utiliza la Ecuación [1], en la que la segunda parte se anula debido a que, como anteriormente, por las temperaturas entre las que se mueve el agua refrigerante, esta no sufre cambio de fase. Los resultados se muestran en la Tabla II. 26.

Tabla II. 26. Cálculo del flujo del fluido refrigerante para el condensador de la columna de destilación

Q_{CondCol} (kJ/s)	$T_{\text{agua in}}$ (°C)	$T_{\text{agua out}}$ (°C)	C_p (kJ/kg K)	m_{agua} (kg/s)
57.27	32	49	4.18	0.81

Por último se deberá calcular el área del condensador, para ello se utiliza la Ecuación [2], acudiendo de nuevo a la bibliografía, en la heurística 8 para cambiadores de calor (Walas, 1988) se indica un valor de coeficiente global de transmisión de calor, U , de 851 W/m²°C para condensadores. Es necesario también utilizar la Ecuación [3], donde se debe tener presente que el fluido caliente es el que está en el condensador y el frío el agua. En la Tabla II. 27 se muestran los resultados del área del condensador de la columna.

Tabla II. 27. Cálculo del área del condensador de la columna de destilación

Q_{CondCol} (J/s)	U (W/m ² °C)	ΔT_{lm} (°C)	A (m ²)
57272.79	851	86.1	0.78

A continuación se procede a diseñar el calderín de la columna de destilación, el procedimiento es parecido ya que se debe comenzar por calcular el calor requerido para lo que se necesita conocer las entalpías de vaporización de los compuestos presentes en esa parte del proceso, etanol y agua, a las condiciones de trabajo que serían 426 K (153 °C) (Wolfram Alpha, 2024), además del flujo molar de líquido que entra en el calderín, 59.73 kmol/h, y su composición. Con todo ello se acude a la Ecuación [34], similar a la utilizada para el condensador, pero cambiando el flujo utilizado. Los resultados junto con los cálculos intermedios requeridos se muestran en la Tabla II.28.

$$Q = L' \cdot \sum \Delta H_{\text{Vaporización}} \cdot X_i \quad [34]$$

Tabla II. 28. Cálculo del calor requerido en el calderín de la columna de la destilación

Compuesto	x_W	$\Delta H_{\text{vaporización}}$ (kJ/kg)	$\Delta H_{\text{vaporización}}$ (kJ/kmol)	Q_{CaldCol} (kJ/s)
Etanol	0.0010	932	42934	820.92
Agua	0.9990	2749	49482	

Se plantea utilizar vapor como fluido para calentar ya que, revisando la bibliografía, la heurística 1 para “utilities” (Walas, 1988) indica que se puede utilizar vapor para 27 bar con 504 K. El siguiente paso en el diseño del calderín es estimar el flujo de fluido calefactor necesario, para ello se utiliza la Ecuación [1], en la que esta vez es la primera parte la que se anula. Los resultados se muestran en la Tabla II. 29.

Tabla II. 29. Cálculo del flujo del fluido calefactor para el calderín de la columna de destilación

Q_{CaldCol} (kJ/s)	$\Delta H_{\text{vap}(27 \text{ bar})}$ (kJ/kg)	m_{vap} (kg/s)
820.92	1812	0.45

Por último, se calcula el área del calderín, para ello se utiliza la Ecuación [35], acudiendo de nuevo a la bibliografía, en la heurística 8 para cambiadores de calor (Walas, 1988) se indica un valor de coeficiente global de transmisión de calor, U, de 1135 W/m²°C para calderines. En la Tabla II.30 se muestran los resultados del área del condensador de la columna.

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T \quad [35]$$

Tabla II. 30. Cálculo del área del calderín de la columna de destilación

Q_{CaldCol} (J/s)	U (W/m ² °C)	ΔT (°C)	A (m ²)
820919.04	1135	78.4	9.23

3.2.1. Alternativas descartadas para la destilación

Además de la situación detallada previamente, se han estudiado otras alternativas buscando separaciones mejores, con mayores x_D . Se incluye a continuación un breve resumen con las cuestiones más relevantes y, en el Anexo D. Alternativas descartadas para la destilación, los resultados de los cálculos correspondientes a cada alternativa siguiendo el mismo procedimiento que el explicado previamente. Se debe tener en cuenta que al cambiar la composición del destilado también cambian los resultados de los balances de materia.

$$- x_D = 0.87$$

Se plantea el nuevo balance de materia, cuyos resultados se presentan en la Tabla II. 31.

Tabla II. 31. Resultados de los balances de materia para $x_D = 0.87$

F(kmol/h)	x_F	D(kmol/h)	x_D	W(kmol/h)	x_W
43.32	0.0056	0.23	0.87	43.09	0.0010

A continuación, en la Fig. II. 10, se muestran los 18 platos teóricos estimados con el método de McCabe-Thiele.

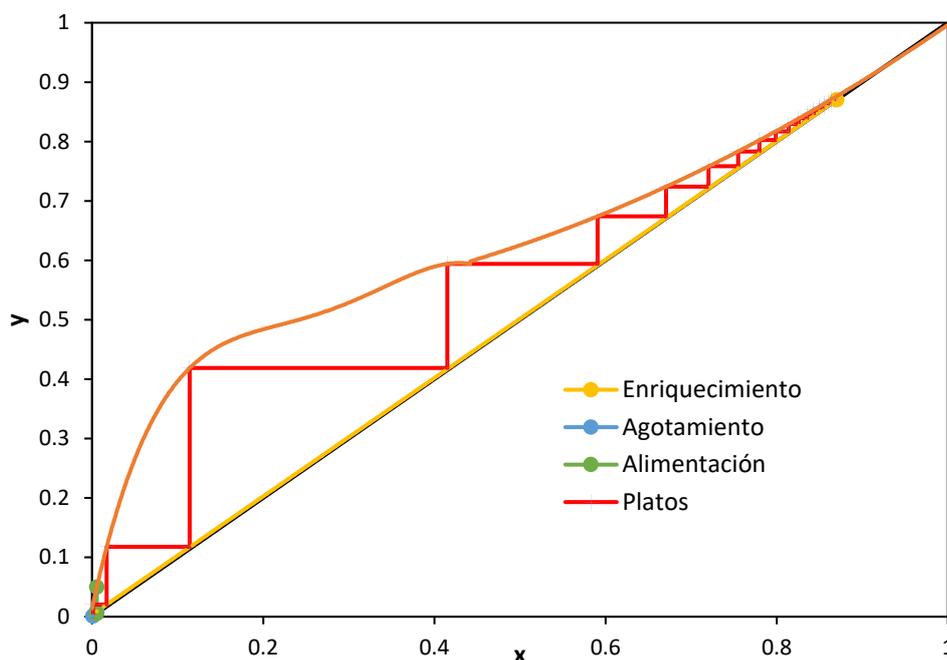


Fig. II. 10. Estimación de los platos teóricos para $x_D = 0.87$

En la Tabla II. 32 se incluye un resumen de las condiciones de operación en el condensador y el calderín de la columna.

Tabla II. 32. Condiciones de operación del condensador y calderín para $x_D = 0.87$

P_D (Pa)	P_W (Pa)	T_D (K)	T_W (K)
506625	522483	401	418

Se presentan en la Tabla II. 33 un resumen con los resultados obtenidos para los platos reales, la altura y el diámetro de la columna, que serán determinantes en la no aceptación de esta opción.

Tabla II. 33. Resumen de resultados para una columna de destilación para $x_D = 0.87$

Platos reales	L_C (m - ft)	D_C (m)	L_C/D_C	u (ft/s)
23	13.97 – 45.83	0.14	98.96	2.01

Por último, en la Tabla II. 34 se muestran las heurísticas utilizadas para clarificar si la columna de destilación podría llevarse a la realidad (Walas, 1988), ambas del apartado destilación y absorción de gases.

Tabla II. 34. Verificación de resultados según heurísticas para $x_D = 0.87$

Heurística	Condición	Cumple
14	$u \approx 2 \text{ ft/s}$	SI
31	$L_C < 175 \text{ ft}$	SI
31	$\frac{L_C}{D_C} < 30$	NO

Dados los resultados se descarta esta opción.

- $x_D = 0.80$

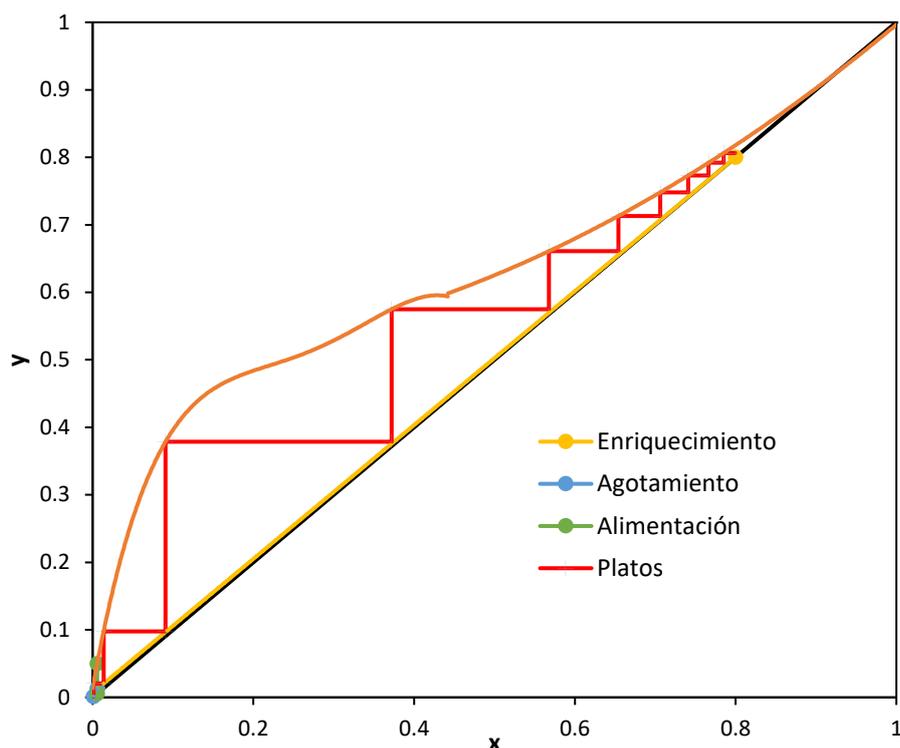
Se plantea el nuevo balance de materia, cuyos resultados se presentan en la Tabla II.

35.

Tabla II. 35. Resultados de los balances de materia para $x_D = 0.80$

F(kmol/h)	x_F	D(kmol/h)	x_D	W(kmol/h)	x_W
43.32	0.0056	0.25	0.8000	43.07	0.0010

A continuación, en la Fig. II. 11, se muestran los 10 platos teóricos estimados con el método de McCabe-Thiele.

Fig. II. 11. Estimación de los platos teóricos para $x_D = 0.80$

En la Tabla II. 36 se incluye un resumen de las condiciones de operación en el condensador y el calderín de la columna.

Tabla II. 36. Condiciones de operación del condensador y calderín para $x_D = 0.80$

P_D (Pa)	P_W (Pa)	T_D (K)	T_W (K)
506625	514899	403	418

Se presentan en la Tabla II. 37 un resumen con los resultados obtenidos para los platos reales, la altura y el diámetro de la columna, que serán determinantes en la no aceptación de esta opción.

Tabla II. 37. Resumen de resultados para una columna de destilación para $x_D = 0.80$

Platos reales	L_C (m - ft)	D_C (m)	L_C/D_C	u (ft/s)
12	6.99 – 22.92	0.15	47.81	2.16

Por último en la Tabla II.38 se muestran las heurísticas utilizadas para clarificar si la columna de destilación podría llevarse a la realidad (Walas, 1988), ambas del apartado destilación y absorción de gases.

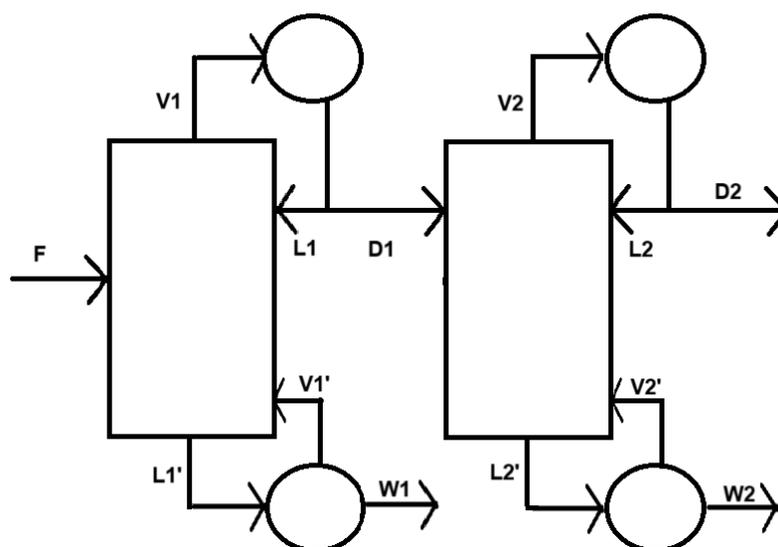
Tabla II. 38. Verificación de resultados según heurísticas para $x_D = 0.80$

Heurística	Condición	Cumple
14	$u \approx 2 \text{ ft/s}$	SI
31	$L_C < 175 \text{ ft}$	SI
31	$\frac{L_C}{D_C} < 30$	NO

Dados los resultados se descarta esta opción.

- $x_D = 0.75$ (2 columnas)

En esta alternativa habría que hacer de forma independiente el estudio de ambas columnas, pero en este caso la primera se corresponde con la opción elegida, explicada en detalle previamente. Se partirá de la corriente de destilado de la primera columna para alimentar a la segunda, como se muestra en la Fig. II. 12, siendo necesario plantear un nuevo balance de materia, cuyos resultados se presentan en la Tabla II.39.

Fig. II. 12. Esquema de corrientes para dos columnas de destilación (*Elaboración propia*)Tabla II. 39. Resultados de los balances de materia para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)

D_1 (kmol/h)	x_{D1}	D_2 (kmol/h)	x_{D2}	W_2 (kmol/h)	x_{W2}
0.29	0.7000	0.27	0.7500	0.02	0.0010

Es importante tener en cuenta que para esta columna la alimentación es en forma de líquido saturado ya que se considera que el condensador de la primera columna es total. Por tanto, el procedimiento es el mismo que para los casos anteriores.

A continuación, en la Fig. II. 13, se muestran los 12 platos teóricos estimados con el método de McCabe-Thiele.

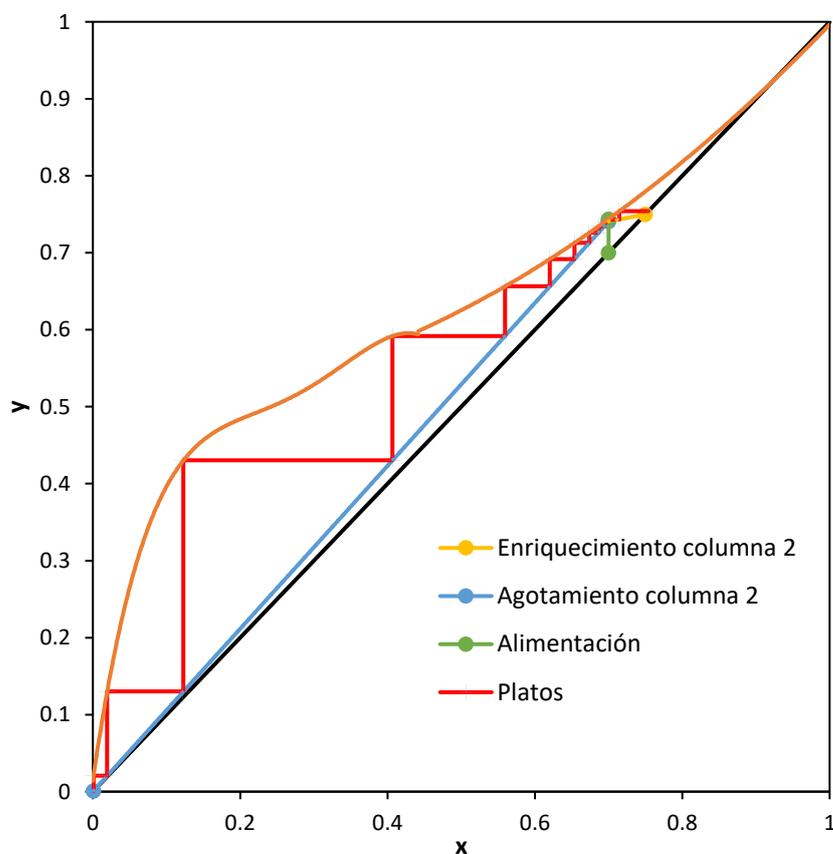


Fig. II. 13. Estimación de los platos teóricos para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)

En la Tabla II. 40 se incluye un resumen de las condiciones de operación en el condensador y el calderín de la columna.

