



**industriales**  
etsii

**Escuela Técnica  
Superior  
de Ingeniería  
Industrial**

# **UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA**

**Escuela Técnica Superior de Ingeniería  
Industrial**

## **INGENIERÍA BÁSICA DE UNA PLANTA DE PRODUCCION DE ACETONA**

**TRABAJO FIN DE MÁSTER**

**MÁSTER EN INGENIERIA INDUSTRIAL**



**Universidad  
Politécnica  
de Cartagena**

**Autor: Jose Palazón García**  
**Director: Luis Javier Lozano Blanco**

Cartagena, 3 de octubre de 2019

## Resumen

Este proyecto consiste en la realización de una planta de elaboración de acetona a través de la vía del cumeno, que sufre varias etapas químicas hasta transformarse en acetona y fenol. Se usa método por su atractivo uso en la industria, debido a sus grandes ventajas técnicas y económicas.

Para el estudio de la planta se ha usado una simulación en “chemCAD” para recabar datos relativos a la producción y el diseño de los distintos equipos implicados.

Una vez simulada la planta se procede a realizar una propuesta de integración energética y, finalmente, se realiza un análisis económico para estudiar la rentabilidad de la planta.

## Abstract

This project involves the realization of an acetone processing plant through the cumene pathway, which undergoes several chemical stages to be transformed into acetone and phenol. Method is used for its attractive use in the industry, due to its great technical and economic advantages.

A simulation in "chemCAD" has been used for the study of the plant to collect data relating to the production and design of the various equipment involved.

Once simulated the plant proceeds to make a proposal of energy integration and, finally, an economic analysis is carried out to study the profitability of the plant.

# Índice

<b>1. Objetivo del proyecto</b> .....	1
<b>2. Introducción</b> .....	1
<b>3. Mercado y economía de la acetona</b> .....	2
<b>4. Tecnologías de producción de acetona</b> .....	4
<b>5. Tecnología seleccionada</b> .....	5
<b>6. Cinética y Termodinámica</b> .....	6
6.1. Oxidación .....	6
6.2. Escisión.....	10
6.3. Hidrogenación de alfa-metilestireno .....	12
<b>7. Síntesis del proceso de obtención de acetona</b> .....	13
7.1. Oxidación .....	16
7.2. Concentración .....	18
7.3. Escisión.....	20
7.4. Separación .....	21
7.5. Hidrogenación de alfa-metilestireno .....	23
<b>8. Cálculo y dimensionamiento de equipos</b> .....	25
8.1. Torres de separación .....	25
8.2. Depósitos de separación .....	28
8.3. Intercambiadores de calor y otros equipos.....	33
<b>9. Propuesta de integración energética</b> .....	34
<b>10. Análisis económico</b> .....	39
<b>11. Estudio de rentabilidad</b> .....	48
<b>12. Conclusiones</b> .....	51
<b>13. Referencias bibliográficas</b> .....	52

# Índice de tablas

Tabla 1. Especificaciones de la acetona comercial.....	1
Tabla 2. Propiedades fisicoquímicas de la acetona.....	2
Tabla 3. Tabla experimental de concentraciones experimentales .....	9
Tabla 4. Datos cinéticos de las reacciones secundarias de la escisión.....	12
Tabla 5. Datos cinéticos estimados para la hidrogenación.....	13
Tabla 6. Grupos de contribución seleccionados .....	15
Tabla 7. Datos de caudales de diseño iniciales .....	15
Tabla 8. Valores de diseño de reactores de oxidación.....	17
Tabla 9. Datos calculados de reactores de oxidación .....	17
Tabla 10. Datos reales elegidos para los reactores de oxidación .....	17
Tabla 11. Temperaturas de ebullición de compuestos en la concentración .....	18
Tabla 12. Datos iniciales de diseño de torre de concentración de HPC.....	19
Tabla 13. Datos de diseño de los reactores de escisión.....	20
Tabla 14. Valores de temperaturas de ebullición de compuestos durante la separación.....	21
Tabla 15. Datos de diseño iniciales de torre de separación.....	22
Tabla 16. Datos de diseño iniciales para torre de enriquecimiento de AMS.....	23
Tabla 17. Flujo másico máximo según tamaño de relleno.....	26
Tabla 18. Valores de HETP según el tamaño del relleno.....	27
Tabla 19. Crecimiento del HETP según la viscosidad de la corriente líquida .....	27
Tabla 20. Distribución de alturas en las distintas partes de la columna de relleno 14.....	27
Tabla 21. Distribución de alturas en las distintas partes de la columna de relleno 21.....	28
Tabla 22. Distribución de alturas en las distintas partes de la columna de relleno 30.....	28
Tabla 23. Tiempos de semiresidencia .....	29
Tabla 24. Datos de diseño de los distintos intercambiadores de calor .....	34
Tabla 25. Datos de diseño de bombas .....	34
Tabla 26. Lista de equipos y sus necesidades energéticas.....	35
Tabla 27. Lista de equipos que intervienen en la integración energética .....	36
Tabla 28. Cascada de calor .....	37
Tabla 29. Valores de las constantes para cálculo de costos .....	42
Tabla 30. Coste de los reactores .....	42
Tabla 31. Factores de equipo, material, presión y costes corregidos.....	42
Tabla 32. Datos cálculo de costes de torres y rellenos .....	43
Tabla 33. Datos cálculo de costes de bombas.....	43
Tabla 34. Datos cálculo de costes de compresor y motor .....	43
Tabla 35. Datos cálculo de costes de depósitos.....	44
Tabla 36. Datos cálculo de costes de intercambiadores de calor .....	44
Tabla 37. Lista tipos de costes productivos.....	46
Tabla 38. Coste de materias primas .....	48
Tabla 39. Costes de producción finales.....	48
Tabla 40. Nuevo escenario de precios .....	49
Tabla 41. Costes de producción en escenario favorable.....	49
Tabla 42. Tabla de flujos de caja .....	51

# Índice de figuras

Figura 1. Formula química de la acetona .....	1
Figura 2. Estructura 3D de la acetona .....	1
Figura 3. Consumo mundial de acetona en 2017.....	3
Figura 4. Reacciones del método del ácido acético .....	5
Figura 5. Reacción de oxidación del cumeno .....	6
Figura 6. Reacciones de iniciación.....	6
Figura 7. Reacciones de deshidrogenación de cumeno .....	6
Figura 8. Reacciones de descomposición del ROOH .....	7
Figura 9. Reacciones de propagación.....	7
Figura 10. Reacciones de finalización.....	7
Figura 11. Reacción de formación de DMBA.....	8
Figura 12. Concentración de RH y ROOH frente a tiempo .....	9
Figura 13. Reacción de la acetofenona .....	9
Figura 14. Reacción del peróxido de dicumilo .....	9
Figura 15. Reacciones principales para fase de oxidación .....	10
Figura 16. Reacción de escisión del HPC .....	10
Figura 17. Reacciones secundarias durante la escisión .....	11
Figura 18. Reacción de hidrogenación del AMS.....	12
Figura 19. Diagrama de flujo del proceso de síntesis.....	14
Figura 20. Primer diagrama de decisiones para seleccionar modelo termodinámico.....	14
Figura 21. Segundo diagrama de decisiones para seleccionar modelo termodinámico.....	15
Figura 22. Zona de reacción de oxidación.....	16
Figura 23. Diagrama de equilibrio entre cumeno e hidroperóxido de cumeno .....	18
Figura 24. Diagrama de equilibrio de cumeno y HPC sin azeótropo.....	19
Figura 25. Composición de la corriente de salida de la etapa de escisión.....	21
Figura 26. Diagrama de equilibrio acetona-agua .....	22
Figura 27. Diagrama de equilibrio acetona-agua sin azeótropo .....	22
Figura 28. Composición de corriente de cabeza rica en acetona .....	23
Figura 29. Composición de la corriente de salida de la torre de enriquecimiento de AMS .....	24
Figura 30. Curvas compuestas frías y calientes.....	37
Figura 31. Gran curva compuesta .....	38
Figura 32. Propuesta de integración energética .....	39
Figura 33. Precisión en los distintos métodos de cálculo de costes .....	41

# Índice de ecuaciones

Ecuación 1. Ec. Cinética del HPC .....	7
Ecuación 2. Cálculo de la constante cinética.....	7
Ecuación 3. Conversión de constantes cinéticas.....	8
Ecuación 4. Cálculo de la constante $k'_1$ .....	8
Ecuación 5. Ec. Cinética de desaparición de cumeno .....	8
Ecuación 6. Ecuaciones cinéticas de las reacciones principales de oxidación .....	10
Ecuación 7. Ecuación cinética de la escisión del ROOH .....	11
Ecuación 8. Ecuaciones cinéticas de las reacciones secundarias de la escisión .....	11
Ecuación 9. Ecuaciones cinéticas modificadas .....	12
Ecuación 10. Ecuación de conversión en las ecuaciones cinéticas .....	12
Ecuación 11. Ecuación para el cálculo de la actividad en la hidrogenación.....	13
Ecuación 12. Ecuación para determinar la concentración de hidrogeno disuelto .....	13
Ecuación 13. Flujo másico máximo en torres de platos.....	25
Ecuación 14. Factor para el cálculo del flujo másico máximo.....	25
Ecuación 15. Velocidad máxima de la fase vapor en los depósitos .....	29
Ecuación 16. Factores para depósitos horizontales o verticales.....	29
Ecuación 17. Constante para el cálculo de los factores horizontales y verticales .....	29
Ecuación 18. Área mínima para la fase vapor en el deposito .....	30
Ecuación 19. Área mínima y diámetro mínimo del depósito .....	30
Ecuación 20. Longitud del depósito horizontal.....	30
Ecuación 21. Área mínima de la fase vapor y el diámetro mínimo del depósito vertical.....	31
Ecuación 22. Velocidad máxima y mínima en la tubería de alimentación.....	31
Ecuación 23. Volumen del depósito vertical lleno de líquido .....	32
Ecuación 24. Altura de depósito reservado solo para líquido .....	32
Ecuación 25. Calor transferido en el intercambiador de calor.....	33
Ecuación 26. Costo de los equipos .....	41
Ecuación 27. Coste corregido por presión y material .....	42
Ecuación 28. Factor de presión .....	42
Ecuación 29. Correlación entre coste e índice CEPCI.....	45
Ecuación 30. Coste de inversión inicial .....	45
Ecuación 31. Cálculo costes de producción .....	46
Ecuación 32. Calculo costes de producción con depreciación .....	47
Ecuación 33. Calculo número de trabajadores mínimo por turnos .....	47
Ecuación 34. Cálculo de beneficio bruto.....	50
Ecuación 35. Calculo de beneficio neto antes de impuestos.....	50
Ecuación 36. Calculo beneficio después de impuestos.....	50
Ecuación 37. Calculo flujo de caja .....	50
Ecuación 38. Cálculo de VAN.....	50
Ecuación 39. Cálculo del TIR.....	51

## 1. Objetivo del proyecto

El objetivo de este proyecto es la realización de la ingeniería básica de una planta de producción de acetona de 25000 Tn/año. Este proyecto se realizará usando el simulador comercial "chemCAD". Durante este proyecto se estudiará el proceso productivo de la acetona con los equipos que intervienen durante la producción. Esto permitirá estimar los costes de la inversión inicial que supone una planta de este estilo, así como los costes de producción que conlleva el mismo. Por último, se realizará un estudio de rentabilidad de la planta para comprobar su viabilidad.

## 2. Introducción

La acetona fue descubierta en la Edad Media, pero fue en 1836 cuando fue hallada su estructura química (Fig. 1 y 2) por Jean Baptiste Dumas y Justus von Leibig, la cual es la siguiente:

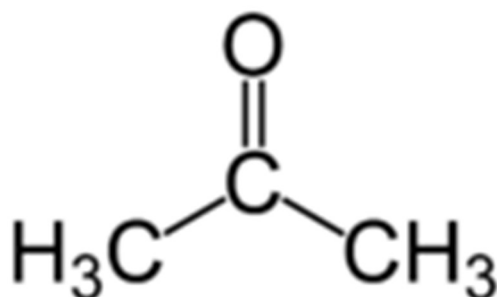


Figura 1. Fórmula química de la acetona

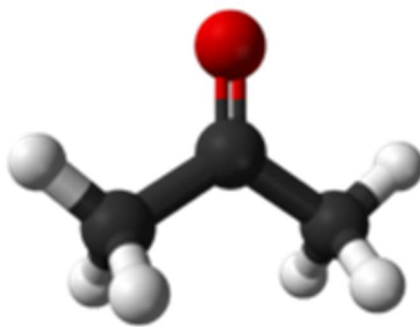


Figura 2. Estructura 3D de la acetona

En su comercialización, la acetona suele tener la siguiente descripción del producto (Tabla 1):

<b>Concentración</b>	99,5%
<b>Peso molecular</b>	58,08
<b>Numero CAS</b>	67-64-1
<b>Numero UN</b>	1090
<b>Código Winkler</b>	AC-0020

Tabla 1. Especificaciones de la acetona comercial

También se pueden observar las propiedades físicas y químicas de la acetona en la siguiente tabla (Tabla 2) sacadas de [1]:



<b>Estado físico</b>	Líquido
<b>Apariencia</b>	Incoloro
<b>Olor</b>	Olor característico dulce y aromático
<b>Temperatura de ebullición</b>	56,2 °C
<b>Temperatura de fusión</b>	-95,4 °C
<b>Densidad</b>	0,791 kg/L a 20 °C
<b>Presión de vapor</b>	180-185 mmHg a 20 °C
<b>Densidad de vapor (Aire)</b>	2,0
<b>Solubilidad</b>	Completamente soluble en agua. Muy soluble en Alcohol etílico, Dietil Eter, Cloroformo y Benceno.

*Tabla 2. Propiedades fisicoquímicas de la acetona*

La acetona es uno de los compuestos químicos más usados en la industria por su variedad de utilidades. Es usado como disolvente para una gran variedad de materiales, entre ellas el plástico u otras sustancias derivadas del petróleo; para disolver químicos inflamables o volátiles y poder garantizar su presurización y su seguridad en el transporte.

También se suele usar como aditivo en maquillajes y en algunos tipos de alimento, como en el pan, que ayuda a fermentar la harina; en la cosmética se usa para desnaturalizar ciertos alcoholes y como componente para dar algún aroma especial.

Otro de los usos es como aditivo para combustible. Al ser muy buen disolvente, es útil para limpiar la estructura del motor, incluso se especula que esta hace que se incrementen los kilómetros de los vehículos, con emisiones más limpias y motores menos exigentes, aunque estas características no están demostradas.

A pesar de esto, la aplicación más extendida de la acetona es la producción industrial de otros compuestos químicos, entre los cuales el más importante es el MMA (metacrilato de metilo). Este se usa para la producción de PMMA (polimetilmetacrilato), el cual tiene unas mejores características de resistencia al rayado, transparencia y resistencia a la intemperie que otros plásticos, por eso es utilizado en la industria del automóvil, construcción, óptica, ...

Después del MMA le sigue el bisfenol A, que se produce por condensación de fenol con acetona en medio ácido. Su aplicación principal es la fabricación de plásticos y resinas epoxi, pero sobretodo policarbonato de plástico. Este es un plástico casi inastillable y por ello se utiliza para una gran variedad de objetos cotidianos como botellas, equipamiento deportivo, electrodomésticos, lentes, ...

### 3. Mercado y economía de la acetona

La acetona ha sido consumida en gran medida desde la Primera Guerra Mundial y ha ido en aumento desde entonces. Debido a este aumento de la demanda se han ido mejorando los métodos de producción para poder cubrir las necesidades demandadas. Actualmente el 96% de la producción mundial de acetona es como subproducto de la producción de fenol.

En 2017 lideraban la demanda mundial China, Estados Unidos y Europa Occidental. De todo lo producido en el mismo año, un 34% fue destinado como disolvente, un 25% para la producción de MMA y en tercer lugar la producción de Bisfenol A. Estos dos últimos sectores están creciendo

continuamente en demanda, lo que supone un mayor aumento de la demanda de acetona como se puede ver en [2].

El mercado de la acetona ha experimentado un aumento en la capacidad de producción mundial, mientras que la demanda de acetona se ha desacelerado en todo el mundo durante la última década. Los principales derivados del mercado de la acetona son las resinas epoxi, el bisfenol A, el policarbonato, MMA y las resinas fenólicas, todas las cuales han visto un aumento en la inversión de nueva capacidad en la última década (Figura 3). Esta tendencia de mayor capacidad, que a veces parecía ser inferior a la demanda mundial del mercado de acetona, ahora ha aumentado la presión en los precios competitivos y el cambio en los flujos comerciales. Los movimientos ascendentes de los precios se han visto significativamente afectados por las tendencias de exceso de capacidad, ya que la acetona y el fenol están estrechamente vinculados.

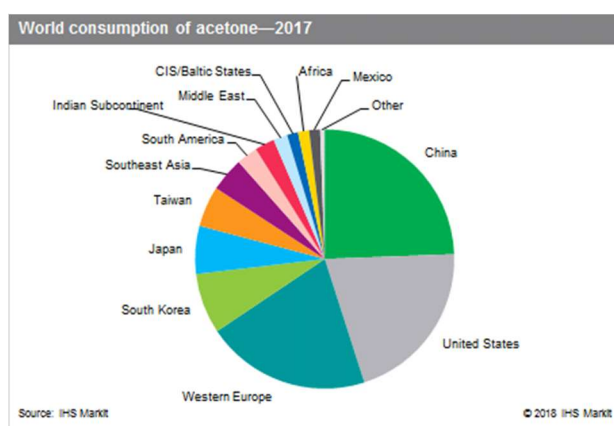


Figura 3. Consumo mundial de acetona en 2017

Según se lee en [3], el aumento de capacidad tiene un impacto significativo en el comercio mundial y particularmente en China. La mayor parte de los volúmenes de importación de China provienen de otras naciones asiáticas, por ejemplo, Japón, Taiwán, Tailandia, Corea del Sur y Singapur. Aproximadamente el 33% de las importaciones del mercado de acetona de China tocaron bases de Europa y los Estados Unidos. La baja demanda del mercado de acetona en Asia y la disminución de la producción local de mayor costo, tanto en EE. UU. Como en Europa, han pasado a ser un importador neto en 2016-17. La reducción continúa de las importaciones chinas y la falta de mercados alternativos viables en Asia significa que se espera que los volúmenes excedentes de Asia lleguen cada vez más a la India, donde solo hay dos proveedores nacionales que actualmente cubren alrededor de una cuarta parte de la demanda.

Los participantes del mercado europeo de acetona continúan citando diferentes expectativas para los próximos años, detrás de los cambios globales en la producción y los flujos comerciales esperados. En general, se espera que la demanda del mercado de acetona sea en gran medida estable en Europa, pero los participantes aún están debatiendo el futuro de la producción y el suministro para Europa. Algunos sostienen que el aumento de la demanda del mercado de acetona podría eliminar las importaciones del mercado europeo de acetona y exacerbar las condiciones regionales. Mientras tanto, otros han comentado que este cambio en la producción de fenol podría alentar a los productores europeos a aumentar las tasas de operación. Si sucede, el mercado de acetona en Europa podría extenderse.