Tabla II. 40. Condiciones de operación del condensador y calderín para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)

P_D (kPa)	P_W (kPa)	T_D (K)	T_W (K)
506.6	524.6	404	427

Se presentan en la Tabla II. 41 un resumen con los resultados obtenidos para los platos reales, la altura y el diámetro de la columna, que serán determinantes en la no aceptación de esta opción.

Tabla II. 41. Resumen de resultados para una columna de destilación para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)

Platos reales	L_C (m - ft)	D_C (m)	L_C/D_C	u (ft/s)
15	8.89 – 29.17	0.04	215.83	2.25

Por último, en la Tabla II. 42 se muestran las heurísticas utilizadas para clarificar si la columna de destilación podría llevarse a la realidad (Walas, 1988), ambas del apartado destilación y absorción de gases.

Tabla II. 42. Verificación de resultados según heurísticas para $x_{D2} = 0.75$ (2 columnas)

Heurística	Condición	Cumple
14	$u \approx 2 \text{ ft/s}$	SI
31	$L_c < 175 \text{ ft}$	SI
31	$\frac{L_c}{D_c} < 30$	NO

Dados los resultados, y pese a que la primera columna resulta viable, se descarta esta opción.

- $x_D = 0.725$ (2 columnas)

De nuevo, se toma como primera columna la opción elegida, explicada en detalle previamente. Se partirá de la corriente de destilado de la primera columna para alimentar a la segunda siendo necesario plantear un nuevo balance de materia, cuyos resultados se presentan en la Tabla II. 43.

Tabla II. 43. Resultados de los balances de materia para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)

$D_1(\text{kmol/h})$	x_{D1}	$D_2(\text{kmol/h})$	x_{D2}	$W_2(\text{kmol/h})$	x_{W2}
0.29	0.7000	0.28	0.7250	0.01	0.0010

En este caso el condensador de la primera columna se toma como parcial por lo que la alimentación es en forma de vapor saturado. Las composiciones en el equilibrio entre fases a la presión y temperatura de la alimentación, se determinan directamente en el diagrama x-y con una línea horizontal en la composición de alimentación. En la Fig. II. 14, se muestran los 8 platos teóricos estimados con el método de McCabe-Thiele.

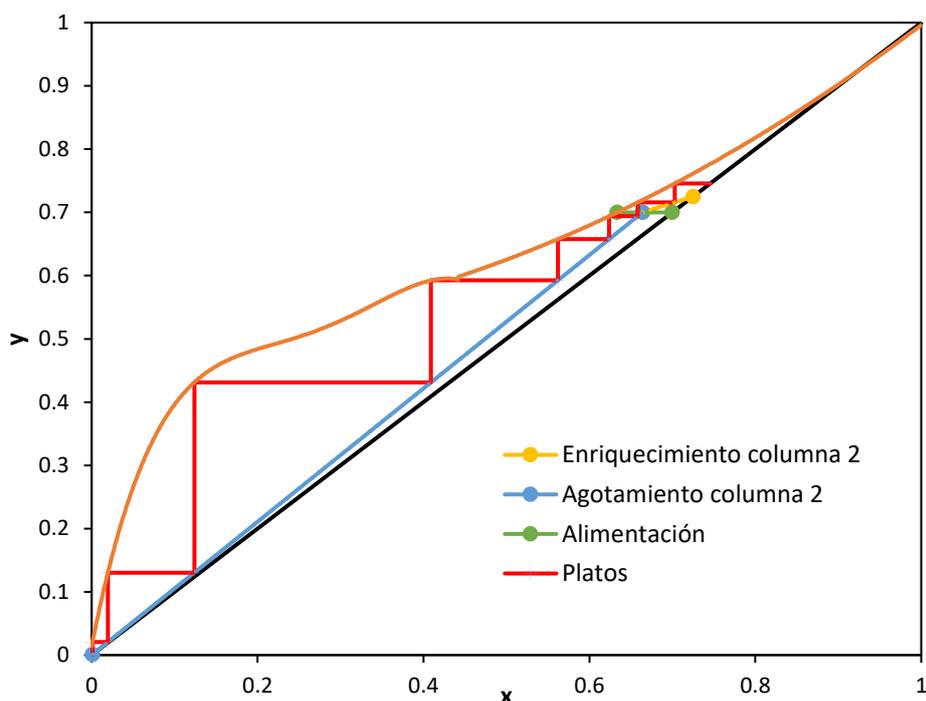


Fig. II. 14. Estimación de los platos teóricos para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)

En la Tabla II. 44 se incluye un resumen de las condiciones de operación en el condensador y el calderín de la columna.

Tabla II. 44. Condiciones de operación del condensador y calderín para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)

P_D (kPa)	P_W (kPa)	T_D (K)	T_W (K)
506.6	513.5	404	426

Se presentan en la Tabla II. 45 un resumen con los resultados obtenidos para los platos reales, la altura y el diámetro de la columna, que serán determinantes en la no aceptación de esta opción.

Tabla II. 45. Resumen de resultados para una columna de destilación para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)

Platos reales	L_C (m - ft)	D_C (m)	L_C/D_C	u (ft/s)
10	5.72 – 18.75	0.05	120.21	2.29

Por último, en la Tabla II. 46 se muestran las heurísticas utilizadas para clarificar si la columna de destilación podría llevarse a la realidad (Walas, 1988), ambas del apartado destilación y absorción de gases.

Tabla II. 46. Verificación de resultados según heurísticas para $x_{D2} = 0.725$ (2 columnas)

Heurística	Condición	Cumple
14	$u \approx 2 \text{ ft/s}$	SI
31	$L_c < 175 \text{ ft}$	SI
31	$\frac{L_c}{D_c} < 30$	NO

Dados los resultados, y pese a que la primera columna resulta viable, se descarta esta opción.

Debido a estos resultados, se ha escogido la opción de una sola columna con una composición de etanol en la corriente de destilado del 70% que se ha explicado anteriormente, y se le ha realizado el diseño completo incluyendo condensador y calderín únicamente a ella.

4. ANÁLISIS DE COSTES

4.1. COMPRESOR

Para la estimación de los costes del compresor se utiliza la Fig. II. E. 1 obtenida de la bibliografía (Peters et al, 2003), que estima el precio del compresor en función de la potencia requerida. Escogiendo un compresor centrífugo para una potencia de 175.073 kW el precio en valores del año 2002 sería de 400 000 \$.

4.2. CONDENSADOR

Los costes del condensador se estiman en base al cambiador que resulte más barato, debido al área del mismo se plantea utilizar un cambiador de tubos concéntricos o un cambiador de tubos rectos y carcasa fija. Se utilizarán la Fig. II. E. 2 y la Fig. II. E. 3 respectivamente, obtenidas de la bibliografía (Peters et al, 2003), en ambos casos el factor de corrección de presión será de 1 debido a que la presión de operación es más baja que las planteadas.

Para tubos concéntricos con tubos de acero inoxidable y carcasa de acero al carbono se estima el coste en 2 100 \$; mientras que, utilizando tubos rectos y carcasa fija, con los tubos de acero inoxidable 316, se estima el coste en 3 400 \$, por lo que se escoge finalmente un cambiador de tubos concéntricos quedando el coste del condensador en 2 100 \$ en valores del año 2002.

4.3. SEPARADOR

Para el caso del separador no se va a recurrir a la bibliografía ya que se ha seleccionado un equipo comercial, el “Top quality horizontal gravity high pressure ASME (American Society of Mechanical Engineers) oil gas water separator” (HC Petroleum Equipment, 2019) mostrado en la Fig. II. 15.



Fig. II. 15. Separador seleccionado (HC Petroleum Equipment, 2019)

El equipo cuesta 30 000 \$ en valores actuales y se selecciona pese a tener una capacidad mayor de la requerida. Esta decisión se explica en base a dos razonamientos, se trata del equipo comercial más pequeño encontrado y, además, tener los equipos ligeramente sobredimensionados es una ventaja en caso de que suban los precios de los productos, porque te permite la adaptación inmediata si se quiere aumentar la producción.

4.4. COLUMNA DE DESTILACIÓN

Para la estimación de los costes de la columna de destilación se deben estimar por separado los costes de la columna, de los platos, del condensador y del calderín.

En primer lugar, se estima el precio de la columna de destilación con la Fig. II. E. 4 obtenida de la bibliografía (Peters et al, 2003), se parte de la altura y el diámetro, pero como el diámetro calculado es inferior a las líneas se escoge el caso más próximo, $D_c = 0.5$ m. Además, como la presión de operación es de 5 atm se extrapola el factor de ajuste por presión quedando 0.8, por último se escoge como material acero inoxidable 316, con lo que el factor de ajuste por material será de 3.

Únicamente con la gráfica se obtiene un coste de 8 000 \$ que teniendo en cuenta los factores de corrección serían 30 400 \$ y con un 20% para las conexiones requeridas serían 36 480 \$.

Se debe estimar también el coste de los platos de la columna de destilación, para ello se utiliza la Fig. II. E. 5 obtenida de la bibliografía (Peters et al, 2003). Se debe acudir con el diámetro calculado previamente, pero como es inferior a los valores que disponen de curva en la gráfica, se escoge primero el tipo de platos, en este caso serán platos perforados de acero inoxidable, y como diámetro se toma el mínimo posible, luego $D_c = 0.6$ m. Además se deben tener en cuenta el número de platos y el factor correspondiente que varía según dicho número, en este caso 7 platos con factor 2.

Teniendo en cuenta solo la gráfica se obtiene un coste de 700 \$ que incluyendo los factores de corrección pasan a 9 800 \$ y con un 20% para las conexiones requeridas serían 36 480 \$.

Por último se deben tener en cuenta el condensador y el calderín, para el primero se decide utilizar un cambiador de tubos concéntricos por ser muy pequeño, se estimarán entonces los costes con la Fig. II. E. 6 obtenida de la bibliografía (Peters et al, 2003), se escoge la opción más barata, tubo de acero inoxidable y carcasa de acero al carbono y, como la presión es inferior a la que requiere factor de ajuste, se tomará como 1. Se estima el coste del condensador en 1 900 \$.

Para el calderín se plantea la opción de usar de nuevo un cambiador de tubos concéntricos o la de usar un cambiador de tubos rectos y carcasa fija, para tubos concéntricos el planteamiento es el mismo que en el condensador, estimándose el coste en 2 300 \$. Si se utilizara la otra opción habría que acudir de nuevo a la Fig. II. E. 3, también con factor de presión 1 debido a no trabajar a tanta presión, si se utilizara acero inoxidable 316 el coste quedaría estimado en 4 500 \$, mucho más caro que la opción anterior, si por el contrario se utilizara acero al carbono se estiman los costes en 3 500 \$, también más caro. Se escoge finalmente un cambiador de tubos concéntricos.

El coste total de compra de la columna, teniendo en cuenta la propia columna, los platos de la misma, el condensador y el calderín se estima en 50 480 \$ en valores de 2002.

Por último se incluye a modo de resumen la Tabla II. 47 con los costes actualizados a valores de 2024 utilizando los índices de costes de 2002 (390.4) y febrero de 2024 (800.3) obtenidos de la bibliografía (*Towering Skills*, 2024) con ayuda de la Ecuación [36]. El coste total de la sección de separación se estima en 881 k€.

$$\text{Coste actual} = \text{Coste 2002} \cdot \frac{\text{Índice de costes 2024}}{\text{Índice de costes 2002}} \quad [36]$$

Tabla II. 47. Costes de la sección de separación actualizados

	Coste 2002 (\$)	Coste 2024 (\$)	Coste 2024 (€)
Compresor	400 000	819 980	7754 381
Condensador	2 100	4305	3 961
Separador	-	30 000	27 600
Columna	50 480	103 481	95 203
Total			881 145

5. BIBLIOGRAFÍA

Bajo C., Méndez A.N., 2023. Producción de bioetileno a partir de bioetanol por deshidratación catalítica

HC HUICHUAN INTERNATIONAL PETROLEUM EQUIPMENT CO., LTD. [en línea]. [Consulta: 31 mayo 2024]. Disponible en:

<https://hcpetroleum.en.alibaba.com/index.html?spm=a2700.details.0.0.6d227fdeHsYj4o&from=detail&productId=62107941614>

Knock out drum: Workin, Functions, Sizing and Design of KOD [en línea]. [Consulta: 23 mayo 2024]. Disponible en:

<https://multitex-group.com/2022/02/02/knockout-drum/>

Peters, M.S., Timmerhaus, K.D., West, R.E., 2003. Plant Design and Economics for Chemical Engineers, Fifth Edition

Propiedades Físicas del Agua. [en línea]. [Consulta: 19 octubre 2023]. Disponible en:

<https://www.wolframalpha.com/>

Propiedades Físicas del Etanol. [en línea]. [Consulta: 19 octubre 2023]. Disponible en:

<https://www.wolframalpha.com/>

Towering Skills. Cost Indices [en línea]. Consulta: 30 may. 2023. Disponible en:

<https://toweringskills.com/financial-analysis/cost-indices/>

Walas S.M., Chemical Process Equipment: Selection and Design, Butterworth-Heinemann, Woburn, MA, 1988

6. ANEXOS

A. LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descripción	Unidad
\dot{V}_{agua}	Flujo molar de agua en la corriente 5	kmol/h
\dot{V}_{etanol}	Flujo molar de etanol en la corriente 5	kmol/h
$\Delta H_{\text{vap}(27 \text{ bar})}$	Entalpía de vaporización a 27 bares	kJ/kg o kJ/kmol
$\Delta H_{\text{vaporización}}$	Entalpía de vaporización	kJ/kg o kJ/kmol
$\Delta P_{\text{columna}}$	Caída de presión en la columna	Pa
ΔT	Variación de temperatura	°C o K
ΔT_{lm}	Temperatura media logarítmica	°C
λ	Conductividad térmica	W/mK
ρ_v	Densidad del vapor	lb/ft ³
A	Área	m ²
ASME	American Society of Mechanical Engineers	-
C_p	Capacidad calorífica	kJ/kg K
D	Flujo molar del destilado	kmol/h
D_1	Flujo molar del destilado de la primera columna	kmol/h
D_2	Flujo molar del destilado de la segunda columna	kmol/h
D_C	Diámetro de la columna	m
F	Flujo molar de alimentación	kmol/h
F_s	Factor de vapor	(ft/s) $\sqrt{\text{lb/ft}^3}$
L	Flujo molar del líquido recirculado	kmol/h
L'	Flujo molar del líquido que entra al calderín	kmol/h
L_c	Longitud de la columna	m o ft
$\left(\frac{L}{V}\right)_{\text{min}}$	Relación de reflujo interno mínimo	-
$\left(\frac{L}{V}\right)_{\text{op}}$	Pendiente de la línea de operación	-
m	Flujo másico	kg/s

m_{agua}	Flujo másico de agua	kg/s
m_{vap}	Flujo másico de vapor	kg/s
P	Presión	atm o kPa
P_1	Presión de la corriente de entrada	atm
P_2	Presión de la corriente de salida	atm
P_D	Presión total en el condensador	Pa
$P_{S,\text{Agua}}$	Presión de saturación del agua	Pa
$P_{S,\text{Etanol}}$	Presión de saturación del etanol	Pa
P_V^0	Presión de vapor	Pa
P_W	Presión total en el calderín	Pa
PM	Peso molecular	kg/kmol
PM_{Agua}	Peso molecular del agua	kg/kmol
PM_{Etanol}	Peso molecular del etanol	kg/kmol
PRSV	Peng-Robinson modificado	-
Q	Flujo de calor	kJ/s o J/s o kW
Q_{CaldCol}	Flujo de calor del calderín de la columna	J/s o kJ/s
Q_{Cond}	Flujo de calor del condensador	kW o kJ/s o J/s
Q_{CondCol}	Flujo de calor del condensador de la columna	J/s o kJ/s
Q_g	Caudal de vapor	m^3/h o m^3/s
R_{min}	Relación de reflujo mínima	-
R_{opt}	Relación de reflujo óptima	-
T	Temperatura	$^{\circ}\text{C}$ o K
T_1	Temperatura de la corriente de entrada	$^{\circ}\text{C}$
T_2	Temperatura de la corriente de salida	$^{\circ}\text{C}$
$T_{\text{agua in}}$	Temperatura de entrada del agua	$^{\circ}\text{C}$