En el mercado de la acetona, los fabricantes se centran en la producción y el suministro de acetona para que la base de consumidores conserve la cuota de mercado. Los participantes clave están aumentando la penetración en el mercado al aumentar su presencia global. Los nuevos

participantes deben estudiar exhaustivamente el mercado de la acetona para penetrar y mantenerse en un mercado sensible a los precios. Los participantes clave están aumentando estratégicamente sus capacidades en todo el mundo a través de la expansión de la planta y la instalación de nuevas plantas de acetona, principalmente en Asia Pacífico, para abordar el creciente mercado regional de acetona.

## 4. Tecnologías de producción de acetona

La producción de acetona se vio en un gran aumento a partir de la Primera Guerra Mundial debido a su uso en la elaboración de cordita, que se usaba en los proyectiles de artillería. Las distintas tecnologías de producción de acetona son las siguientes y se han obtenido de [14] y [19]:

- **Destilación de madera**

Consiste en el calentamiento de madera y recoger los líquidos y gases producidos. Una tonelada de madera puede producir 3 litros de acetona, además de otros subproductos. Esta era la tecnología que se usaba antes de la Primera Guerra Mundial, debido al aumento de la demanda se empezó a buscar otras alternativas.

- **Fermentación de almidón**

Es un método desarrollado por Chaim Weizmann que consiste en la fermentación de almidón de maíz utilizando la bacteria *Clostridium acetobutylicum* en condiciones anaerobias para producir acetona, butanol y etanol. Con este proceso se llegaba a producir 12 toneladas de acetona a partir de 100 toneladas de grano de maíz.

- **Método de oxidación de propileno**

Este método es parte del método de obtención de glicerol implementado por Shell, que consiste en la reacción de alcohol alílico con peróxido de hidrógeno. Para la obtención del alcohol alílico se hace oxidar propileno con catalizadores de cobre para obtener acroleína que se hace reaccionar con alcohol isopropílico (IPA). Este a su vez es formado por la absorción de propileno en presencia de ácido sulfúrico, el cual por hidrólisis se convierte en alcohol isopropílico. La reacción de IPA y acroleína da alcohol alílico y acetona.

- **Método del alcohol isopropílico**

El método del isopropil alcohol tiene dos formas de obtención de la acetona:

- Deshidrogenación

Por esta forma se realiza una deshidrogenación catalizada que da una reacción endotérmica en la que se obtiene acetona y se libera hidrógeno.

- Oxidación

Es una variación al proceso de deshidrogenación que también está catalizada y es endotérmica, en la que se realiza una oxidación del alcohol isopropílico para obtener acetona y agua.

- **Método del ácido acético**

Es un método basado en la descomposición del ácido acético que tiene dos reacciones para su descomposición (Figura 4):

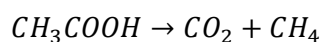
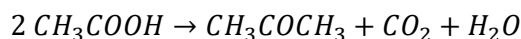


Figura 4. Reacciones del método del ácido acético

A esta descomposición se le añade un catalizador para aumentar la afinidad de la primera reacción frente a la segunda.

- **Método del acetileno**

Este método consiste en mezclar vapor de agua y acetileno sobre catalizadores adecuados como limonita parcialmente reducida por el Hidrógeno, Óxido de Torio o una sal doble de Torio con sales alcalinotérreas.

## 5. Tecnología seleccionada

El método de síntesis de la acetona que se ha seleccionado ha sido el método del cumeno consultando [14] y [20]. Este es el proceso más usado en la actualidad para la obtención de acetona, ya que se obtiene acetona y fenol como productos en una relación en masa 0,6:1.

El proceso se puede resumir en dos etapas bien definidas, la primera es de oxidación donde el cumeno se oxida con oxígeno a hidroperóxido de cumeno (HPC), y posteriormente una etapa de escisión, donde en presencia de un medio ácido el hidroperóxido de cumeno se disocia en fenol y acetona.

Para ser un poco más preciso, en la primera etapa se mezcla el cumeno con aire para que se oxide con el oxígeno presente en él. Este aire debe estar libre de impurezas y debe reaccionar casi todo el oxígeno que se introduce para evitar que la mezcla de oxígeno e hidroperóxido de cumeno cree atmosferas ATEX.

A continuación de la etapa de oxidación, se encuentra una etapa de concentración de HPC, aquí el HPC formado se separa del cumeno que no ha reaccionado y de otros subproductos para poder recircularlo al principio de la etapa de oxidación.

Tras la concentración se encuentra la etapa de escisión o de descomposición del HPC, donde este se separa en fenol, acetona y alfa-metilestireno en presencia de un medio ácido. Después de la escisión se debe neutralizar el medio para suprimir la acidez de la mezcla.

Finalmente se separan los productos obtenidos de la escisión para obtener acetona y fenol de buena calidad.

Adicionalmente, con el alfa-metilestireno producido durante la escisión se lleva a una fase de hidrogenación para volver a producir cumeno que se recircula a la fase de oxidación.

Las ventajas de la elección de este método es que es un proceso en el que se obtienen dos productos de calidad y muy demandados en la industria, y aunque este proyecto está centrado en la producción de acetona, se podría modificar para obtener los dos productos que se obtienen en este proceso.

Otra ventaja es que esta vía trabaja en unas condiciones más suaves que otras vías de producción, y por ello también los costos de maquinaria son más baratos.

Otra ventaja de esta vía es que se pueden producir mucha más cantidad de producto deseado por kilo de materia prima que en el resto de las tecnologías de producción de acetona. A parte es un proceso que continuamente se está mejorando e investigando para ser más eficiente, con la idea de minimizar los subproductos obtenidos y maximizar la conversión de acetona y fenol.

## 6. Cinética y Termodinámica

En este punto se explicará la cinética y termodinámica del método utilizado para la síntesis de la acetona. Para su estudio se dividirá el proceso en sus dos etapas principales de oxidación y escisión, más una etapa adicional de recuperación de cumeno.

Esta etapa consta de una reacción secundaria después de la escisión a partir de AMS (alfa-metilestireno), que por hidrogenación se puede reconvertir en cumeno y recircularlo a la etapa de oxidación para recuperar la máxima cantidad de cumeno posible. La información se ha obtenido de [6], [8], [10] y [16].

### 6.1. Oxidación

En esta etapa se produce una reacción de oxidación del cumeno líquido con el oxígeno contenido en el aire para producir HPC. La reacción de oxidación es la siguiente (Figura 5):

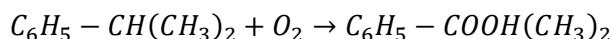


Figura 5. Reacción de oxidación del cumeno

La conversión del cumeno en hidroperóxido de cumeno tiene un mecanismo muy complejo. Es necesario conocer el mecanismo de reacción para poder averiguar la cinética de la misma.

Este mecanismo comienza con la radicalización del cumeno para iniciar la reacción. Para ello se usa un inicializador, que hace que el cumeno (RH) se radicalice formando un radical cumil (R·). Uno de los iniciadores que se usan es el peróxido de dicumilo, que realiza las siguientes reacciones (Figura 6):

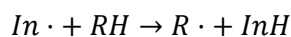
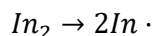


Figura 6. Reacciones de iniciación

Esta radicalización también se puede producir por la descomposición o deshidrogenación del cumeno (Figura 7):

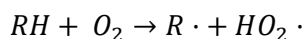
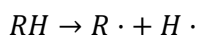


Figura 7. Reacciones de deshidrogenación de cumeno

O por la descomposición del hidroperóxido de cumeno (ROOH) (Figura 8):



Figura 8. Reacciones de descomposición del ROOH

Una vez obtenido el radical de cumil se producen las reacciones de propagación donde se produce el hidroperóxido de cumeno (Figura 9):

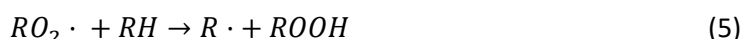


Figura 9. Reacciones de propagación

El cual produce otro radical cumil con el que continúan la reacción de propagación para obtener hidroperóxido de cumeno.

Por último, existen unas últimas reacciones de finalización que se producen con los radicales que quedan libres (Figura 10):



Figura 10. Reacciones de finalización

Como se puede comprobar por las reacciones de iniciación de radicales y por las de propagación, la presencia de hidroperóxido de cumeno hace que se creen más radicales de cumilo para continuar con la propagación de la reacción. Por esto se puede suponer que es una reacción autocatalizada, la cual se confirma según los estudios realizados en [16].

Debido a la formación de HPC en la reacción (5) y su desaparición en la reacción (1) la ecuación cinética (Ec. 1) para la formación de HPC es la siguiente:

$$r_{HPC} = K[ROOH]^{0.5}[RH] - k'_1[ROOH]$$

Ecuación 1. Ec. Cinética del HPC

El primer sumando se obtiene al operar y derivar las ecuaciones cinéticas de las reacciones elementales mostradas desde (1) hasta (8) haciendo las suposiciones de que las velocidades de formación de los radicales presentes son 0, y hace referencia a la velocidad de formación de HPC. El término K es la constante cinética de la reacción resultado igualmente de la derivación de las ecuaciones cinéticas mencionadas. La fórmula de esta variable es (Ec. 2):

$$K = \frac{1.00 * 10^7 \exp\left(-\frac{11800}{RT}\right) p'_{O_2}}{1 + 7.41 * 10^{-5} \exp\left(\frac{9900}{RT}\right) p'_{O_2}}$$

Ecuación 2. Cálculo de la constante cinética

Donde todos los valores se han sacado de los datos experimentales realizados en [16]. El término "p<sub>i</sub>" hace referencia a la presión parcial del componente. La presión parcial de oxígeno suele estar entre un 1-6%.

El segundo sumando hace referencia a la velocidad de desaparición del HPC, proveniente de la reacción (1), cuya constante cinética es  $k'_1$ . Esta constante es la correspondiente a la velocidad específica de la descomposición total del HPC, y está definida por (Ec. 3):

$$k_1 = f k'_1$$

*Ecuación 3. Conversión de constantes cinéticas*

En esta expresión “ $f$ ” hace referencia al ratio de radicales producidos por la descomposición del HPC. Experimentalmente no se ha encontrado ninguna expresión para definir el valor de “ $f$ ”, pero se ha comprobado que el valor de “ $f$ ” no varía significativamente con la temperatura, por lo que se ha tomado un valor medio de 0,4, mientras que la expresión de  $k'_1$  viene definido por la siguiente expresión (Ec. 4):

$$k'_1 = 1.57 * 10^{14} \exp\left(-\frac{24800}{RT}\right)$$

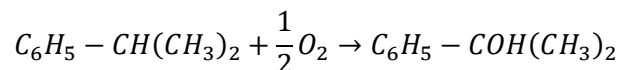
*Ecuación 4. Cálculo de la constante  $k'_1$*

La ecuación de desaparición del cumeno se define de la siguiente manera con las variables nombradas (Ec. 5):

$$-r_{RH} = K[ROOH]^{0,5}[RH] + 2f k'_1[ROOH]$$

*Ecuación 5. Ec. Cinética de desaparición de cumeno*

La formación de HPC también conlleva la formación de otros subproductos, y cuanto mayor es la concentración de HPC, mayor es la de los subproductos. Entre ellos el más abundante es el dimetilfenilcarbinol (DMBA o ROH) que tiene la siguiente reacción (Fig. 11):



*Figura 11. Reacción de formación de DMBA*

Debido a que una concentración creciente de HPC aumenta la formación de subproductos, se debe mantener controlada la concentración de HPC para aumentar la selectividad de esta. Por eso no se puede realizar una conversión mayor del 50% de cumeno en la oxidación como se puede observar en la siguiente gráfica (Fig. 12):

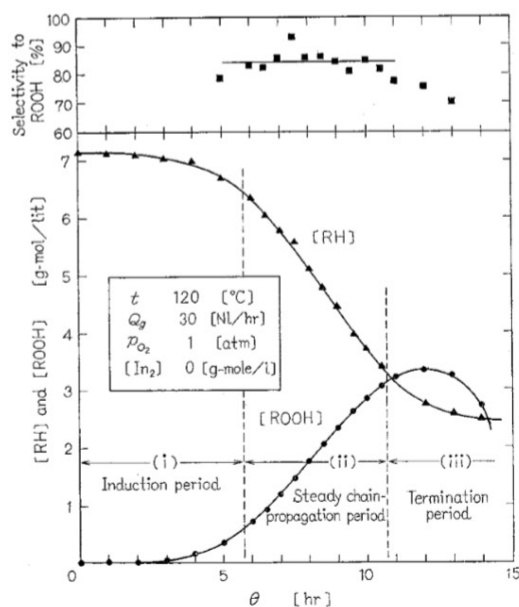


Figura 12. Concentración de RH y ROOH frente a tiempo

Incluso se puede observar, según el gráfico superior, que la selectividad es muy alta, por encima del 90%, para una conversión cercana al 30%.

Existen más subproductos importantes de la oxidación del cumeno y los siguientes más importantes son la acetofenona, que se forma en unas reacciones paralelas a las mostradas anteriormente (Figura 13), y el peróxido de dicumilo (ROOR o DCP) (Figura 14), cuyas reacciones son las siguientes:

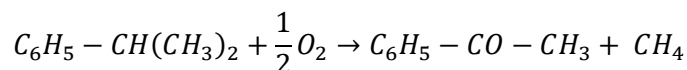


Figura 13. Reacción de la acetofenona

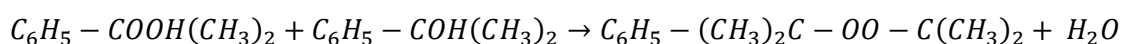


Figura 14. Reacción del peróxido de dicumilo

Pero la formación de estos subproductos es tan baja que no se tiene en cuenta para la reacción, ya que su producción es menor del 1% en conjunto, como se puede comprobar en la siguiente tabla, sacada de [8] donde se realiza un experimento para ver las concentraciones de los distintos compuestos a la salida de una serie de 8 reactores (Tabla 3):

Table 1 - Outlet liquid composition in % w/w

Reactor N.	1	2	3	4	5	6	7	8
RH exp	83.7	74.9	72.4	69.3	66.4	63.6	60.4	57.2
RH calc	81.7	72.3	69.9	67.5	65.2	62.9	60.6	58.3
ROOH exp	9.6	17.9	20.2	23.0	25.6	28.1	31.0	33.8
ROOH calc	11.5	20.1	22.4	24.5	26.6	28.7	30.8	32.8
ROH exp	1.34	1.88	2.06	2.27	2.51	2.79	3.07	3.38
ROH calc	1.49	2.11	2.28	2.46	2.64	2.84	3.04	3.26
R <sub>1</sub> COCH <sub>3</sub> exp	.30	.40	.43	.47	.51	.55	.59	.66
R <sub>1</sub> COCH <sub>3</sub> calc	.34	.48	.51	.55	.59	.63	.67	.72
ROOR exp	.015	.044	.050	.058	.071	.082	.095	.110
ROOR calc	.023	.053	.061	.068	.077	.085	.095	.104

The complement to 100% is due to inert hydrocarbons.

Tabla 3. Tabla experimental de concentraciones experimentales



Al hacer todas estas aproximaciones, se propone que la cinética que ocurre durante la fase de oxidación está regida por las siguientes reacciones (Figura 15) que se han deducido a partir de las ecuaciones de formación y desaparición de HPC y cumeno, respectivamente:

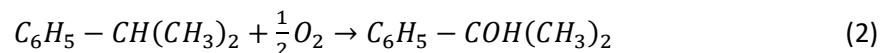
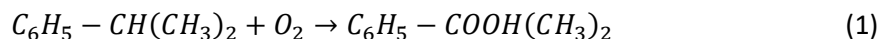


Figura 15. Reacciones principales para fase de oxidación

Así, para la primera, segunda y tercera reacción sus ecuaciones son (Ec. 6), respectivamente:

$$r_1 = K[ROOH]^{0.5}[RH]$$

$$r_2 = 2fk'_1[ROOH]$$

$$r_3 = k'_1[ROOH]$$

Ecuación 6. Ecuaciones cinéticas de las reacciones principales de oxidación

Todas estas reacciones se deben realizar en un medio básico, ya que la presencia de un medio ácido hace que el HPC se descomponga en fenol y acetona. Para ello normalmente estas reacciones se realizan en una emulsión acuosa de sosa para evitar esa descomposición del HPC, ya que la presencia de fenol durante la fase de oxidación inhibe la formación de HPC.

También se tiene controlada la temperatura de la reacción ya que temperaturas por encima de los 125° C producen la descomposición térmica del HPC, además de explosiones o picos de temperatura debido al débil enlace peróxido del HPC.

Así las condiciones de operación serán las siguientes: La temperatura del reactor estará entre los 85-120°C. La presión del reactor estará en torno a los 5 bares, para aumentar la cantidad de oxígeno disuelto en el medio de reacción, y así acelerar la cinética.

Después de la etapa de oxidación existe una etapa de concentración de HPC para separar el cumeno y otros productos del hidroperóxido de cumeno formado, pero no se explicará nada de esta parte ya que no interviene ninguna reacción en ella.

## 6.2. Escisión

El proceso de escisión consiste en la descomposición en medio ácido del HPC para formar acetona y fenol según la siguiente reacción (Fig. 16):

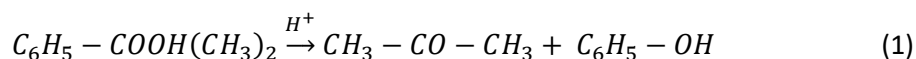


Figura 16. Reacción de escisión del HPC

Para dar carácter ácido al medio suele usarse ácido sulfúrico bastante diluido y manteniendo una concentración de ácido baja para evitar reacciones indeseadas con el sulfúrico y a bajas temperaturas para evitar la descomposición térmica del HPC, que ahora se encuentra a concentraciones muy altas y puede provocar problemas de seguridad debido a las explosiones durante la descomposición térmica.

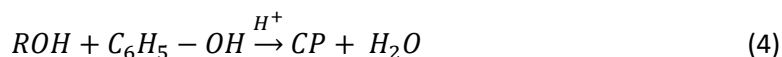
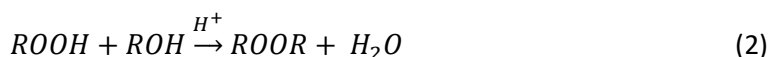
La cinética de esta fase se puede describir en la reacción principal mostrada antes, cuya ecuación cinética de tercer orden es la siguiente (Ec. 7):

$$r_1 = k_1[ROOH]^2[kat]$$

*Ecuación 7. Ecuación cinética de la escisión del ROOH*

Donde “kat” hace referencia al catalizador de la reacción, que en este caso es el ácido sulfúrico para producir la descomposición.