$T_{\text{agua out}}$	Temperatura de salida del agua	$^{\circ}\text{C}$
$T_{\text{c,i}}$	Temperatura de entrada del fluido frío	$^{\circ}\text{C}$
$T_{\text{c,o}}$	Temperatura de salida del fluido frío	$^{\circ}\text{C}$
$T_{\text{h,i}}$	Temperatura de entrada del fluido caliente	$^{\circ}\text{C}$
$T_{\text{h,o}}$	Temperatura de salida del fluido caliente	$^{\circ}\text{C}$
T_{in}	Temperatura de entrada	$^{\circ}\text{C}$
T_{D}	Temperatura en el condensador	K
T_{out}	Temperatura de salida	$^{\circ}\text{C}$
T_{W}	Temperatura en el calderín	K
u	Velocidad de vapor	m/s o ft/s
U	Coefficiente global de transmisión de calor	$\text{W}/^{\circ}\text{Cm}^2$
V	Flujo molar del vapor a la entrada del condensador	kmol/h
V'	Flujo molar del vapor de retorno	kmol/h
V_{g}	Volumen específico	m^3/kg o ft^3/lb
V_{gAgua}	Volumen específico del agua	m^3/kg
V_{gEtanol}	Volumen específico del etanol	m^3/kg
W	Flujo molar del residuo	kmol/h
W_2	Flujo molar del residuo de la segunda columna	kmol/h
x	Fracción molar del componente más volátil en el líquido	-
$x_{5,\text{etanol}}$	Composición en etanol de la corriente 5	-
$x_{5,\text{agua}}$	Composición en agua de la corriente 5	-
x_{Agua}	Fracción molar de agua	-
x_{D}	Fracción molar del componente más volátil en el destilado	-
x_{D1}	Fracción molar del componente más volátil en el destilado de la primera columna	-

x_{D2}	Fracción molar del componente más volátil en el destilado de la segunda columna	-
x_{Etanol}	Fracción molar de etanol	-
x_{DAgua}	Fracción molar de agua en el destilado	-
$x_{DEtanol}$	Fracción molar de etanol en el destilado	-
x_{eq}	Fracción molar del líquido en equilibrio	-
x_F	Fracción molar del componente más volátil en la alimentación	-
x_i	Fracción molar del componente "i"	-
x_{op}	Fracción molar del líquido en condiciones de operación	-
x_W	Fracción molar del componente más volátil en el residuo	-
x_{W2}	Fracción molar del componente más volátil en el residuo de la segunda columna	-
$x_{WAguá}$	Fracción molar de agua en el residuo	-
$x_{WEtanol}$	Fracción molar de etanol en el residuo	-
y	Fracción molar del componente más volátil en el gas	-
y_{eq}	Fracción molar del gas en equilibrio	-
y_{op}	Fracción molar del gas en condiciones de operación	-

B. SIMULACIÓN PARA LA DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN EN EL SISTEMA COMPRESOR – CONDENSADOR – SEPARADOR

Para realizar la simulación tal como se muestra en la Fig. II. 2 mostrada anteriormente en Diseño de Equipos: 3.1. Compresor – Condensador – Separador, en primer lugar es necesario seleccionar los componentes y el paquete de fluidos que se quiere que utilice el programa. La lista de componentes utilizados en la simulación se muestra en la Fig. II. B. 1 y el modelo termodinámico seleccionado será el Peng-Robinson modificado (PRSV), ya que el modelo Peng-Robinson es altamente indicado para cálculos de equilibrios líquido-vapor y su modificación lo hace extensible a sistemas con cierta no-idealidad.

Source Databank: HYSYS

Component	Type	Group
H2O	Pure Component	
Ethanol	Pure Component	
Ethylene	Pure Component	
diE-Ether	Pure Component	
AcetAldehyde	Pure Component	

Fig. II. B. 1. Lista de componentes para la simulación de Aspen HYSYS

A continuación se comienzan a definir las corrientes, empezando por la alimentación, corriente **1**, cuya composición se muestra en la Tabla II. B. 1. Por parte de las condiciones de la corriente, se indica que la corriente se encuentra a 170°C y 1.3 atm y que el flujo másico es de 1958.4 kg/h.

Tabla II. B. 1. Composición de la corriente **1**

Componente	Fracción molar
Agua	0.5092
Etanol	0.0030
Etileno	0.4843
Dietiléter	0.0019
Acetaldehído	0.0016
Total	1.0000

El siguiente equipo a simular es el compresor, se deberán indicar en primer lugar las conexiones como se indica en la Fig. II. B. 2, al fijar en la entrada una corriente que ya ha sido definida únicamente habría que fijar la presión que se quiere en la corriente de salida para que el programa realice los cálculos correspondientes. En la Tabla II. B. 2 se presenta un resumen de las condiciones de las corrientes de entrada (1) y salida (2) del compresor para el caso finalmente seleccionado tras la realización del Case Studies, las composiciones de ambas corrientes serán las mismas. El simulador además indica el flujo de energía requerido por el compresor, 6.303×10^5 kJ/h.

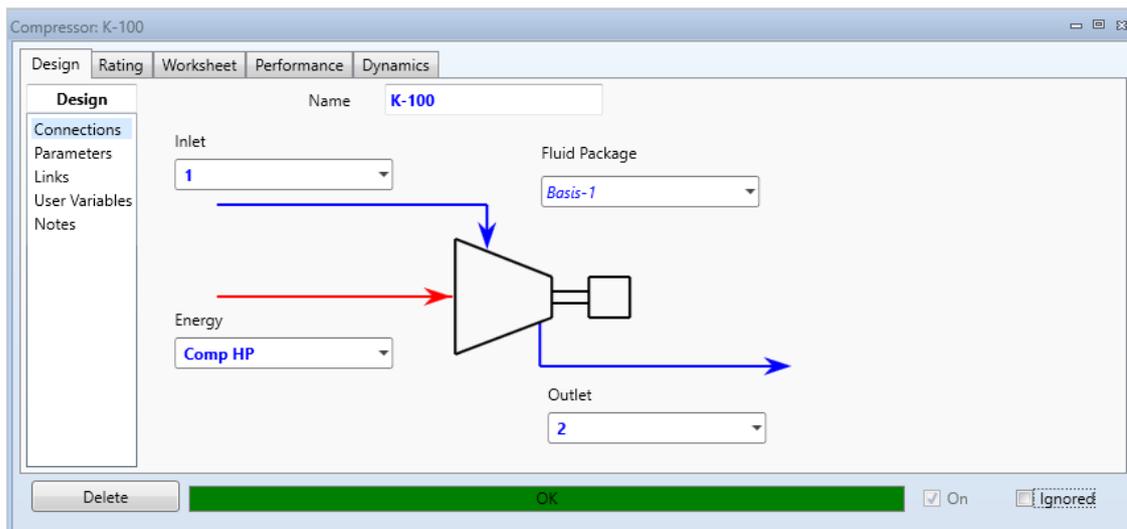


Fig. II. B. 2. Diseño del compresor en Aspen HYSYS

Tabla II. B. 2. Condiciones a entrada y salida del compresor

	Corriente 1	Corriente 2
Temperatura (°C)	170.0	322.0
Presión (kPa)	131.7	506.6

Como se ha mostrado, la corriente 2 quedaría definida automáticamente, luego el siguiente paso sería simular el condensador, para ello se selecciona un enfriador y se indican las conexiones como se muestra en la Fig. II. B. 3. En este caso al fijar en la entrada una corriente que ya ha sido definida únicamente habría que fijar la temperatura que se quiere en la corriente de salida para que el programa realice los cálculos correspondientes. En la Tabla II. B. 3. se presenta un resumen de las condiciones de las corrientes de entrada (2) y salida (3) del condensador para el caso finalmente seleccionado tras la realización del Case Studies. El simulador además indica el flujo de energía que sale del condensador, 3.151×10^6 kJ/h.

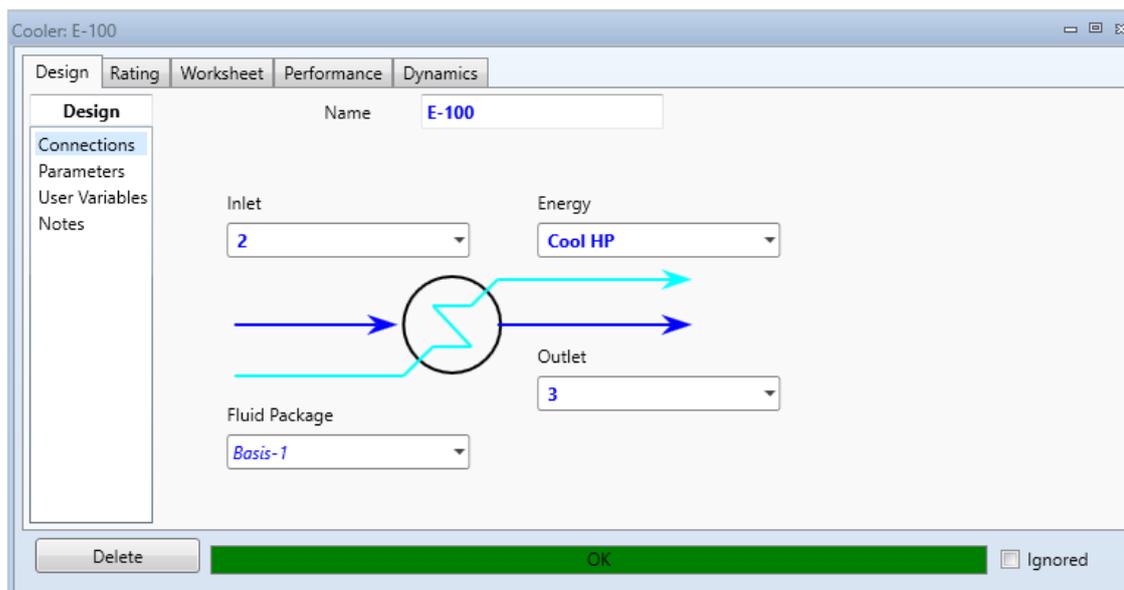


Fig. II. B. 3. Diseño del condensador en Aspen HYSYS

Tabla II. B. 3. Condiciones a entrada y salida del condensador

	Corriente 2	Corriente 3
Temperatura (°C)	322.0	5.0
Presión (kPa)	506.6	506.6

En este caso como en el condensador hay un cambio de fase, se muestra en la Tabla II. B. 4 la composición de la corriente **3** desglosada por fases.

Tabla II. B. 4. Composición de la corriente **3**

Componente	Flujo molar (kmol/h)	Fase Vapor (kmol/h)	Fase Acuosa (kmol/h)
Agua	43.16	0.07	43.08
Etanol	0.26	0.02	0.24
Etileno	41.05	41.05	0.00
Dietiléter	0.16	0.16	0.00
Acetaldehído	0.13	0.13	0.00
Total	84.75	41.43	43.32

El último equipo a simular para realizar el Case Studies es el separador, cuyas conexiones se definen como se muestra en la Fig. II. B. 4. De nuevo, la corriente de entrada, en este caso **3**, ya ha quedado definida anteriormente y, en este caso, las condiciones de presión y temperatura de las corrientes de salida, **4** y **5**, serán las mismas que las de entrada. Se muestran en la Tabla II. B. 5 las composiciones de las corrientes de entrada y salida del separador y en la Tabla II. B. 6 los flujos molares de las corrientes de salida en fase vapor, **4**, y acuosa, **5**.

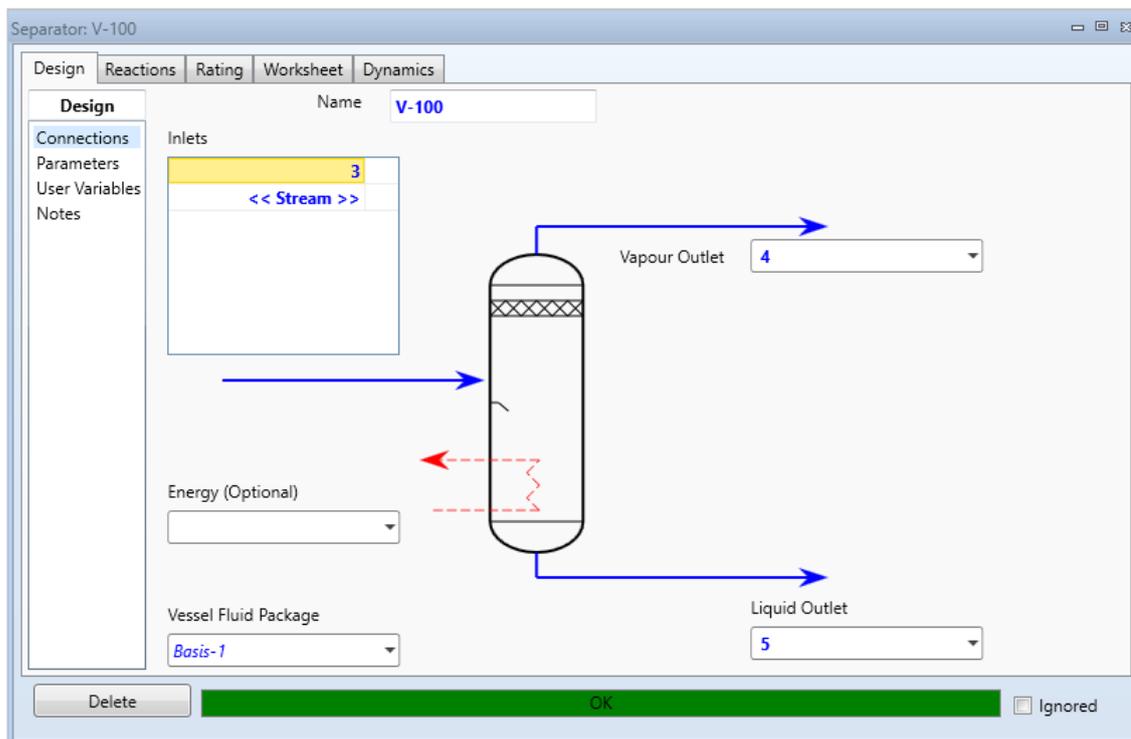


Fig. II. B. 4. Diseño del separador en Aspen HYSYS

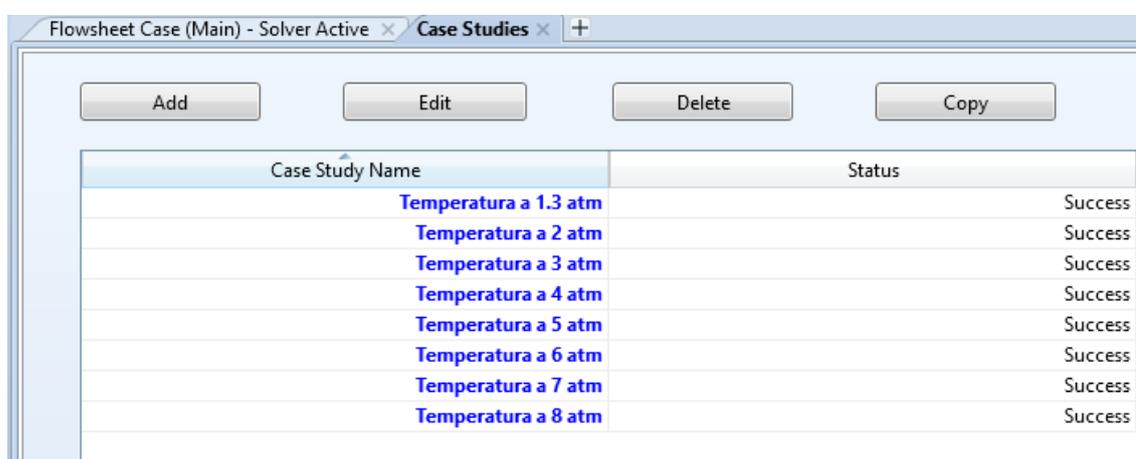
Tabla II. B. 5. Composición de las corrientes de entrada y salida del separador

Componente	Fracción molar 3	Fracción molar 5	Fracción molar 4
Agua	0.5092	0.9944	0.0018
Etanol	0.0030	0.0056	0.0004
Etileno	0.4843	0.0000	0.9908
Dietiléter	0.0019	0.0000	0.0038
Acetaldehído	0.0016	0.0000	0.0032
Total	1.0000	1.0000	1.0000

Tabla II. B. 6. Flujos molares a la salida del separador

Componente	Corriente vapor 4 (kmol/h)	Corriente acuosa 5 (kmol/h)
Agua	0.07	43.08
Etanol	0.02	0.24
Etileno	41.05	0.00
Dietiléter	0.16	0.00
Acetaldehído	0.13	0.00
Total	41.43	43.32