También se producen reacciones secundarias debido a la presencia de un medio ácido y de subproductos procedentes de la fase de oxidación. Aquí la presencia de un medio ácido potencia la formación de DCP, cuya cinética se tendrá en cuenta en esta etapa al ser una reacción más importante. Las reacciones secundarias son las siguientes (Fig. 17):



*Figura 17. Reacciones secundarias durante la escisión*

Donde las ecuaciones cinéticas (Ec. 8) de estas reacciones son las siguientes:

$$r_2 = k_2[ROOH][ROH][kat]$$

$$r_3 = k_3[ROH][kat]$$

$$r_4 = k_4[C_6H_5 - OH][ROH][kat]$$

$$r_5 = k_5[ROOH]^2[kat]$$

*Ecuación 8. Ecuaciones cinéticas de las reacciones secundarias de la escisión*

Como se observa en las reacciones, los subproductos de la etapa son el para-cumilfenol (CP), el peróxido de dicumilo (ROOR), y los dos más importantes que son el alfa-metilestireno (AMS) y su dímero (di-AMS). La importancia del AMS radica en que es un compuesto que, por un proceso de hidrogenación en una etapa auxiliar de reacción, se puede reconvertir en cumeno y, por tanto, poder recircularlo al inicio de la fase de oxidación. El di-AMS se puede separar en sus monómeros para obtener el mismo resultado.

La concentración global de ácido sulfúrico suele estar en un 2%, de forma que se mantendrá una concentración constante de ácido y las ecuaciones cinéticas mostradas quedarían de la siguiente forma (Ec. 9):

$$r_1 = k'_1[ROOH]^2$$

$$r_2 = k'_2[ROOH][ROH]$$

$$r_3 = k'_3[ROH]$$

$$r_4 = k'_4[C_6H_5 - OH][ROH]$$

$$r_5 = k'_5[ROOH]^2$$

Ecuación 9. Ecuaciones cinéticas modificadas

De forma que las nuevas constantes cinéticas están definidas de la siguiente manera (Ec. 10):

$$k'_i = [kat]k_i$$

Ecuación 10. Ecuación de conversión en las ecuaciones cinéticas

Los parámetros cinéticos de las reacciones y sus entalpías están recogidos en la tabla siguiente (Tabla 4):

**Table 1. Parameters of reactions at the cumene hydroperoxide decomposition unit.**

Nº	Major reactions of Stage I	E, kJ/kmol	A	$\Delta H_{sp} \cdot 10^{-5}$ , kJ/kmol
1	cumene hydroperoxide decomposition $\xrightarrow{H^+}$ phenol + acetone	53500	$1.75 \cdot 10^{11}$	- 2.353
2	cumene hydroperoxide+ DMPC $\xrightarrow{H^+}$ di-cumene peroxide + H <sub>2</sub> O	56400	$9.51 \cdot 10^{10}$	0.622
3	DMPC $\xrightarrow{H^+}$ MS + H <sub>2</sub> O	85100	$5.23 \cdot 10^{13}$	1.764
4	DMPC+ phenol $\xrightarrow{H^+}$ CP + H <sub>2</sub> O	82500	$2.58 \cdot 10^{12}$	0.951
5	2 DMPC $\xrightarrow{H^+}$ di-MS + 2 H <sub>2</sub> O	72400	$1.74 \cdot 10^{12}$	1.360

Tabla 4. Datos cinéticos de las reacciones secundarias de la escisión

Las condiciones de operación serán las siguientes: La temperatura del reactor estará entre los 50-90°C por motivos de seguridad para evitar explosiones por la gran concentración de HPC en este punto y la presión será de 8 bares para evitar la vaporización de la acetona, cuya presión de vapor es de 7 bares.

Después de esta etapa vendría la separación de los productos obtenidos, de la que se obtiene la acetona pura para comercializar, pero igual que antes no se ahondara en esta etapa ahora por la ausencia de reacciones químicas.

### 6.3. Hidrogenación de alfa-metilestireno

Durante la escisión de HPC se ha producido AMS. Este subproducto puede ser fácilmente aprovechable para volver a formar cumeno por una reacción de hidrogenación y poder recircularlo al inicio de la fase de oxidación. La información se ha obtenido de [10].

La reacción de hidrogenación del alfa-metilestireno es la siguiente (Fig. 18):

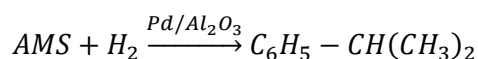


Figura 18. Reacción de hidrogenación del AMS

Como se puede observar, la reacción se lleva a cabo en contacto con un catalizador de paladio al 1% sobre un soporte de alúmina para acelerar la reacción de hidrogenación.

La cinética de la reacción se rige por la siguiente ecuación (Ec. 11):

$$a_c = k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \frac{K_H C_H}{(1 + \sqrt{K_H C_H})^2}$$

*Ecuación 11. Ecuación para el cálculo de la actividad en la hidrogenación*

Donde  $a_c$  hace referencia a la actividad intrínseca de la reacción, por lo que va referida por gramo de catalizador,  $K_H$  hace referencia a la constante de equilibrio de la adsorción del hidrogeno en el catalizador, y  $C_H$  hace referencia a la concentración de hidrogeno disuelto en el medio. Como se puede observar, la reacción es de grado cero respecto del AMS, solo depende de la concentración de hidrogeno disuelto.

Casi todos los valores de los parámetros cinéticos están determinados experimentalmente como se muestra en la siguiente tabla (tabla 5):

	estimated parameter	confidence interval (95%)	
		min	max
$k_0$ (mol·s <sup>-1</sup> ·g <sub>pd</sub> <sup>-1</sup> )	$8.5 \times 10^6$	$3.4 \times 10^6$	$21 \times 10^6$
$E_a$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )	38.7	37.2	40.3
$K_H$ (m <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )	$1.4 \times 10^{-2}$	$0.6 \times 10^{-2}$	$2.2 \times 10^{-2}$

*Tabla 5. Datos cinéticos estimados para la hidrogenación*

Y  $C_H$  puede obtenerse fácilmente, suponiendo que no hay limitaciones en la transferencia de materia, con la siguiente ecuación (Ec. 12):

$$C_H = 1.3 \cdot (0.0145T - 1.6985) \cdot P$$

*Ecuación 12. Ecuacion para determinar la concentración de hidrogeno disuelto*

Donde P es la presión en bares del hidrogeno y T es la temperatura del medio en Kelvin.

Estas ecuaciones se ajustan bien entre 15-75 °C, por lo que las condiciones de operación serán de 40° C de temperatura y 5 bares de presión, para aumentar la concentración de hidrogeno disuelto.

Es importante mencionar que la presencia de agua tiene un efecto muy negativo en la reacción, ya que inhibe fuertemente al catalizador, por lo que se añade un desecante como pretratamiento de la reacción debido al agua generada en la fase de escisión.

Una vez obtenido el cumeno este se recircula uniéndose a la corriente de alimentación y a la recirculación de la fase de concentración de HPC.

## 7. Síntesis del proceso de obtención de acetona

En este punto se describirá las partes del proceso, en cuanto a características y diseño, de las partes que componen el proceso de obtención de la acetona. Para ello se hará uso del software “chemCAD” con el que obtendremos la gran mayoría de los datos y características de los equipos usados en el proceso.

El proceso de obtención de acetona constará de cuatro partes fundamentalmente: oxidación, concentración, escisión y separación. Esta información se ha obtenido de [6], [7], [18] y [20]. En el siguiente diagrama de flujo (Fig. 19) se puede ver representado el método de obtención de la acetona y en el anexo se puede ver el esquema de la planta.

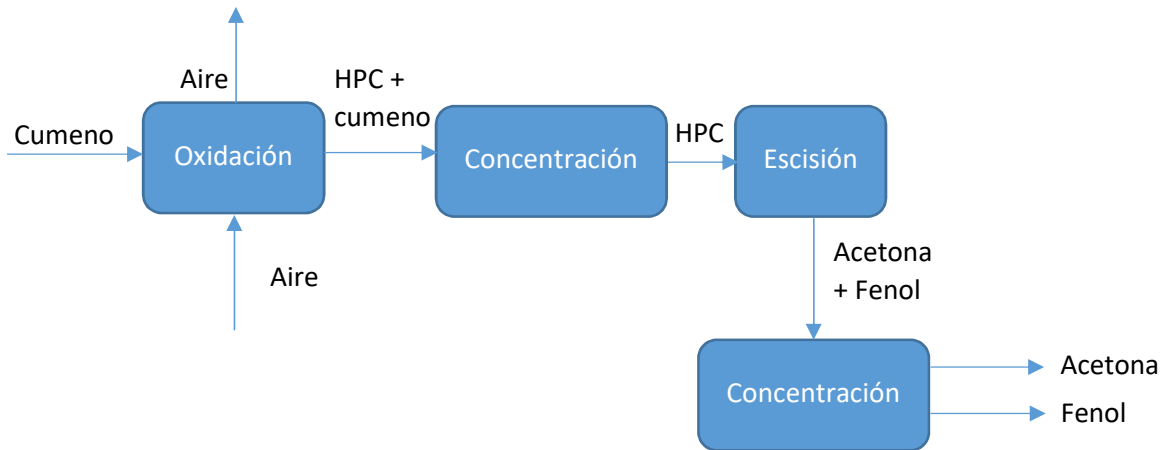


Figura 19. Diagrama de flujo del proceso de síntesis

Aunque este es un diagrama simplificado en cuanto a componentes, ya que hay subproductos a lo largo del proceso que no se representan en este diagrama.

Antes de comenzar a describir el proceso, hay que seleccionar el modelo termodinámico a usar durante la simulación. Para ello se ha hecho uso de [4] para, a partir de los árboles de decisiones, obtener un modelo termodinámico adecuado.