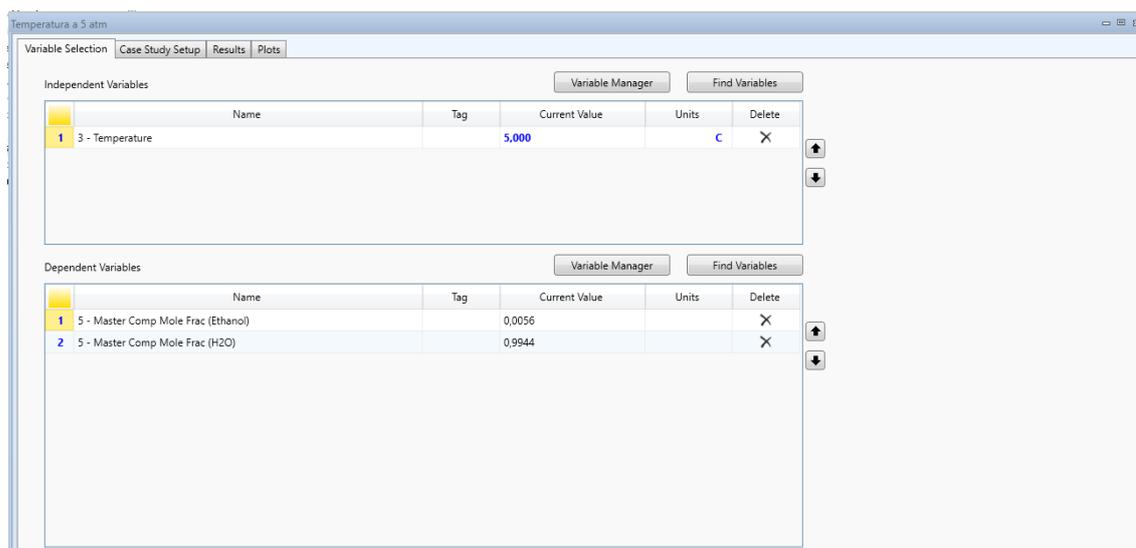
Una vez definido todo el sistema a estudio se procede a realizar el Case Studies, se realizarán los mostrados en la Fig. II. B. 5 y en todos ellos se seleccionará como variable independiente la temperatura y como variables dependientes las composiciones en fracción molar del etanol y el agua en la corriente 5 (salida en fase acuosa del separador) como se muestra en la Fig. II. B. 6. De esta manera se pretende ver para cada presión la evolución de las composiciones de dichos componentes según la temperatura, consiguiendo definir las condiciones más favorables de operación. El intervalo de temperaturas a estudio también será el mismo para todos los casos, entre 0 y 325°C con un paso de 5°C, se muestra en la Fig. II. B. 7; pese a esto los resultados volcados por el programa abarcan diferentes rangos para cada caso, los resultados se muestran en la Tabla II. B. 7 para el caso posteriormente seleccionado, de 5 atm, y en la Tabla II. B. 8 y la Tabla II. B. 9 para el resto de casos planteados.



The screenshot shows the 'Case Studies' window in Aspen HYSYS. It features a table with two columns: 'Case Study Name' and 'Status'. Above the table are four buttons: 'Add', 'Edit', 'Delete', and 'Copy'. The table lists eight case studies, all with a status of 'Success'.

Case Study Name	Status
Temperatura a 1.3 atm	Success
Temperatura a 2 atm	Success
Temperatura a 3 atm	Success
Temperatura a 4 atm	Success
Temperatura a 5 atm	Success
Temperatura a 6 atm	Success
Temperatura a 7 atm	Success
Temperatura a 8 atm	Success

Fig. II. B. 5. Case Studies realizados con el programa Aspen HYSYS



The screenshot shows the 'Variable Selection' window for a case study named 'Temperatura a 5 atm'. It has two tabs: 'Variable Selection' and 'Case Study Setup'. The window is divided into two sections: 'Independent Variables' and 'Dependent Variables'. Each section has a 'Variable Manager' and 'Find Variables' button. The 'Independent Variables' section contains one variable: '3 - Temperature' with a current value of 5,000 and units of 'C'. The 'Dependent Variables' section contains two variables: '5 - Master Comp Mole Frac (Ethanol)' with a current value of 0,0056 and '5 - Master Comp Mole Frac (H2O)' with a current value of 0,9944.

Independent Variables					
	Name	Tag	Current Value	Units	Delete
1	3 - Temperature		5,000	C	X

Dependent Variables					
	Name	Tag	Current Value	Units	Delete
1	5 - Master Comp Mole Frac (Ethanol)		0,0056		X
2	5 - Master Comp Mole Frac (H2O)		0,9944		X

Fig. II. B. 6. Detalle de la selección de variables para el Case Studies

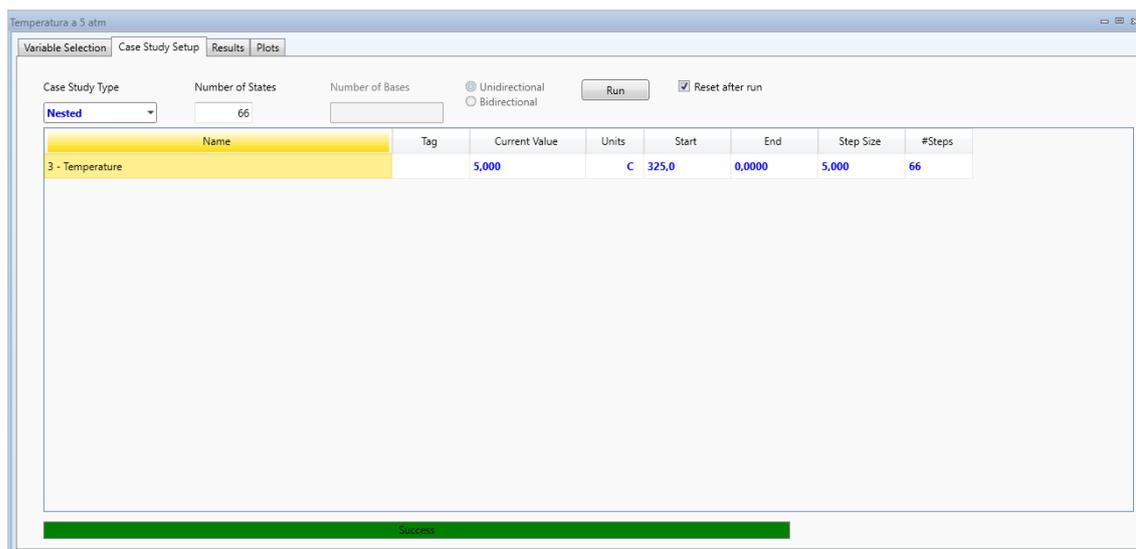


Fig. II. B. 7. Intervalo de temperaturas a estudio para el Case Studies

Tabla II. B. 7. Composiciones de etanol y agua en la corriente 5 para P=5 atm

T (°C)	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$
0	0.0052	0.9943
5	0.0056	0.9944
10	0.0054	0.9946
15	0.0053	0.9947
20	0.0052	0.9948
25	0.0050	0.9950
30	0.0047	0.9953
35	0.0045	0.9955
40	0.0042	0.9958
45	0.0039	0.9961
50	0.0036	0.9964
55	0.0033	0.9967
60	0.0030	0.9970
65	0.0027	0.9973
70	0.0025	0.9975
75	0.0022	0.9978
80	0.0019	0.9981
85	0.0017	0.9983
90	0.0015	0.9985
95	0.0013	0.9987
100	0.0011	0.9989
105	0.0010	0.9990
110	0.0008	0.9992
115	0.0007	0.9993
120	0.0006	0.9994
125	0.0005	0.9995
130	0.0004	0.9996
135	0.0004	0.9996
140	0.0005	0.9995

T (°C)	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$
145	0.0005	0.9995
150	0.0005	0.9995
155	0.0005	0.9995
160	0.0006	0.9994
165	0.0006	0.9994
170	0.0006	0.9994
175	0.0006	0.9993
180	0.0007	0.9993
185	0.0007	0.9993
190	0.0007	0.9992
195	0.0008	0.9992
200	0.0008	0.9991
205	0.0008	0.9991
210	0.0009	0.9990
215	0.0009	0.9990
220	0.0010	0.9989
225	0.0010	0.9988
230	0.0011	0.9987
235	0.0011	0.9986
240	0.0012	0.9985
245	0.0013	0.9984
250	0.0013	0.9982
255	0.0014	0.9980
260	0.0015	0.9978
265	0.0016	0.9975
270	0.0017	0.9972
275	0.0018	0.9969
280	0.0019	0.9965
285	0.0020	0.9959
290	0.0021	0.9953
295	0.0023	0.9945
300	0.0025	0.9935
305	0.0027	0.9923
310	0.0029	0.9906
315	0.0032	0.9882
320	0.0030	0.5117
325	0.0030	0.5092

Tabla II. B. 8. Composiciones de etanol y agua en la corriente 5 para distintas presiones (I)

T (°C)	P= 1.3 atm		P= 2 atm		P= 3 atm	
	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$
0	0.0051	0.9949	0.0054	0.9946	0.0055	0.9945
5	0.0049	0.9951	0.0052	0.9948	0.0054	0.9946
10	0.0046	0.9954	0.0050	0.9950	0.0052	0.9948
15	0.0043	0.9957	0.0047	0.9953	0.0050	0.9950
20	0.0039	0.9961	0.0044	0.9956	0.0048	0.9952

T (°C)	P= 1.3 atm		P= 2 atm		P= 3 atm	
	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$
25	0.0035	0.9965	0.0041	0.9959	0.0045	0.9955
30	0.0031	0.9969	0.0037	0.9963	0.0042	0.9958
35	0.0027	0.9973	0.0034	0.9966	0.0039	0.9961
40	0.0024	0.9976	0.0030	0.9970	0.0036	0.9964
45	0.0020	0.9980	0.0027	0.9973	0.0033	0.9967
50	0.0017	0.9983	0.0023	0.9977	0.0029	0.9971
55	0.0014	0.9986	0.0020	0.9980	0.0026	0.9974
60	0.0012	0.9988	0.0017	0.9983	0.0023	0.9977
65	0.0010	0.9990	0.0015	0.9985	0.0020	0.9980
70	0.0008	0.9992	0.0012	0.9988	0.0017	0.9983
75	0.0006	0.9994	0.0010	0.9990	0.0015	0.9985
80	0.0005	0.9995	0.0009	0.9991	0.0013	0.9987
85	0.0004	0.9996	0.0007	0.9993	0.0011	0.9989
90	0.0003	0.9997	0.0006	0.9994	0.0009	0.9991
95	0.0003	0.9997	0.0004	0.9995	0.0008	0.9992
100	0.0003	0.9997	0.0003	0.9997	0.0006	0.9994
105	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996	0.0005	0.9995
110	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996
115	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996
120	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996
125	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996
130	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996	0.0004	0.9996
135	0.0005	0.9995	0.0005	0.9995	0.0004	0.9995
140	0.0005	0.9995	0.0005	0.9995	0.0005	0.9995
145	0.0005	0.9995	0.0005	0.9995	0.0005	0.9995
150	0.0005	0.9995	0.0005	0.9995	0.0005	0.9995
155	0.0005	0.9994	0.0005	0.9994	0.0005	0.9995
160	0.0006	0.9994	0.0006	0.9994	0.0006	0.9994
165	0.0006	0.9994	0.0006	0.9994	0.0006	0.9994
170	0.0006	0.9994	0.0006	0.9994	0.0006	0.9994
175			0.0006	0.9993	0.0006	0.9993
180			0.0007	0.9993	0.0007	0.9993
185			0.0007	0.9993	0.0007	0.9993
190			0.0007	0.9992	0.0007	0.9992
195			0.0008	0.9992	0.0008	0.9992
200			0.0008	0.9991	0.0008	0.9991
205			0.0009	0.9991	0.0009	0.9991
210			0.0009	0.9990	0.0009	0.9990
215			0.0010	0.9989	0.0009	0.9989
220			0.0010	0.9989	0.0010	0.9989
225			0.0011	0.9988	0.0010	0.9988
230			0.0011	0.9987	0.0011	0.9987
235			0.0012	0.9986	0.0011	0.9986
240			0.0012	0.9984	0.0012	0.9985
245			0.0013	0.9983	0.0013	0.9983
250			0.0014	0.9981	0.0013	0.9982

T (°C)	P= 1.3 atm		P= 2 atm		P= 3 atm	
	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$
255			0.0014	0.9979	0.0014	0.9980
260			0.0015	0.9977	0.0015	0.9978
265			0.0016	0.9975	0.0016	0.9975
270			0.0017	0.9971		
275			0.0018	0.9968		
280			0.0019	0.9963		
285			0.0021	0.9958		
290			0.0022	0.9951		
295			0.0024	0.9942		
300			0.0026	0.9931		

Tabla II. B. 9. Composiciones de etanol y agua en la corriente 5 para distintas presiones (II)

T (°C)	P= 4 atm		P= 6 atm		P= 7 atm	
	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$
0	0.9944	0.0056	0.9943	0.0057	0.0057	0.9943
5	0.9945	0.0055	0.9944	0.0056	0.0056	0.9944
10	0.9946	0.0054	0.9945	0.0055	0.0055	0.9945
15	0.9948	0.0052	0.9946	0.0054	0.0054	0.9946
20	0.9950	0.0050	0.9948	0.0052	0.0053	0.9947
25	0.9952	0.0048	0.9949	0.0051	0.0052	0.9948
30	0.9955	0.0045	0.9951	0.0049	0.0050	0.9950
35	0.9957	0.0043	0.9953	0.0047	0.0048	0.9952
40	0.9960	0.0040	0.9956	0.0044	0.0045	0.9954
45	0.9963	0.0037	0.9959	0.0041	0.0043	0.9957
50	0.9967	0.0033	0.9961	0.0039	0.0040	0.9960
55	0.9970	0.0030	0.9964	0.0036	0.0038	0.9962
60	0.9973	0.0027	0.9967	0.0033	0.0035	0.9965
65	0.9976	0.0024	0.9970	0.0030	0.0032	0.9968
70	0.9979	0.0021	0.9973	0.0027	0.0029	0.9971
75	0.9981	0.0019	0.9976	0.0024	0.0027	0.9973
80	0.9984	0.0016	0.9978	0.0022	0.0024	0.9976
85	0.9986	0.0014	0.9980	0.0019	0.0022	0.9978
90	0.9988	0.0012	0.9983	0.0017	0.0019	0.9981
95	0.9989	0.0011	0.9985	0.0015	0.0017	0.9983
100	0.9991	0.0009	0.9987	0.0013	0.0015	0.9985
105	0.9992	0.0008	0.9988	0.0012	0.0013	0.9986
110	0.9994	0.0006	0.9990	0.0010	0.0012	0.9988
115	0.9995	0.0005	0.9991	0.0009	0.0010	0.9990
120	0.9996	0.0004	0.9993	0.0007	0.0009	0.9991
125	0.9996	0.0004	0.9994	0.0006	0.0008	0.9992
130	0.9996	0.0004	0.9995	0.0005	0.0006	0.9993
135	0.9996	0.0004	0.9996	0.0004	0.0005	0.9995
140	0.9995	0.0005	0.9995	0.0005	0.0005	0.9995
145	0.9995	0.0005	0.9995	0.0005	0.0005	0.9995

T (°C)	P= 4 atm		P= 6 atm		P= 7 atm	
	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$	$x_{5,etanol}$	$x_{5,agua}$
150	0.9995	0.0005	0.9995	0.0005	0.0005	0.9995
155	0.9995	0.0005	0.9995	0.0005	0.0005	0.9995
160	0.9994	0.0006	0.9994	0.0005	0.0005	0.9994
165	0.9994	0.0006	0.9994	0.0006	0.0006	0.9994
170	0.9994	0.0006	0.9994	0.0006	0.0006	0.9994
175	0.9993	0.0006	0.9994	0.0006	0.0006	0.9994
180	0.9993	0.0007	0.9993	0.0007	0.0007	0.9993
185	0.9993	0.0007	0.9993	0.0007	0.0007	0.9993
190	0.9992	0.0007	0.9992	0.0007	0.0007	0.9992
195	0.9992	0.0008	0.9992	0.0008	0.0008	0.9992
200	0.9991	0.0008	0.9991	0.0008	0.0008	0.9992
205	0.9991	0.0008	0.9991	0.0008	0.0008	0.9991
210	0.9990	0.0009	0.9990	0.0009	0.0009	0.9990
215	0.9990	0.0009	0.9990	0.0009	0.0009	0.9990
220	0.9989	0.0010	0.9989	0.0010	0.0010	0.9989
225	0.9988	0.0010	0.9988	0.0010	0.0010	0.9988
230	0.9987	0.0011	0.9987	0.0011	0.0011	0.9987
235	0.9986	0.0011	0.9986	0.0011	0.0011	0.9986
240	0.9985	0.0012	0.9985	0.0012	0.0012	0.9985
245	0.9983	0.0013	0.9984	0.0012	0.0012	0.9984
250	0.9982	0.0013	0.9982	0.0013	0.0013	0.9982
255	0.9980	0.0014	0.9980	0.0014	0.0014	0.9980
260	0.9978	0.0015	0.9978	0.0015	0.0015	0.9978
265	0.9975	0.0016	0.9976	0.0016	0.0015	0.9976
270	0.9972	0.0017	0.9973	0.0016	0.0016	0.9973
275	0.9969	0.0018	0.9969	0.0017	0.0017	0.9969
280	0.9964	0.0019	0.9965	0.0019	0.0018	0.9965
285	0.9959	0.0020	0.9960	0.0020	0.0020	0.9960
290	0.9953	0.0021	0.9953	0.0021	0.0021	0.9954
295	0.9945	0.0023	0.9946	0.0023	0.0023	0.9946
300			0.9936	0.0024	0.0024	0.9936
305			0.9923	0.0026	0.0026	0.9924
310			0.9907	0.0029	0.0028	0.9907
315			0.9883	0.0032	0.0031	0.9884
320			0.5123	0.0030	0.0030	0.5128
325			0.5121	0.0030	0.0030	0.5126
330			0.5092	0.0030	0.0030	0.5092
335			0.5092	0.0030	0.0030	0.5092
340			0.5092	0.0030	0.0030	0.5092
345			0.5092	0.0030	0.0030	0.5092
350					0.0030	0.5092
355					0.0030	0.5092
360					0.0030	0.5092
365					0.0030	0.5092

Por último se presenta en la Fig. II. B. 8 a modo de ejemplo una representación gráfica de la composición de etanol en la corriente **5** expresada en fracción molar frente a las distintas temperaturas para el caso de 5 atm. El programa permite representar una temperatura en concreto, varias o todas juntas y tanto la composición en etanol como la composición en agua de la corriente.

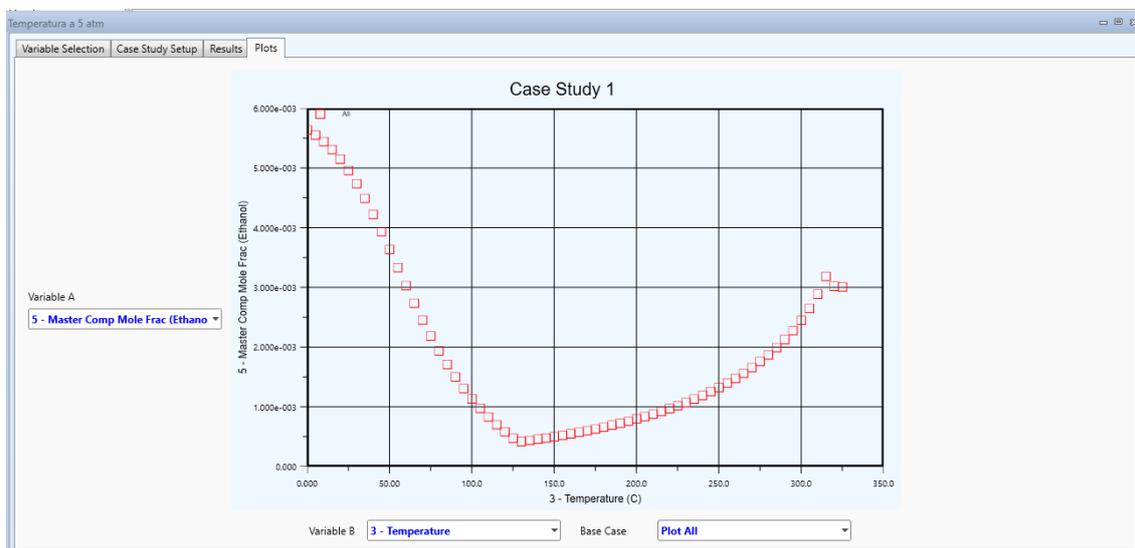


Fig. II. B. 8. Composición en etanol en la corriente **5** para las diferentes temperaturas obtenida mediante HYSYS

C. EQUILIBRIO PARA EL SISTEMA ETANOL-AGUA

Tabla II. C. 1. Datos bibliográficos T-x,y para el sistema etanol-agua a la presión de 4.08 atm
(Gmehling et al, 2014)

T (°C)	x	y
141.8	0.027	0.221
133.2	0.139	0.446
131.2	0.181	0.478
129.0	0.267	0.533
128.9	0.281	0.535
127.2	0.436	0.601
126.3	0.533	0.640
125.0	0.711	0.760
125.0	0.749	0.775
124.6	0.958	0.950
124.7	0.992	0.982

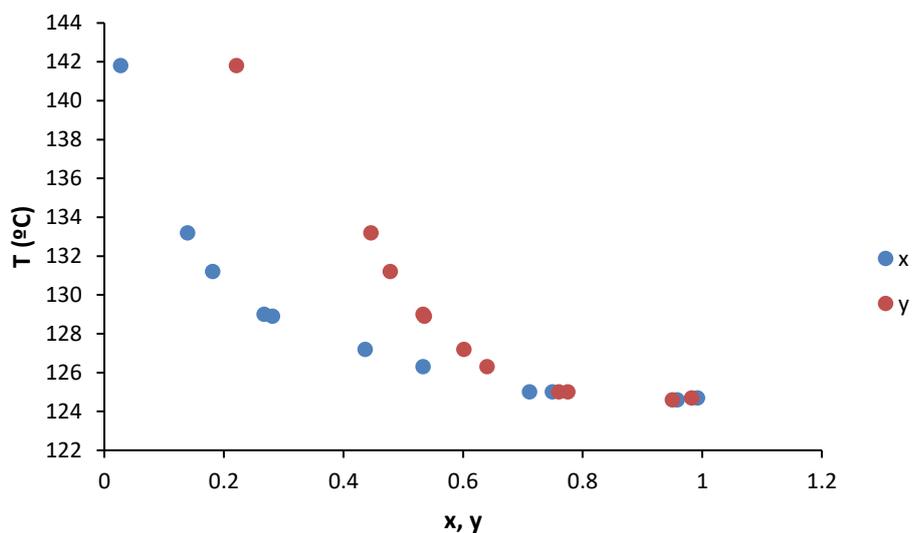


Fig. II. C. 1. Representación gráfica T-x,y para el sistema etanol-agua a 4.08 atm

Tabla II. C. 2. Datos bibliográficos T-x,y para el sistema etanol-agua a la presión de 6.12 atm
(Gmehling et al, 2014)

T (°C)	x	y
151.8	0.053	0.293
150.7	0.055	0.289
146.0	0.136	0.436
145.5	0.149	0.449
142.8	0.225	0.490
140.5	0.323	0.541
140.2	0.331	0.546
137.1	0.628	0.694
137.6	0.734	0.765
136.0	0.769	0.789
135.8	0.982	0.980

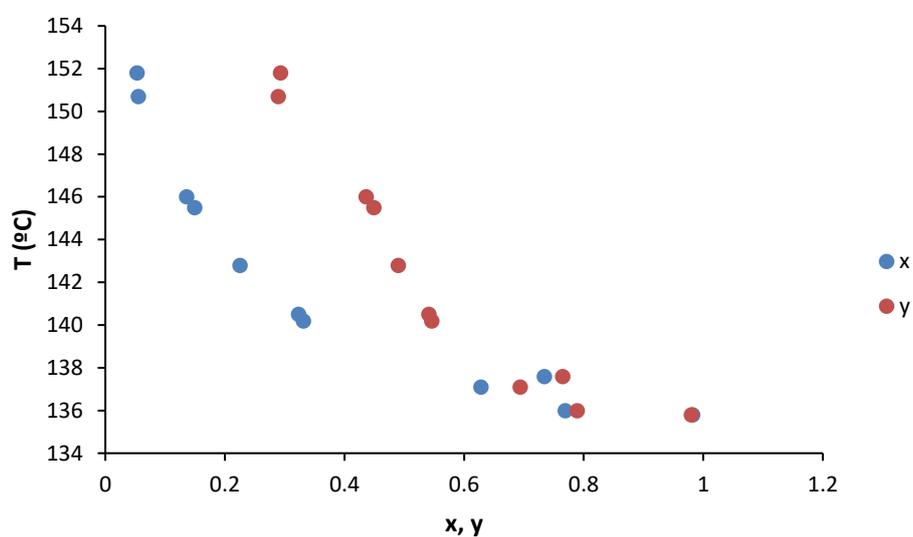


Fig. II. C. 2. Representación gráfica T-x,y para el sistema etanol-agua a 6.12 atm

Tabla II. C. 3. Datos interpolados T-x,y para el sistema etanol-agua a la presión de 5 atm

T (°C)	x	y
146.3	0.039	0.253
141.1	0.101	0.375
137.9	0.161	0.459
136.4	0.214	0.495
135.2	0.256	0.515
133.2	0.385	0.574
132.6	0.442	0.598
130.5	0.674	0.730
130.7	0.742	0.770
129.7	0.873	0.877
129.7	0.987	0.981

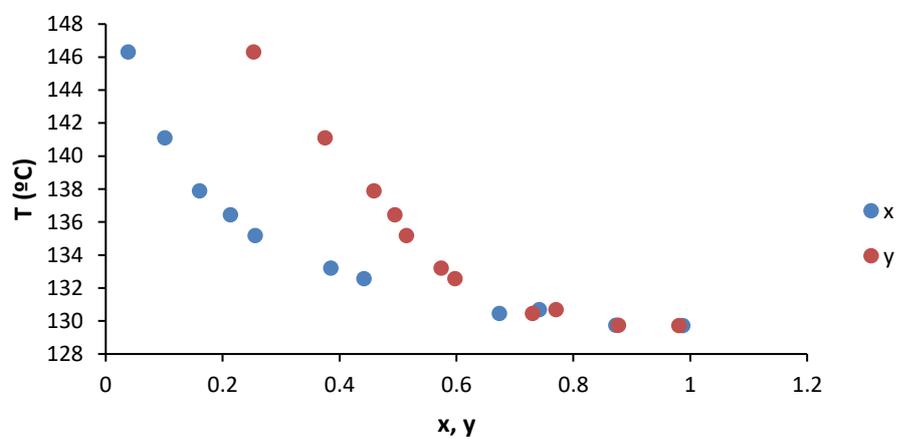


Fig. II. C. 3. Representación gráfica T-x,y para el sistema etanol-agua a 5 atm

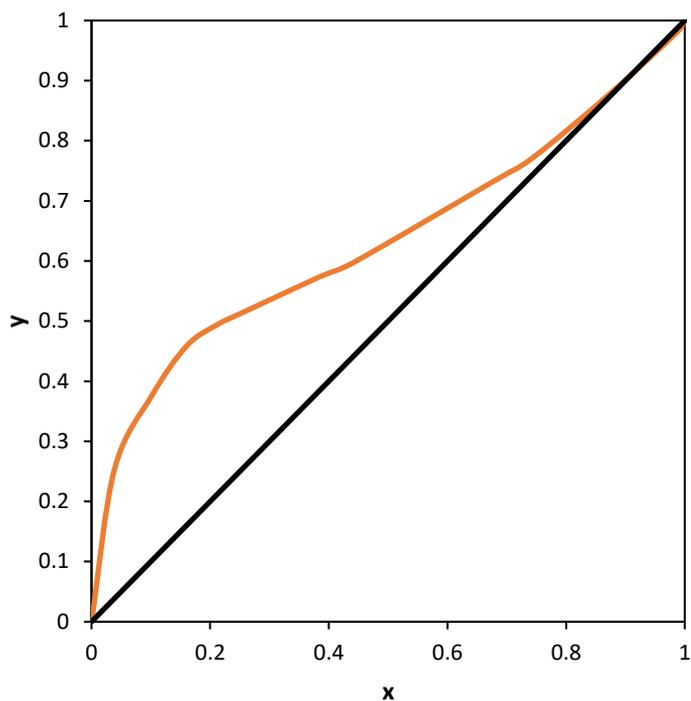


Fig. II. C. 4. Diagrama x-y para el sistema etanol-agua con la curva de equilibrio a 5 atm

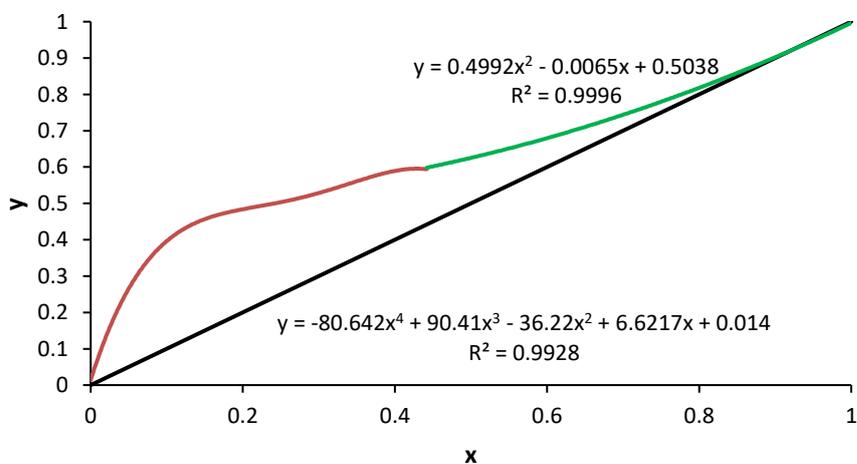


Fig. II. C. 5. Diagrama x-y para el sistema etanol-agua con la curva de equilibrio a 5 atm dividido en dos sectores con sus ajustes correspondientes

D. ALTERNATIVAS DESCARTADAS PARA LA DESTILACIÓN

$$- x_D = 0.87$$

El primer paso será calcular la pendiente de la línea de operación, para lo que habrá que estudiar las condiciones de reflujo mínimo. De nuevo, a composición conocida en el destilado, se pueden calcular las composiciones en el equilibrio, siendo la misma la de la fase líquida, y, una vez obtenidas, calcular la relación de reflujo mínimo.

Con la pendiente de la línea de operación se pueden calcular las composiciones de operación, se debe tener en cuenta que la composición en fase líquida se corresponde con la de equilibrio. Los resultados tanto de las pendientes como de las composiciones para reflujo mínimo y para las condiciones de operación se muestran a continuación en la Tabla II. D. 1 y en la Fig. II. D. 1 se incluye un detalle de las líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación junto con las ecuaciones de las dos primeras.

Tabla II. D. 1. Pendientes y composiciones para reflujo mínimo y condiciones de operación para $x_D = 0.87$

x_{eq}	y_{eq}	$\left(\frac{L}{V}\right)_{min}$	$\left(\frac{L}{V}\right)_{op}$	x_{op}	y_{op}
0.0056	0.0500	0.9487	0.9961	0.0056	0.0090

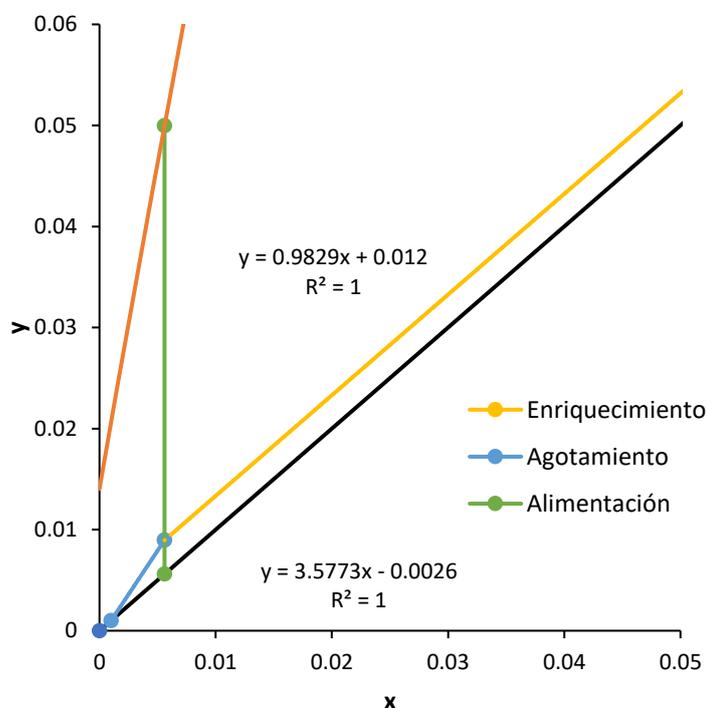


Fig. II. D. 1. Detalle del diagrama x - y con líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación para $x_D = 0.87$

Para estimar los platos teóricos siguiendo el procedimiento explicado anteriormente se utilizan las ecuaciones de la línea de agotamiento, Ecuación [37], y de la línea de enriquecimiento, Ecuación [38].

$$y = 3.5773x - 0.0026 \quad [37]$$

$$y = 0.9829 + 0.012x \quad [38]$$

De nuevo, una vez obtenidos los platos teóricos siguiendo el método de McCabe-Thiele, se calculan los platos reales teniendo en cuenta la eficacia de plato según la heurística 17 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988). Se calculan también el número de huecos entre platos y, con ayuda de la heurística 13 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988) que fija el espaciado entre platos, la altura de la columna. En la Tabla II. D. 2 se muestra un resumen de estos cálculos.