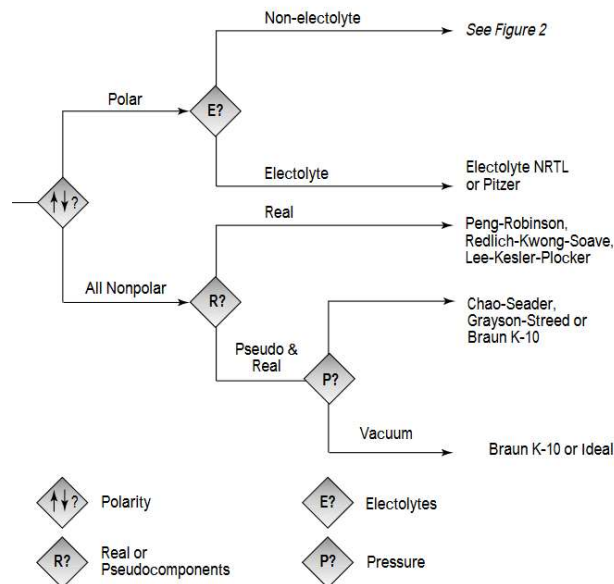


Figura 20. Primer diagrama de decisiones para seleccionar modelo termodinámico

Primero partimos de la base de que no se va a usar ningún compuesto apolar, por lo que se descarta toda la rama inferior (Fig.20). Después se puede observar que no se hace uso de ningún electrolito, por lo que debemos pasar a la siguiente imagen (Fig. 21).

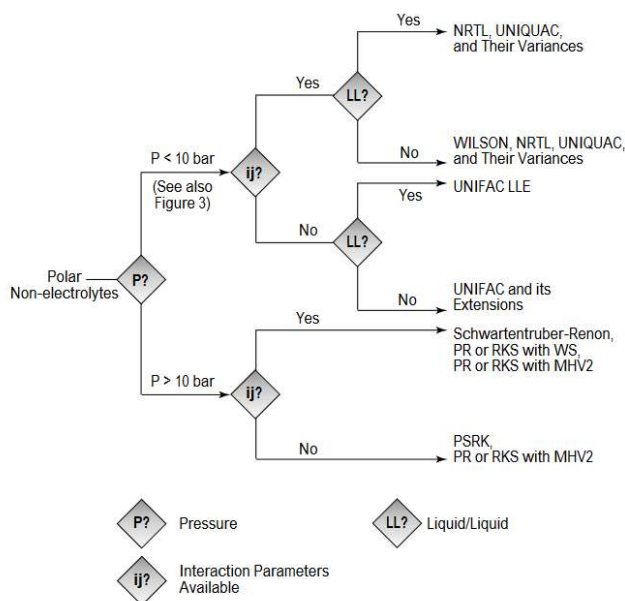


Figura 21. Segundo diagrama de decisiones para seleccionar modelo termodinámico

Continuamos eligiendo el rango de presiones con el que se trabajará en la simulación. Como se ha explicado anteriormente, la máxima presión que se alcanzará será de 8 bares, por lo que se continúa por la rama superior. Una vez aquí se debe comprobar si se poseen datos de los parámetros de interacción entre compuestos o si se pueden obtener. Como no se han podido encontrar, el método resultante es el de UNIFAC (**UNIQUAC Functional-group Activity Coefficients**) y sus variantes.

Una vez elegido el método hay que elegir los grupos funcionales que definen a cada compuesto para que el método pueda hacer un cálculo correcto de las interacciones. En chemCAD están prácticamente todos los compuestos definidos por sus grupos funcionales de UNIFAC, excepto el hidroperóxido de cumeno, que se ha tenido que crear como un compuesto nuevo para poder realizar la simulación. Los valores de los grupos funcionales se han sacado del manual de chemCAD y son los siguientes (Tabla 6):

	Nº DE GRUPOS
<b>GRUPO 1</b>	2
<b>GRUPO 10</b>	5
<b>GRUPO 11</b>	1
<b>GRUPO 43</b>	1

Tabla 6. Grupos de contribución seleccionados

Por último, en la siguiente tabla (Tabla 7) se destacan los datos de partida de la simulación para poder empezar el diseño:

	TEMPERATURA (°C)	CAUDAL (KG/H)
<b>AIRE</b>	120	10000
<b>CUMENO</b>	120	8000
<b>ACETONA</b>	25	2980

Tabla 7. Datos de caudales de diseño iniciales

Antes de empezar cabe destacar que durante la simulación se ha supuesto que la caída de presión en los equipos es nula.

## 7.1. Oxidación

Como se ha explicado anteriormente, durante esta etapa el cumeno se transforma en hidroperóxido de cumeno, además de otros compuestos, a través de una reacción de oxidación con aire.

El aire debe estar libre de impurezas y de  $\text{CO}_2$ , ya que la presencia de dióxido de carbono puede hacer que el agua presente en el medio de reacción se acidifique creando ácido carbónico, lo que baja el pH de la mezcla. Este suceso ya se ha explicado que no interesa por la formación de fenol durante la oxidación, que es un inhibidor de la formación de HPC.

Para plantear la estrategia a seguir en la oxidación se va a repasar las características de esta etapa en cuanto a cinética y termodinámica.

- Se tiene una cinética donde mayor concentración de HPC significa mayor velocidad de formación de la misma, pero al mismo tiempo mayor formación de subproductos no deseados, por lo que habrá que mantener controlada la conversión y concentración de HPC, sabiendo que no se puede sobrepasar el 50% de conversión y que la selectividad más alta se encuentra alrededor del 30% de conversión.
- Se sabe que por temas cinéticos y de seguridad no se puede sobrepasar los  $125^\circ \text{C}$ , ya que supone la descomposición térmica del HPC, lo que conlleva la pérdida del mismo provocando picos de temperatura y explosiones.
- Por último, sabiendo que el contacto entre los reactivos es del tipo gas-líquido, el tipo de reactor idóneo para el contacto es una columna de burbujeo.

Partiendo de estas bases la estrategia a seguir será el uso de cuatro columnas de burbujeo isotérmicas en serie, cada cual a una temperatura menor que la anterior.

El software chemCAD no tiene implementado ningún reactor del tipo columna de burbujeo, por lo que se ha tenido que sustituir por lo más semejante, que ha sido el conjunto de un reactor tanque continuo (CSTR) y un tanque a la salida para separar la fase gaseosa de la fase líquida. El conjunto reactor y tanque queda de la forma que se observa en la siguiente imagen (Fig. 22):

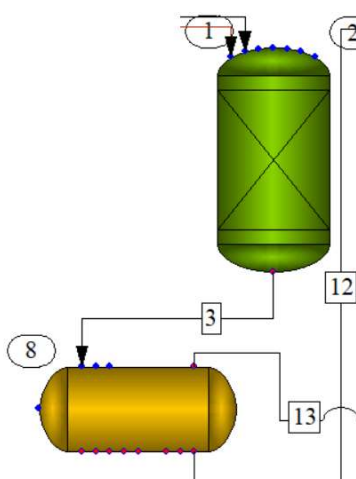


Figura 22. Zona de reacción de oxidación

En una columna de burbujeo la fase gaseosa y la fase líquida salen separadas ya, pero en este tipo de reactor que solo tiene una salida se coloca un tanque para separar las fases. La fase

liquida continua hasta el siguiente reactor. Las fases gaseosas de los cuatro reactores, compuestas principalmente por aire, se unen para ser tratadas. De esta corriente se separa el HPC y cumeno arrastrado por el aire a partir de un evaporador flash a una temperatura de 30°C y se recircula al inicio de la etapa de oxidación. El aire separado se expulsa como venteo hacia la atmósfera.

Los datos de diseño de los reactores son los siguientes (Tabla 8):

	Temperatura (°C)	Conversión
<b>Reactor 1</b>	115	11 %
<b>Reactor 2</b>	105	8 %
<b>Reactor 3</b>	95	9 %
<b>Reactor 4</b>	90	10 %

Tabla 8. Valores de diseño de reactores de oxidación

Donde se obtiene una conversión de cumeno del 33%.

En el primer reactor la temperatura es de 115°C debido a que se exige una mayor conversión al principio y hay muy poco HPC como para que existan problemas de seguridad. En los siguientes reactores se disminuye la temperatura para evitar los problemas con el HPC y se disminuye la conversión para mantener controlada la concentración de HPC y evitar la formación de DMBA, por lo que se aumenta la selectividad.

Con estos datos se obtienen los siguientes volúmenes para los reactores (Tabla 9):

	VOLUMEN (M <sup>3</sup> )
<b>REACTOR 1</b>	2.07941
<b>REACTOR 2</b>	2.41612
<b>REACTOR 3</b>	4.91206
<b>REACTOR 4</b>	7.22133

Tabla 9. Datos calculados de reactores de oxidación

Con estos valores teóricos de volúmenes, se toman valores reales de volúmenes de reactor, por lo que se han tomado los siguientes (Tabla 10):

	VOLUMEN (M <sup>3</sup> )
<b>REACTOR 1</b>	2
<b>REACTOR 2</b>	3
<b>REACTOR 3</b>	5
<b>REACTOR 4</b>	6

Tabla 10. Datos reales elegidos para los reactores de oxidación

Por el cual se recalcula la conversión final de la etapa y se sigue manteniendo una conversión del 30%.

Se puede comprobar que de esta manera la selectividad es bastante alta como ya se había comentado antes, aunque no tan alta como cabía esperar:

$$S_{oxidacion} = \frac{64.89507 + 1.699623 - 11.72994}{200.8584 - 123.926 - 10.80119} = 0.8296 \cong 83\%$$



## 7.2. Concentración

En esta etapa, la mezcla de cumeno, hidroperóxido de cumeno y dimetilfenil carbinol se separan para recircular el cumeno no reaccionado a la etapa de oxidación y el HPC con el DMBA pasen a la etapa de escisión. La información se obtiene de [11].