Tabla II. D. 2. Resumen del cálculo de platos y altura de la columna para $x_D = 0.87$

Platos teóricos	Platos reales	Nº huecos	Espaciado (m)	Altura columna (m)
18	23	22	0.635	13.97

Se estiman otros parámetros como las relaciones de reflujo mínima y óptima y los flujos molares de vapor condensado y líquido recirculado. Realizando un balance de materia global total al condensador se determinan los flujos molares de vapor condensado y de líquido recirculado. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla II. D. 3.

Tabla II. D. 3. Resultados de las relaciones de reflujo mínima y óptima y los flujos molares de vapor condensado y líquido recirculado para $x_D = 0.87$

$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min}$	R_{\min}	R_{opt}	L (kmol/h)	V (kmol/h)
0.9487	18.49	19.41	4.45	4.68

De igual forma se realiza un balance de materia global total al calderín y se obtienen los flujos molares de líquido a evaporar y de vapor de retorno a la columna mostrados en la Tabla II. D. 4.

Tabla II. D. 4. Flujos molares de líquido evaporado y vapor de retorno para $x_D = 0.87$

$\frac{L'}{V'}$	L' (kmol/h)	V' (kmol/h)
1.7294	102.16	59.07

Será necesario calcular las condiciones de operación dentro de la columna comenzando por cabezas, donde la presión total del condensador es conocida, 5 atm, y se pueden estimar las presiones parciales de etanol y agua y la temperatura alcanzada por ambos. A continuación se calcularán las condiciones de operación en el calderín, siendo necesario estimar también la presión total en él. Los resultados se presentan en la Tabla II. D. 5 y la Tabla II. D. 6 respectivamente.

Tabla II. D. 5. Condiciones de operación para el condensador para $x_D = 0.87$

$x_{DEtanol}$	x_{DAgua}	$P_{S,Etanol}$ (Pa)	$P_{S,Agua}$ (Pa)	T (K)
0.8700	0.1300	544081	255961	401

Tabla II. D. 6. Condiciones de operación para el calderín para $x_D = 0.87$

P_W (Pa)	$x_{WEtanol}$	x_{WAgua}	$P_{S,Etanol}$ (Pa)	$P_{S,Agua}$ (Pa)	T (K)
522483	0.0010	0.9990	1099204	521906	418

Por último se realizan los cálculos previos al diámetro de la columna, tomando como constantes en toda la columna las condiciones de cabezas. Se calcula el volumen específico de la mezcla del condensador, cuya composición es conocida, para la temperatura de trabajo de cabezas. Será necesario partir de las propiedades de etanol y agua saturados a la temperatura de interés, obtenidas a partir de una interpolación en la bibliografía (Perry and Green, 1985), los datos de la bibliografía se muestran en la Tabla II. 17. Por otra parte, en la Tabla II. D. 7 se pueden ver los resultados de los cálculos necesarios para obtener el flujo volumétrico de vapor y su densidad.

Tabla II. D. 7. Resultados para el cálculo del flujo volumétrico de vapor y su densidad para $x_D = 0.87$

T (K)	V_g (m^3/kg)	PM (kg/kmol)	Q_g (m^3/h)	Q_g (m^3/s)	V_g (ft^3/lb)	ρ_v (lb/ft^3)
401	0.2092	42.42	34.5846	0.0096	3.3516	0.2983

En este punto se acude a la heurística 14 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), de la que se obtiene el valor del factor de vapor, $1.1 (ft/s)\sqrt{lb/ft^3}$, con el se obtiene la velocidad y con ella tanto el área como el diámetro de la columna de destilación. Los resultados para la estimación del diámetro de la columna se muestran en la Tabla II. D. 8.

Tabla II. D. 8. Resultados para la estimación del diámetro de la columna para $x_D = 0.87$

F_s (ft/s) $\sqrt{\text{lb}/\text{ft}^3}$	u (m/s)	A (m ²)	D (m)
1.1	0.61	0.02	0.14

Se acude de nuevo a la bibliografía en busca de la heurística 30 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), en la que se indica que para columnas de diámetros de 3 ft es necesario añadir 4 ft a la altura en la parte superior y 10 ft en la parte inferior. En este caso como es de 0.46 ft el ajuste no es necesario.

- $x_D = 0.80$

Una vez más se parte del cálculo de la pendiente de la línea de operación, previo estudio de las condiciones de reflujo mínimo. Se calculan las composiciones en el equilibrio partiendo de la composición conocida en el destilado y, con ellas, la relación de reflujo mínimo. De igual forma con la pendiente de la línea de operación se calculan las composiciones de operación. Los resultados tanto de las pendientes como de las composiciones para reflujo mínimo y para las condiciones de operación se muestran a continuación en la Tabla II. D. 9 y en la Fig. II. D. 2 se incluye un detalle de las líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación junto con las ecuaciones de las dos primeras.

Tabla II. D. 9. Pendientes y composiciones para reflujo mínimo y condiciones de operación para $x_D = 0.80$

x_{eq}	y_{eq}	$\left(\frac{L}{V}\right)_{min}$	$\left(\frac{L}{V}\right)_{op}$	x_{op}	y_{op}
0.0056	0.0500	0.9442	0.9914	0.0056	0.0125

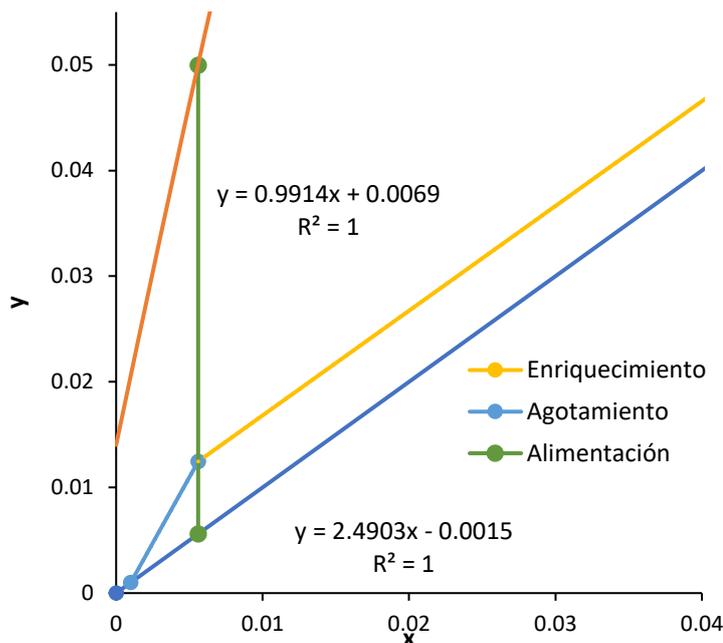


Fig. II. D. 2. Detalle del diagrama x-y con líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación para $x_D = 0.80$

Para estimar los platos teóricos siguiendo el procedimiento explicado anteriormente se utilizan las ecuaciones de la línea de agotamiento, Ecuación [39], y de la línea de enriquecimiento, Ecuación [40].

$$y = 2.4903x - 0.0015 \tag{39}$$

$$y = 0.9914x + 0.0069 \tag{40}$$

De nuevo, una vez obtenidos los platos teóricos siguiendo el método de McCabe-Thiele, se calculan los platos reales teniendo en cuenta la eficacia de plato según la heurística 17 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988). Se calculan también el número de huecos entre platos y, con ayuda de la heurística 13 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988) que fija el espaciado entre platos, la altura de la columna. En la Tabla II. D. 10 se muestra un resumen de estos cálculos.

Tabla II. D. 10. Resumen del cálculo de platos y altura de la columna para $x_D = 0.80$

Platos teóricos	Platos reales	Nº huecos	Espaciado (m)	Altura columna (m)
10	12	11	0.635	6.99

Se estiman otros parámetros como las relaciones de reflujo mínima y óptima y los flujos molares de vapor condensado y líquido recirculado. Realizando un balance de materia global total al condensador se determinan los flujos molares de vapor condensado y de líquido recirculado. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla II. D. 11.

Tabla II. D. 11. Resultados de las relaciones de reflujo mínima y óptima y los flujos molares de vapor condensado y líquido recirculado para $x_D = 0.80$

$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min}$	R_{\min}	R_{opt}	L (kmol/h)	V (kmol/h)
0.9441	16.91	17.75	4.43	4.68

De igual forma se realiza un balance de materia global total al calderín y se obtienen los flujos molares de líquido a evaporar y de vapor de retorno a la columna mostrados en la Tabla II. D. 12.

Tabla II. D. 12. Flujos molares de líquido evaporado y vapor de retorno para $x_D = 0.80$

$\frac{L'}{V'}$	L' (kmol/h)	V' (kmol/h)
2.4904	71.97	28.90

Será necesario calcular las condiciones de operación dentro de la columna comenzando por cabezas, donde la presión total del condensador es conocida, 5 atm, y se pueden estimar las presiones parciales de etanol y agua y la temperatura alcanzada por ambos. A continuación, se calcularán las condiciones de operación en el calderín, siendo necesario estimar también la presión total en él. Los resultados se presentan en la Tabla II. D. 13 y la Tabla II. D. 14 respectivamente.

Tabla II. D. 13. Condiciones de operación para el condensador para $x_D = 0.80$

$x_{D\text{Etanol}}$	$x_{D\text{Agua}}$	$P_{S,\text{Etanol}}$ (Pa)	$P_{S,\text{Agua}}$ (Pa)	T (K)
0.8000	0.2000	566514	267068	403

Tabla II. D. 14. Condiciones de operación para el calderín para $x_D = 0.80$

P_W (Pa)	$x_{W\text{Etanol}}$	$x_{W\text{Agua}}$	$P_{S,\text{Etanol}}$ (Pa)	$P_{S,\text{Agua}}$ (Pa)	T (K)
514899	0.0010	0.9990	1081806	514331	418

Por último se realizan los cálculos previos al diámetro de la columna, tomando como constantes en toda la columna las condiciones de cabezas. Se calcula el volumen específico de la mezcla del condensador, cuya composición es conocida, para la temperatura de trabajo de cabezas. Será necesario partir de las propiedades de etanol y agua saturados a la temperatura de interés, obtenidas a partir de una interpolación en la bibliografía (Perry and Green, 1985), los datos de la bibliografía se muestran en la Tabla II. 17. Por otra parte, en la Tabla II. D. 15 se pueden ver los resultados de los cálculos necesarios para obtener el flujo volumétrico de vapor y su densidad.

Tabla II. D. 15. Resultados para el cálculo del flujo volumétrico de vapor y su densidad para $x_D = 0.80$

T (K)	V_g (m^3/kg)	PM (kg/kmol)	Q_g (m^3/h)	Q_g (m^3/s)	V_g (ft^3/lb)	ρ_v (lb/ft^3)
403	0.2403	40.46	39.6972	0.0110	3.8497	0.2598

En este punto se acude a la heurística 14 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), de la que se obtiene el valor del factor de vapor, $1.1 (ft/s)\sqrt{lb/ft^3}$, con el se obtiene la velocidad y con ella tanto el área como el diámetro de la columna de destilación. Los resultados para la estimación del diámetro de la columna se muestran en la Tabla II. D. 16.

Tabla II. D. 16. Resultados para la estimación del diámetro de la columna para $x_D = 0.80$

$F_s (ft/s)\sqrt{lb/ft^3}$	u (m/s)	A (m^2)	D (m)
1.1	0.66	0.02	0.15

Se acude de nuevo a la bibliografía en busca de la heurística 30 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), en la que se indica que para columnas de diámetros de 3 ft es necesario añadir 4 ft a la altura en la parte superior y 10 ft en la parte inferior. En este caso como es de 0.48 ft el ajuste no es necesario.

- $x_D = 0.75$ (2 columnas)

Se parte del cálculo de la pendiente de la línea de operación, previo estudio de las condiciones de reflujo mínimo, utilizando un factor de 1.5 para pasar de unas condiciones a otras. Los resultados tanto de las pendientes como de las composiciones para reflujo mínimo y para las condiciones de operación se muestran a continuación en la Tabla II. D. 17 y en la Fig. II. D. 3 se incluye un detalle de las líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación junto con las ecuaciones de las dos primeras.

Tabla II. D. 17. Pendientes y composiciones para reflujo mínimo y condiciones de operación para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

x_{eq}	y_{eq}	$\left(\frac{L}{V}\right)_{min}$	$\left(\frac{L}{V}\right)_{op}$	x_{op}	y_{op}
0.7000	0.7438	0.1248	0.1872	0.7000	0.7406

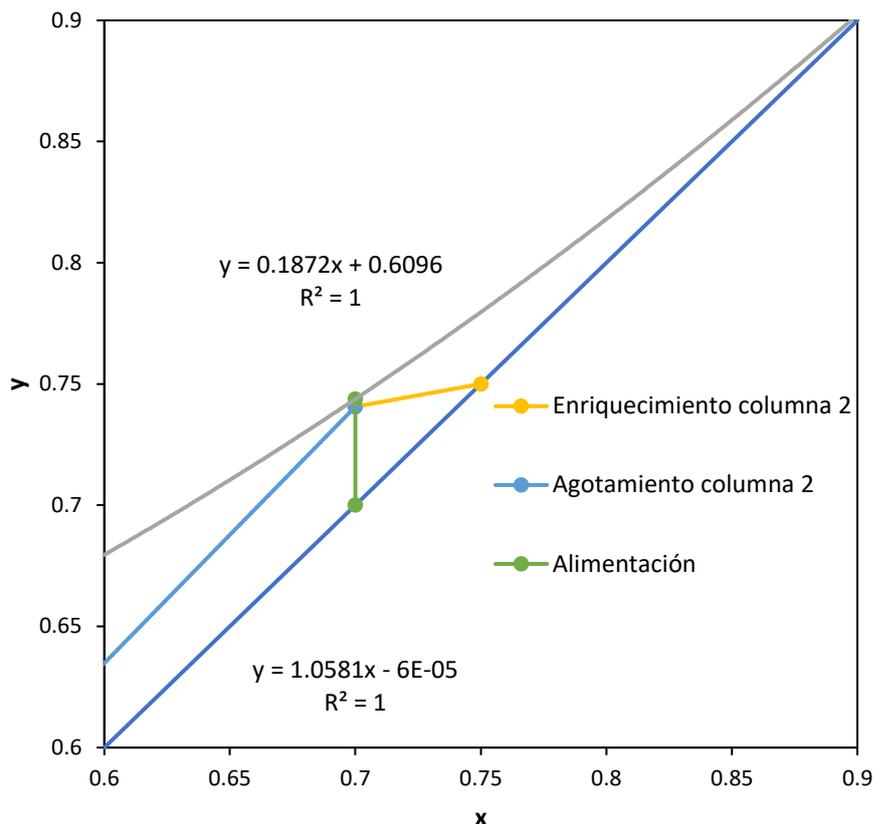


Fig. II. D. 3. Detalle del diagrama x-y con líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

Para estimar los platos teóricos siguiendo el procedimiento explicado anteriormente se utilizan las ecuaciones de la línea de agotamiento, Ecuación [41], y de la línea de enriquecimiento, Ecuación [42].

$$y = 1.0581x - 6 \cdot 10^{-5} \quad [41]$$

$$y = 0.1872x + 0.6096 \quad [42]$$

De nuevo, una vez obtenidos los platos teóricos siguiendo el método de McCabe-Thiele, cuyo detalle en la zona de enriquecimiento se muestra en la Fig. II. D. 4, se calculan los platos reales teniendo en cuenta la eficacia de plato según la heurística 17 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988). Se calculan también el número de huecos entre platos y, con ayuda de la heurística 13 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988) que fija el espaciado entre platos, la altura de la columna. En la Tabla II. D. 18 se muestra un resumen de estos cálculos.

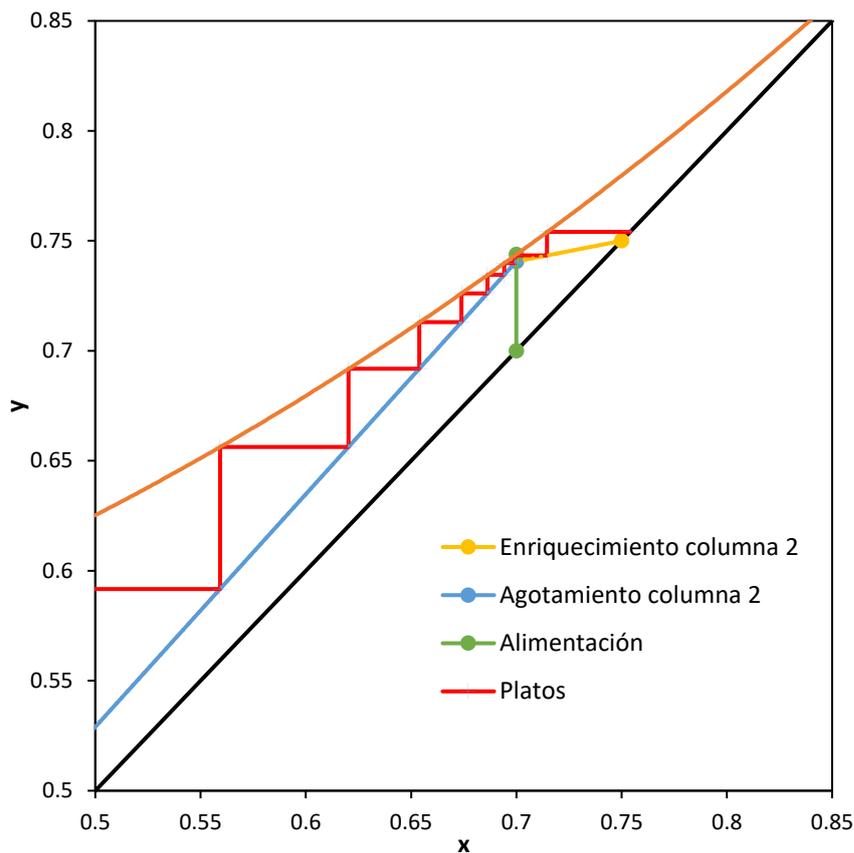


Fig. II. D. 4. Detalle del diagrama x-y en la zona de enriquecimiento para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

Tabla II. D. 18. Resumen del cálculo de platos y altura de la columna para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

Platos teóricos	Platos reales	Nº huecos	Espaciado (m)	Altura columna (m)
12	15	14	0.635	29.17

Se estiman otros parámetros como las relaciones de reflujo mínima y óptima y los flujos molares de vapor condensado y líquido recirculado. Realizando un balance de materia global total al condensador se determinan los flujos molares de vapor condensado y de líquido recirculado. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla II. D. 19.

Tabla II. D. 19. Resultados de las relaciones de reflujo mínima y óptima y los flujos molares de vapor condensado y líquido recirculado para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min}$	R_{\min}	R_{opt}	L (kmol/h)	V (kmol/h)
0.1248	0.14	0.21	0.06	0.32

De igual forma se realiza un balance de materia global total al calderín y se obtienen los flujos molares de líquido a evaporar y de vapor de retorno a la columna mostrados en la Tabla II. D. 20.

Tabla II. D. 20. Flujos molares de líquido evaporado y vapor de retorno para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

$\frac{L'}{V'}$	L' (kmol/h)	V' (kmol/h)
1.0581	0.35	0.33

Será necesario calcular las condiciones de operación dentro de la columna comenzando por cabezas, donde la presión total del condensador es conocida, 5 atm, y se pueden estimar las presiones parciales de etanol y agua y la temperatura alcanzada por ambos. A continuación se calcularán las condiciones de operación en el calderín, siendo necesario estimar también la presión total en él. Los resultados se presentan en la Tabla II. D. 21 y Tabla II. D. 22 respectivamente.

Tabla II. D. 21. Condiciones de operación para el condensador para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

$x_{DEtanol}$	x_{DAgua}	$P_{S,Etanol}$ (kPa)	$P_{S,Agua}$ (kPa)	T (K)
0.7500	0.2500	584	276	404

Tabla II. D. 22. Condiciones de operación para el calderín para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

P_W (kPa)	$x_{WEtanol}$	x_{WAgua}	$P_{S,Etanol}$ (kPa)	$P_{S,Agua}$ (kPa)	T (K)
517	0.0010	0.990	1073	524	427

Por último se realizan los cálculos previos al diámetro de la columna, tomando como constantes en toda la columna las condiciones de cabezas. Se calcula el volumen específico de la mezcla del condensador, cuya composición es conocida, para la temperatura de trabajo de cabezas. Será necesario partir de las propiedades de etanol y agua saturados a la temperatura de interés, obtenidas a partir de una interpolación en la bibliografía (Perry and Green, 1985), los datos de la bibliografía se muestran en la Tabla II. 17. Por otra parte, en la Tabla II. D. 23 se pueden ver los resultados de los cálculos necesarios para obtener el flujo volumétrico de vapor y su densidad.

Tabla II. D. 23. Resultados para el cálculo del flujo volumétrico de vapor y su densidad para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

T (K)	V_g (m^3/g)	PM (kg/kmol)	Q_g (m^3/h)	Q_g (m^3/s)	V_g (ft^3/lb)	ρ_v (lb/ft^3)
404	0.2605	39.05	5.2857	0.0009	4.1730	0.2396

En este punto se acude a la heurística 14 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), de la que se obtiene el valor del factor de vapor, $1.1 \text{ (ft/s)}\sqrt{\text{lb/ft}^3}$, con el se obtiene la velocidad y con ella tanto el área como el diámetro de la columna de destilación. Los resultados para la estimación del diámetro de la columna se muestran en la Tabla II. D. 24.

Tabla II. D. 24. Resultados para la estimación del diámetro de la columna para $x_D = 0.75$ (2 columnas)

$F_s \text{ (ft/s)}\sqrt{\text{lb/ft}^3}$	$u \text{ (m/s)}$	$A \text{ (m}^2\text{)}$	$D \text{ (m)}$
1.1	0.68	0.001	0.04

Se acude de nuevo a la bibliografía en busca de la heurística 30 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), en la que se indica que para columnas de diámetros de 3 ft es necesario añadir 4 ft a la altura en la parte superior y 10 ft en la parte inferior. En este caso como es de 0.17 ft el ajuste no es necesario.

- $x_D = 0.725$ (2 columnas)

Se parte del cálculo de la pendiente de la línea de operación, previo estudio de las condiciones de reflujo mínimo, utilizando un factor de 1.5 para pasar de unas condiciones a otras.

Los resultados tanto de las pendientes como de las composiciones para reflujo mínimo y para las condiciones de operación se muestran a continuación en la Tabla II. D. 25 y en la Fig. II. D. 5 se incluye un detalle de las líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación junto con las ecuaciones de las dos primeras.

Tabla II. D. 25. Pendientes y composiciones para reflujo mínimo y condiciones de operación para $x_D = 0.725$ (2 columnas)

x_{eq}	y_{eq}	$\left(\frac{L}{V}\right)_{min}$	$\left(\frac{L}{V}\right)_{op}$	x_{op}	y_{op}
0.6335	0.7000	0.4097	0.4097	0.6640	0.7000

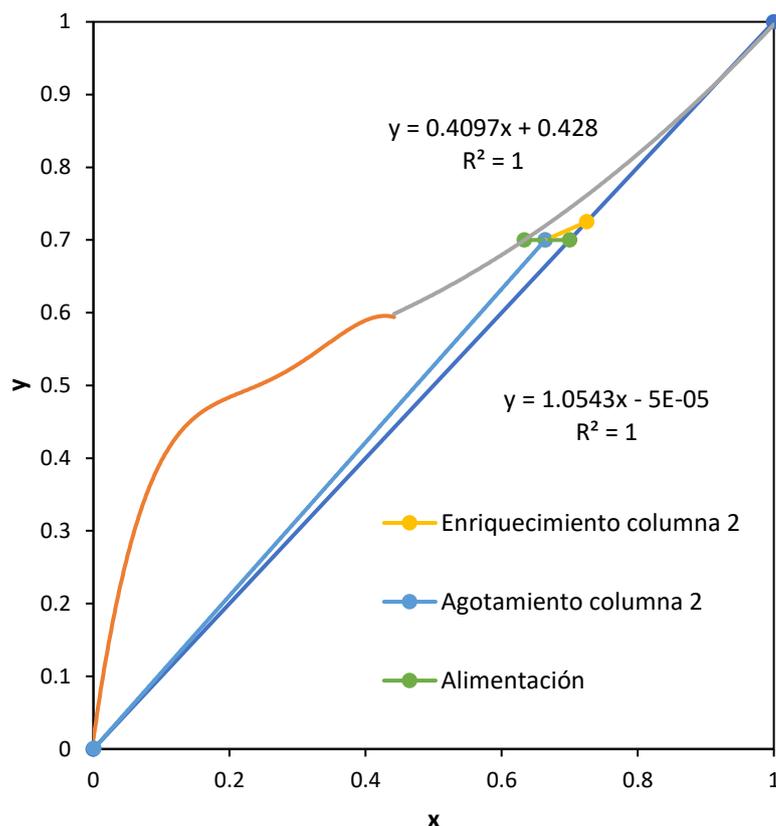


Fig. II. D. 5. Detalle del diagrama x-y con líneas de enriquecimiento, agotamiento y alimentación para $x_D = 0.725$ (2 columnas)

Para estimar los platos teóricos siguiendo el procedimiento explicado anteriormente se utilizan las ecuaciones de la línea de agotamiento, Ecuación [43], y de la línea de enriquecimiento, Ecuación [44].

$$y = 1.0543x - 5 \cdot 10^{-5} \quad [43]$$

$$y = 0.4097x + 0.428 \quad [44]$$

De nuevo, una vez obtenidos los platos teóricos siguiendo el método de McCabe-Thiele, cuyo detalle en la zona de enriquecimiento se muestra en la Fig. II. D. 6, se calculan los platos reales teniendo en cuenta la eficacia de plato según la heurística 17 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988). Se calculan también el número de huecos entre platos y, con ayuda de la heurística 13 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988) que fija el espaciado entre platos, la altura de la columna. En la Tabla II. D. 26 se muestra un resumen de estos cálculos.

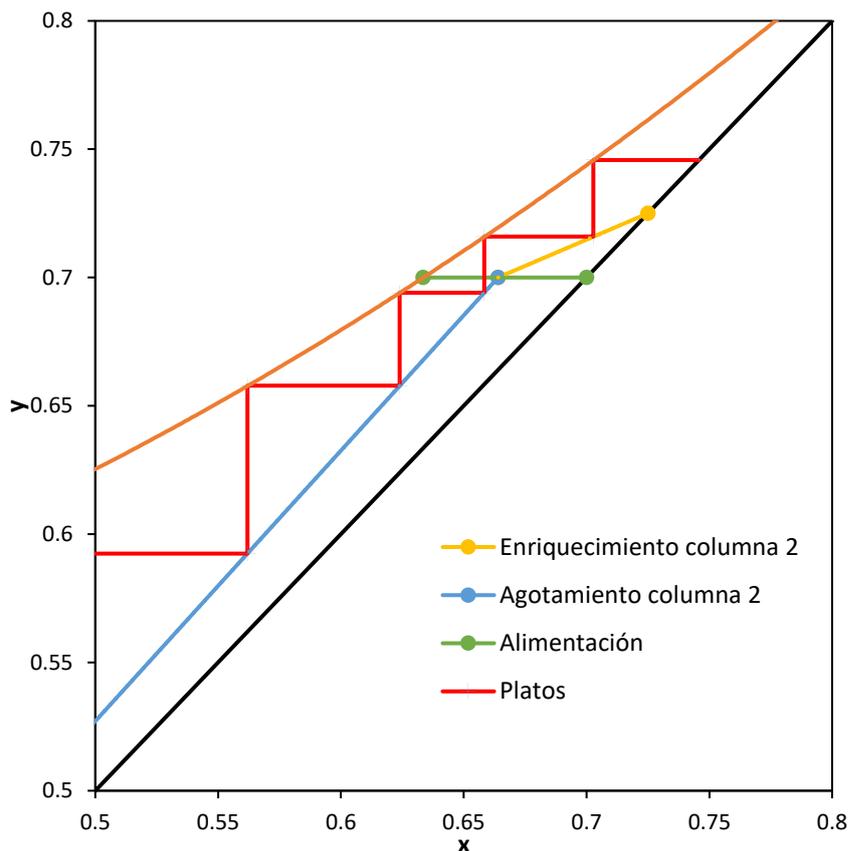


Fig. II. D. 6. Detalle del diagrama x-y en la zona de enriquecimiento para $x_D = 0.725$ (2 columnas)

Tabla II. D. 26. Resumen del cálculo de platos y altura de la columna para $x_D = 0.725$ (2 columnas)

Platos teóricos	Platos reales	Nº huecos	Espaciado (m)	Altura columna (m)
8	10	9	0.635	5.72

Se estiman otros parámetros como las relaciones de reflujo mínima y óptima y los flujos molares de vapor condensado y líquido recirculado. Realizando un balance de materia global total al condensador se determinan los flujos molares de vapor condensado y de líquido recirculado. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla II. D. 27.

Tabla II. D. 27. Resultados de las relaciones de reflujo mínima y óptima y los flujos molares de vapor condensado y líquido recirculado para $x_D = 0.725$ (2 columnas)

$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min}$	R_{\min}	R_{opt}	L (kmol/h)	V (kmol/h)
0.2731	0.38	0.56	0.16	0.43

De igual forma se realiza un balance de materia global total al calderín y se obtienen los flujos molares de líquido a evaporar y de vapor de retorno a la columna mostrados en la Tabla II. D. 28.

Tabla II. D. 28. Flujos molares de líquido evaporado y vapor de retorno para $x_D = 0.725$ (2 columnas)

$\frac{L'}{V'}$	L' (kmol/h)	V' (kmol/h)
1.0543	0.19	0.18

Será necesario calcular las condiciones de operación dentro de la columna comenzando por cabezas, donde la presión total del condensador es conocida, 5 atm, y se pueden estimar las presiones parciales de etanol y agua y la temperatura alcanzada por ambos. A continuación, se calcularán las condiciones de operación en el calderín, siendo necesario estimar también la presión total en él. Los resultados se presentan en la Tabla II. D. 29 y la Tabla II. D. 30 respectivamente.

Tabla II. D. 29. Condiciones de operación para el condensador para $x_D = 0.725$ (2 columnas)

$x_{D,Etanol}$	$x_{D,Agua}$	$P_{S,Etanol}$ (kPa)	$P_{S,Agua}$ (kPa)	T (K)
0.7250	0.2750	593	280	404

Tabla II. D. 30. Condiciones de operación para el calderín para $x_D=0.725$ (2 columnas)

P_W (kPa)	$x_{W,Etanol}$	$x_{W,Agua}$	$P_{S,Etanol}$ (kPa)	$P_{S,Agua}$ (kPa)	T (K)
514	0.0010	0.9990	1052	513	426

Por último se realizan los cálculos previos al diámetro de la columna, tomando como constantes en toda la columna las condiciones de cabezas. Se calcula el volumen específico de la mezcla del condensador, cuya composición es conocida, para la temperatura de trabajo de cabezas. Será necesario partir de las propiedades de etanol y agua saturados a la temperatura de interés, obtenidas a partir de una interpolación en la bibliografía (Perry and Green, 1985), los datos de la bibliografía se muestran en la Tabla II. 17. Por otra parte, en la Tabla II. D. 31 se pueden ver los resultados de los cálculos necesarios para obtener el flujo volumétrico de vapor y su densidad.

Tabla II. D. 31. Resultados para el cálculo del flujo volumétrico de vapor y su densidad para $x_D = 0.725$ (2 columnas)

T (K)	V_g (m^3/kg)	PM (kg/kmol)	Q_g (m^3/h)	Q_g (m^3/s)	V_g (ft^3/lb)	ρ_v (lb/ft^3)
404	0.2699	38.35	4.4553	0.0012	4.3241	0.2313

En este punto se acude a la heurística 14 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), de la que se obtiene el valor del factor de vapor, $1.1 \text{ (ft/s)}\sqrt{\text{lb/ft}^3}$, con el se obtiene la velocidad y con ella tanto el área como el diámetro de la columna de destilación. Los resultados para la estimación del diámetro de la columna se muestran en la Tabla II. D. 32.

Tabla II. D. 32. Resultados para la estimación del diámetro de la columna para $x_D = 0.725$ (2 columnas)

$F_s \text{ (ft/s)}\sqrt{\text{lb/ft}^3}$	$u \text{ (m/s)}$	$A \text{ (m}^2\text{)}$	$D \text{ (m)}$
1.1	0.70	0.002	0.05

Se acude de nuevo a la bibliografía en busca de la heurística 30 para destilación y absorción de gases (Walas, 1988), en la que se indica que para columnas de diámetros de 3 ft es necesario añadir 4 ft a la altura en la parte superior y 10 ft en la parte inferior. En este caso como es de 0.16 ft el ajuste no es necesario.