Para la separación se hará uso de una columna de rectificación. Primero se debe determinar, de los compuestos a separar, quién será el compuesto pesado y quién el ligero. Para ello se debe observar los puntos de ebullición de los tres compuestos principales que son los siguientes (Tabla 11):

TEMPERATURA EBULLICION (°C)		
<b>CUMENO</b>	152,41	Ligero
<b>HIDROPEROXIDO DE CUMENO</b>	169,55	Pesado
<b>DIMETILFENIL CARBINOL</b>	202	-

Tabla 11. Temperaturas de ebullición de compuestos en la concentración

Por lo que se entiende que cumeno saldrá por la cabeza de la torre de rectificación, mientras que el HPC saldrá por el fondo. El DMBA saldrá también por fondo, y eso interesa para la descomposición que se produce en la escisión para dar alfa-metilestireno.

Un problema que se presenta en la separación de esta etapa es que la mezcla cumeno-HPC forma un azeótropo a 5 bares en una fracción molar de 0,7 como se ve en la imagen (Fig. 23).

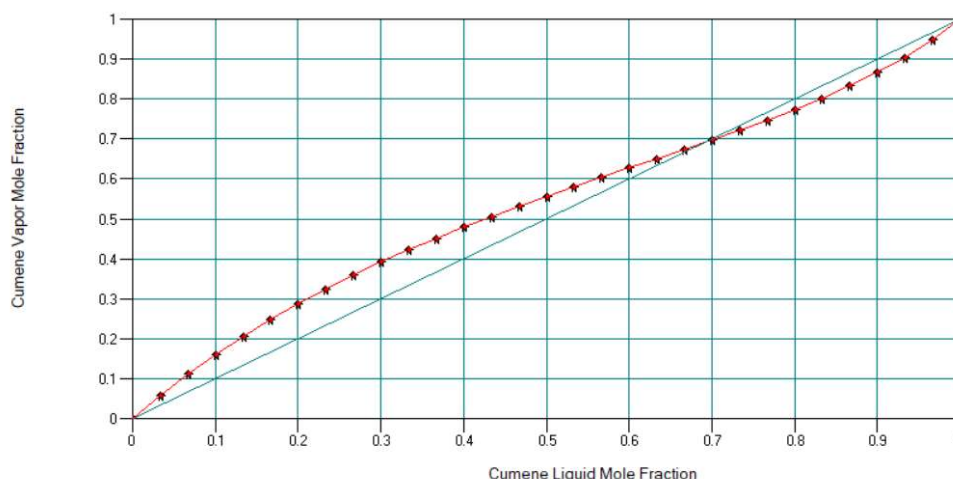


Figura 23. Diagrama de equilibrio entre cumeno e hidroperóxido de cumeno

Es interesante eliminar el azeótropo para poder concentrar lo máximo posible el HPC de la mezcla. Para ello una idea es disminuir la presión de trabajo de la torre, en este caso a una presión absoluta de 0,05 bares, una presión que se puede considerar a vacío. A esta presión el azeótropo desaparece como se ve en la imagen (Fig. 24).

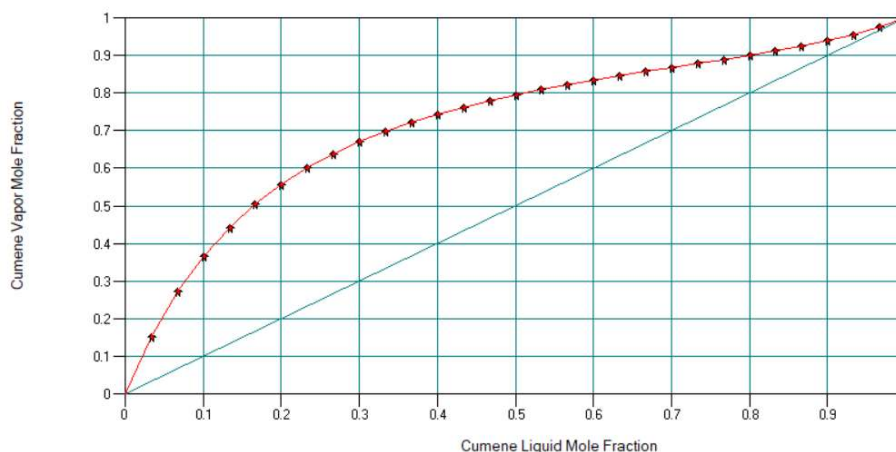


Figura 24. Diagrama de equilibrio de cumeno y HPC sin azeótropo

Cuanto más bajo sea la presión de trabajo mejor será la separación, pero la mezcla estará más vaporizada, puesto que sus puntos de ebullición serán más bajos, por lo que se opta por una presión de 0,5 bares. A esta presión es lo suficientemente baja como para realizar una buena separación, pero no demasiado como para que la mezcla esté totalmente vaporizada.

Para el diseño de la torre se intenta que sea una torre lo más pequeña posible, para ahorrar en espacio y costes. Cabe destacar que la temperatura de la corriente de fondo no debe superar los 100°C para evitar los problemas de seguridad mencionados anteriormente sobre el HPC, y la temperatura de cabeza no debe ser demasiado fría para evitar la solidificación de algunos de los compuestos, ya que el HPC y el DMBA tienen puntos de fusión por encima de los 30°C.

Así se proponen unos datos de diseño para la torre, los cuales se irán modificando en función de las concentraciones de HPC que se obtengan, que son los siguientes (Tabla 12):

<b>CARACTERISTICAS</b>	
<b>RATIO DE REFLUJO (R/D)</b>	1.01
<b>TIPO DE CONDENSADOR</b>	Condensador total
<b>NUMERO DE PLATOS</b>	20
<b>PLATO DE ALIMENTACION</b>	10
<b>FACTOR DE INUNDACION</b>	70%

Tabla 12. Datos iniciales de diseño de torre de concentración de HPC

Con estos datos se podía llegar a obtener unos buenos valores de concentración de HPC por fondo, pero aparecía el inconveniente de que la temperatura de la corriente de cabeza salía a una temperatura inferior a los 0°C lo que suponía que aparecieran cristales de HPC y DMBA por congelación, lo que hacía que esta idea fuera inviable. Así se proponen varias los datos de diseño anteriores con las siguientes premisas:

- Se cambia de un condensador total a un condensador parcial, para que la temperatura no baje tanto en cabeza.
- Se cambia el plato de alimentación al plato número 5 para conseguir una mejor separación al haber una mejor transferencia en el contacto entre la corriente líquida y la corriente de vapor.

Con estas premisas se consigue llegar hasta una concentración por fondo del 83% en fracción molar, separándose prácticamente todo el cumeno del HPC. De esta forma también se

consiguen unas temperaturas en cabeza y en fondo dentro de los rangos permitidos de temperaturas.

La corriente de salida de cabeza, rica en cumeno y con trazas de HPC se recircula al inicio de la etapa de oxidación, ya que hay mucho cumeno que no ha reaccionado.

### 7.3. Escisión

En la etapa de escisión el hidroperóxido de cumeno concentrado proveniente de la etapa de concentración se descompone en presencia de un medio ácido en fenol, acetona y otros subproductos. En esta etapa el diseño es bastante sencillo, el reactor se seguirá tomando como un reactor CSTR, ya que la concentración de HPC es muy grande y las reacciones producidas son exotérmicas, por lo que un reactor CSTR es una buena forma de poder refrigerar el calor desprendido por la reacción.

Es preferible que todo el HPC, o prácticamente todo, reaccione. Para ello se buscará una conversión del 99% o mayor a la salida del reactor. Debido a que conforme aumenta la concentración de HPC también aumenta la formación de cumilfenol, la etapa se dividirá en dos reactores CSTR, así se disminuye la formación de la misma, controlando al mismo tiempo la temperatura de reacción.

Las condiciones de diseño de los dos reactores de escisión son las siguientes (Tabla 13):

<b>CARACTERISTICAS</b>	
<b>TEMPERATURA</b>	30°C
<b>PRESION</b>	3 BAR
<b>CONVERSION</b>	99,9%

<b>CARACTERISTICAS</b>	
<b>TEMPERATURA</b>	60°C
<b>PRESION</b>	3 BAR
<b>CONVERSION</b>	99,9%

Tabla 13. Datos de diseño de los reactores de escisión

Estas condiciones están planteadas por las condiciones cinéticas explicadas anteriormente, una temperatura baja por la alta cantidad de HPC, que puede provocar problemas de seguridad por explosiones y una presión de 3 bares para evitar la vaporización de la acetona, cuya presión de vapor es de 1,2 bares a la temperatura de 60°C

Para estos datos de diseño se obtiene un volumen de 18,3 litros en total, por lo que se toma un volumen de 10 litros para cada uno en el diseño. Así a la salida del reactor se tiene una conversión del 99,989% obteniéndose la siguiente composición en la salida de la misma (Fig. 25):

Temp C	60
Pres bar	3
Vapor Fraction	0
Enthalpy MJ/h	-23906.47
Total flow	9925.115
Total flow unit	kg/h
Comp unit	kg/h
Cumene	8.471767e-014
HPC	0.9313163
2-Phenyl-2-Propa	0.2494264
Oxygen	0
Nitrogen	0
Phenol	5023.792
Acetone	3201.572
Alpha-Methylstyr	1012.845
Water	200.2065
Dicumyl Peroxide	7.133358
Hydrogen	0
2,4-Diphenyl-4-M	70.20055
P-Cumylphenol	408.1859

Figura 25. Composición de la corriente de salida de la etapa de escisión

Como se puede observar se obtiene una gran cantidad de fenol y acetona de esta forma, minimizando la formación de cumilfenol, aunque este subproducto no afecta para la posterior separación de la acetona.