E. GRÁFICAS PARA ESTIMACIÓN DE COSTES

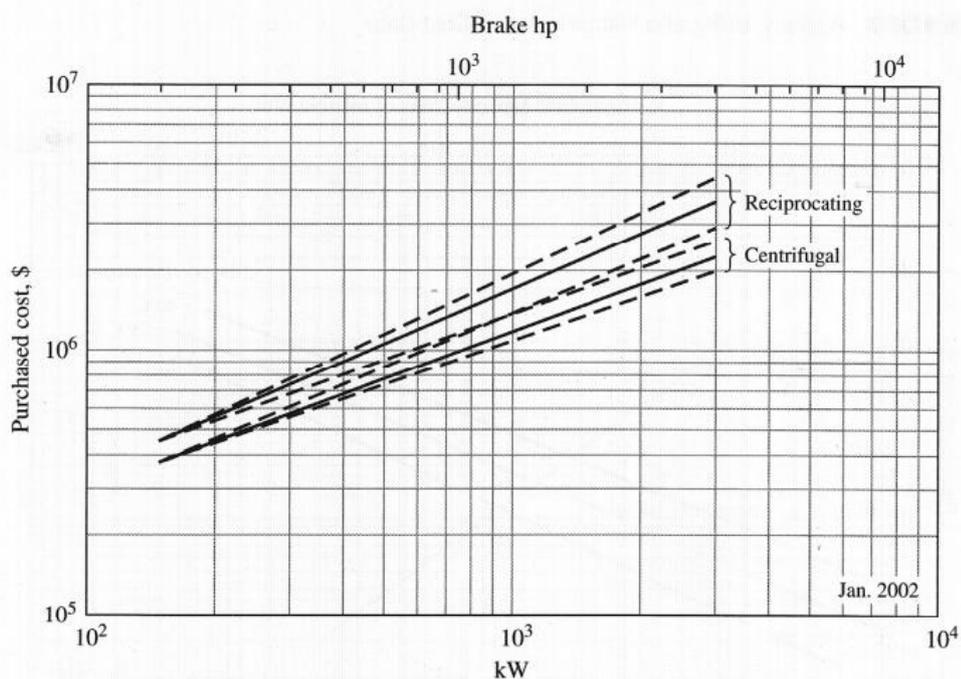


Figure B-5
Purchased cost of compressor plants. (Dotted lines indicate range of costs of the two types of plants.)

Fig. II. E. 1. Estimación de costes para el compresor (*Peters et al, 2003*)

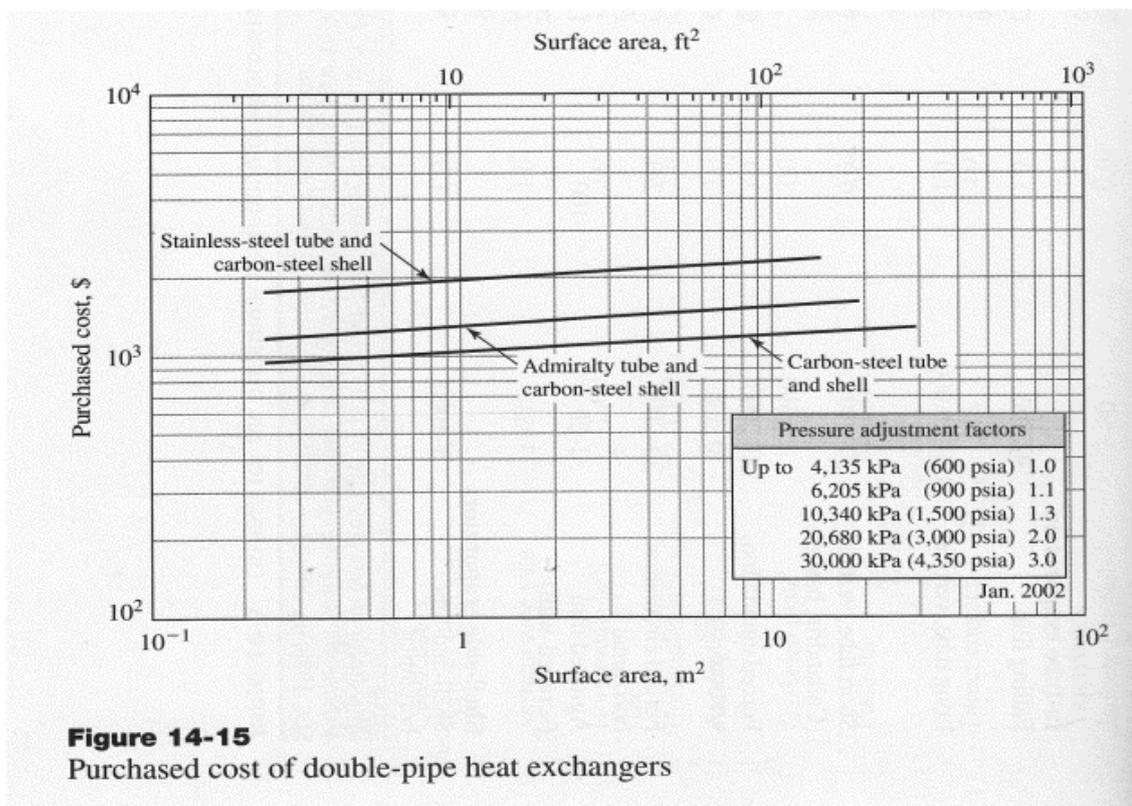


Figure 14-15
Purchased cost of double-pipe heat exchangers

Fig. II. E. 2. Estimación de costes de cambiadores de tubos concéntricos (*Peters et al, 2003*)

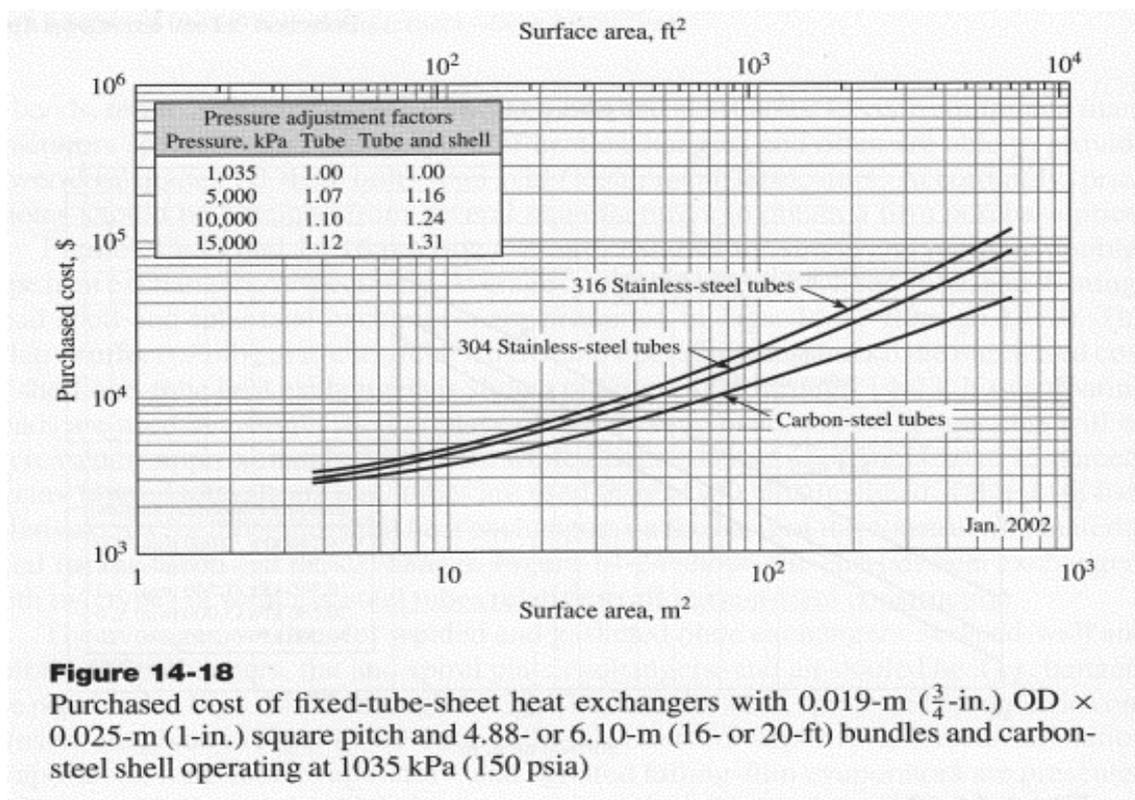


Fig. II. E. 3. Estimación de costes de cambiadores de tubos rectos y carcasa fija (*Peters et al, 2003*)

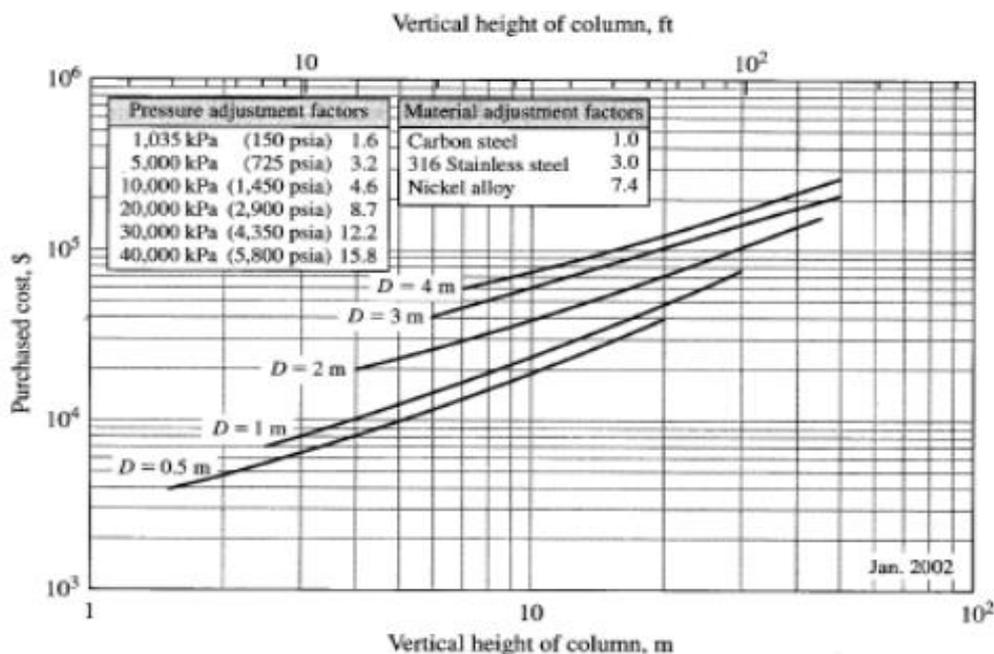


Figure 15-11 Purchased cost of vertical columns. Price does not include trays, packing, or connections.

Fig. II. E. 4. Estimación de costes para la columna de destilación (*Peters et al, 2003*)

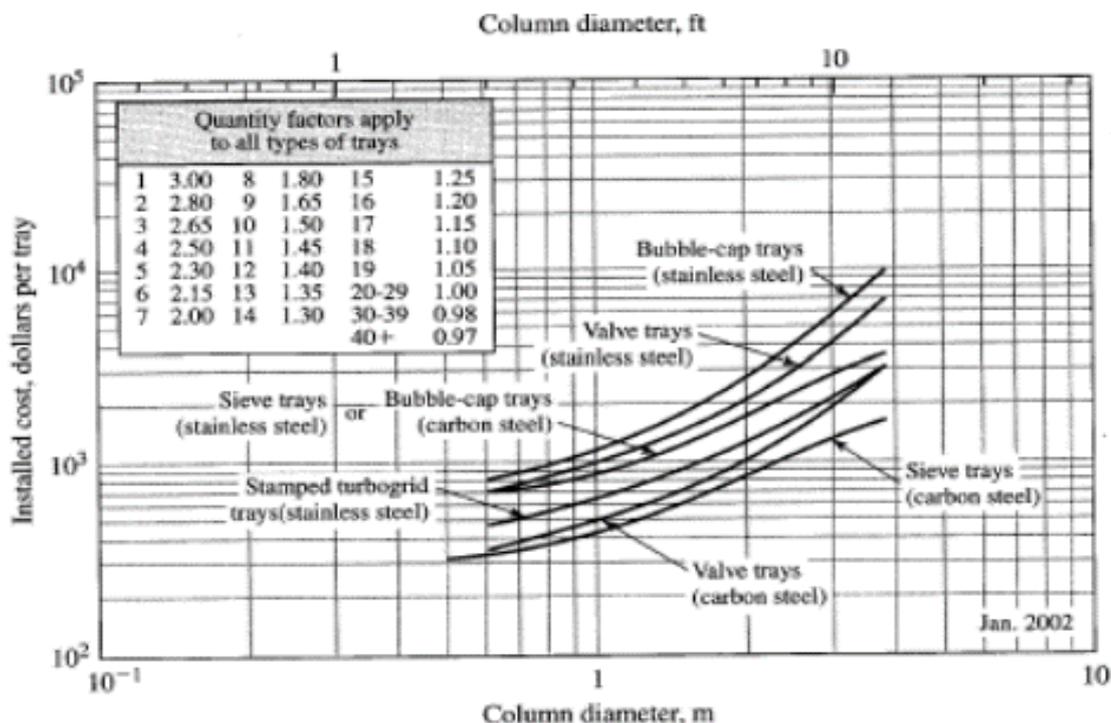


Figure 15-13
 Purchased cost of trays in tray columns. Price includes tray deck, bubble caps, risers, downcomers, and structural-steel parts.

Fig. II. E. 5. Estimación de costes para los platos de la columna de destilación (*Peters et al, 2003*)

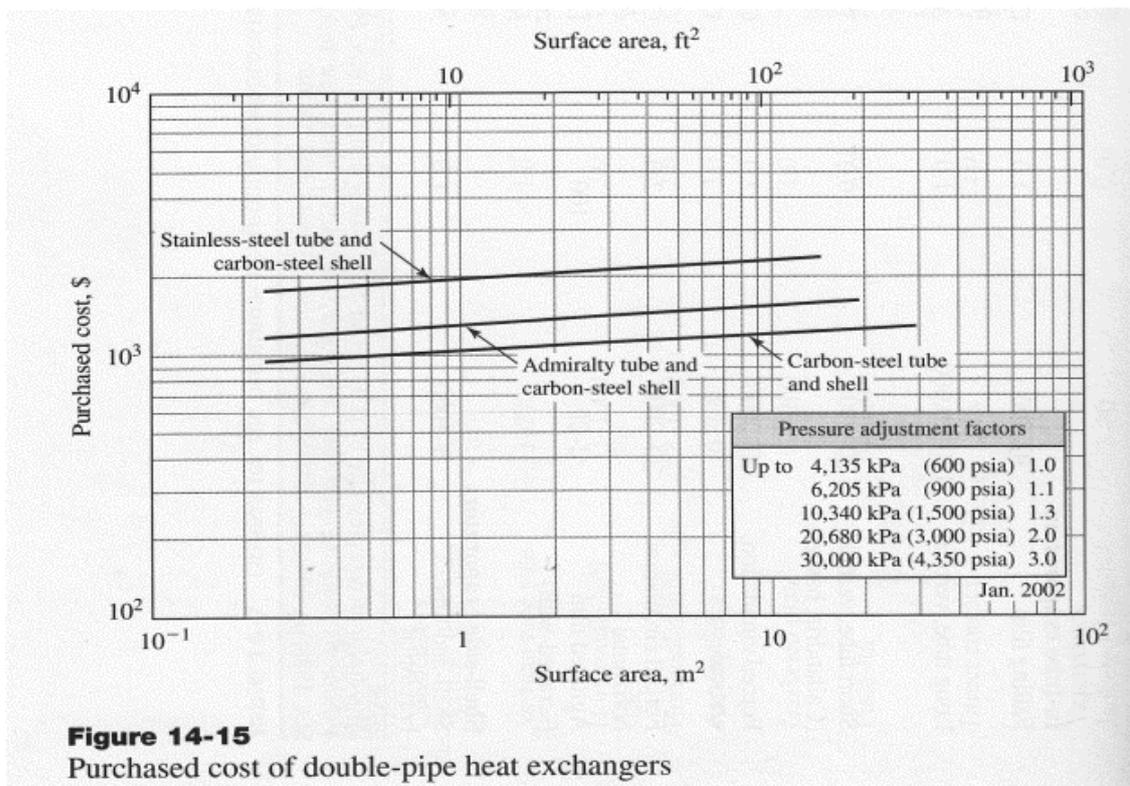


Figure 14-15
 Purchased cost of double-pipe heat exchangers

Fig. II. E. 6. Estimación de costes de cambiadores de tubos concéntricos (*Peters et al, 2003*)