#### 7.4. Separación

En esta etapa se va a separar la acetona del resto de componentes, es decir, se va a purificar la acetona para su posterior comercialización. La información se obtiene de [11]. Para ello se vuelve a hacer uso de una torre de rectificación donde obtendremos acetona muy purificada por cabeza, ya que es el componente ligero, y el resto de productos, que son más pesados, por fondo como se ve en la siguiente tabla (Tabla 14):

TEMPERATURA EBULLICION (°C)		
<b>ACETONA</b>	56,25	Ligero
<b>FENOL</b>	181,84	Pesado
<b>ALFA-METILESTIRENO</b>	165,5	-

Tabla 14. Valores de temperaturas de ebullición de compuestos durante la separación

De primeras, hay que mencionar que la purificación de la acetona no tiene ningún problema para separarse de todos los componentes de la mezcla excepto del agua, cuya separación será difícil debido a la formación de un azeótropo de acetona-agua como se ve puede observar en el siguiente diagrama (Fig. 26):

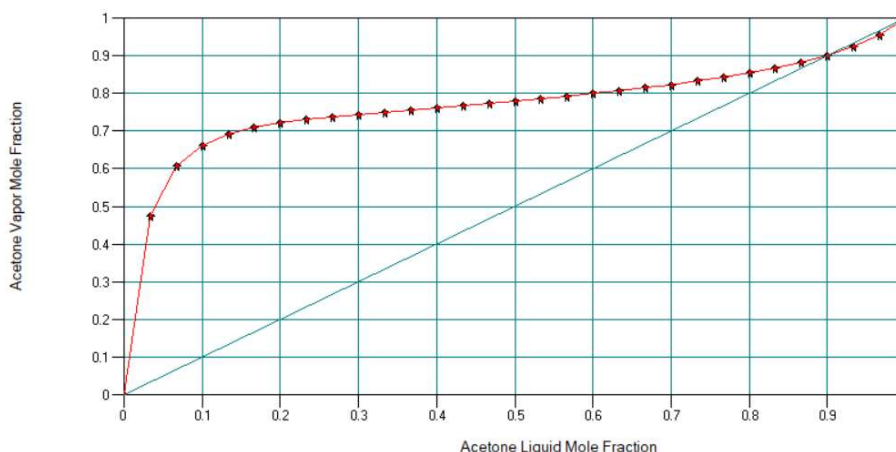


Figura 26. Diagrama de equilibrio acetona-agua

Por lo que se reduce la presión de trabajo de la torre a 0,4 bares de presión para que desaparezca el azeótropo como se ve en la siguiente imagen y así poder sobrepasar la concentración máxima que presenta el azeótropo (Fig. 27):

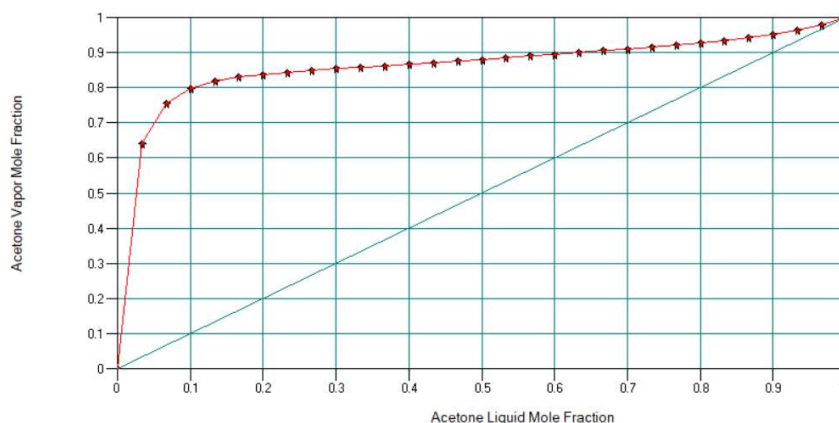


Figura 27. Diagrama de equilibrio acetona-agua sin azeótropo

Para empezar el diseño de la torre, se opta por una serie de condiciones de diseño como las siguientes (Tabla 15):

<b>CARACTERISTICAS</b>	
<b>RATIO DE REFLUJO (R/D)</b>	1.01
<b>TIPO DE CONDENSADOR</b>	Condensador parcial
<b>NUMERO DE PLATOS</b>	30
<b>PLATO DE ALIMENTACION</b>	15
<b>FACTOR DE INUNDACION</b>	70%

Tabla 15. Datos de diseño iniciales de torre de separación

Con estos datos de diseño se obtiene una buena purificación de la acetona, pero para poder llegar a ser competitivo en el mercado la pureza de la acetona debe ser mínimo del 99,5%, por lo que se realizan los siguientes cambios para llegar a esa pureza:

- Se aumenta el ratio de reflujo de cabeza a 1,5 para que la corriente descendente consiga captar más componentes indeseados de la corriente que se dirige a cabeza.

- Se cambia el plato de alimentación al plato 24 para que la corriente ascendente tenga más tiempo de contacto con la corriente descendente y poder conseguir una mejor separación.

Con estos cambios se consigue una concentración de acetona por cabeza de 99,84% teniendo la siguiente composición la corriente de cabeza (Fig. 28):

Temp C	24.5689
Pres bar	0.3
Vapor Fraction	1
Enthalpy MJ/h	-11170.39
Total flow	2974.822
Total flow unit	kg/h
Comp unit	kg/h
Cumene	0
HPC	0
2-Phenyl-2-Propa	0
Oxygen	0
Nitrogen	0
Phenol	0
Acetone	2970.029
Alpha-Methylstyr	0
Water	4.793175
Dicumyl Peroxide	0
Hydrogen	0
2,4-Diphenyl-4-M	0
P-Cumylphenol	0

Figura 28. Composición de corriente de cabeza rica en acetona

Después de obtener la corriente de cabeza purificada se pasa por un compresor para llevarlo a presión atmosférica y se enfría hasta los 25 grados para poder almacenarlo y poder venderlo posteriormente.

### 7.5. Hidrogenación de alfa-metilestireno

Por el fondo de la columna anterior, de la que se extrae la acetona por cabeza, se obtiene fenol y alfa-metilestireno con otros subproductos minoritarios. De entre ellos el que nos interesa es el alfa-metilestireno que, como se mencionó en su apartado correspondiente, reaccionando con hidrogeno se reconvierte en cumeno para su recirculación.

Primero se debe eliminar la mayor cantidad de productos no deseados posibles, entre ellos el fenol. Para ello se colocará una tercera columna de separación por donde obtendremos el alfa-metilestireno por cabeza (compuesto ligero) y el fenol por fondo (compuesto pesado).

La separación de AMS del fenol es un tanto complicada, por lo que se trabaja a vacío en la torre para aumentar la separación y disminuir los puntos de ebullición de los componentes a separar. Así se toman unos datos de partida para el diseño de la torre que son los siguientes (Tabla 16):

<b>CARACTERISTICAS</b>	
<b>RATIO DE REFLUJO (R/D)</b>	1.01
<b>TIPO DE CONDENSADOR</b>	Condensador parcial
<b>NUMERO DE PLATOS</b>	20
<b>PLATO DE ALIMENTACION</b>	10
<b>FACTOR DE INUNDACION</b>	70%

Tabla 16. Datos de diseño iniciales para torre de enriquecimiento de AMS

Con estos datos de diseño, la torre converge, pero los datos obtenidos son fácilmente mejorables para poder aumentar la cantidad de AMS recuperado por la corriente de cabeza.

Así observando estos datos vemos que se puede mejorar aún más la separación realizando los siguientes cambios en los parámetros de diseño tras varias pruebas:

- Se aumenta el número de platos de 20 a 40 y la ubicación del plato de alimentación del plato 10 al plato 36.
- Se aumenta el ratio de reflujo de 1,01 a 1,3 para que haya un mayor caudal con el que poder realizar la absorción de producto no deseado.
- Se fija una fracción de recuperación de AMS por la corriente de fondo del 0,04.

Con estos datos se obtienen unos mejores resultados en la corriente de salida, por lo que se usará para la separación los datos de diseño mencionados (Fig. 29).

Temp C	68.999
Pres bar	0.09999999
Vapor Fraction	1
Enthalpy MJ/h	-2477.642
Total flow	1414.368
Total flow unit	kg/h
Comp unit	kg/h
Cumene	8.461895e-014
HPC	0.2610523
2-Phenyl-2-Propa	0
Oxygen	0
Nitrogen	0
Phenol	16.93882
Acetone	229.324
Alpha-Methylstyr	972.3365
Water	195.4115
Dicumyl Peroxide	0.09593581
Hydrogen	0
2,4-Diphenyl-4-M	0
P-Cumylphenol	0

Figura 29. Composición de la corriente de salida de la torre de enriquecimiento de AMS

Esta corriente va directa al reactor de hidrogenación, pero debido a la presencia de trazas de agua se debe eliminar dicho componente para no inhibir la reacción de hidrogenación. Para ello se usa  $\text{CaCl}_2$  como desecante para retirar los restos de agua de la mezcla de alimentación. Para el cálculo de la cantidad necesaria de  $\text{CaCl}_2$  se simula la adición de la misma a la mezcla y se varía la cantidad hasta encontrar una separación ideal de toda el agua contenida en la corriente de entrada, que en este caso es de 2070 kg/h de  $\text{CaCl}_2$ . Esta mezcla se lleva a un tanque para separar la salmuera formada por el  $\text{CaCl}_2$  del resto de vapores de la mezcla, así se obtiene una corriente libre de agua lista para reaccionar.

Finalmente se lleva al reactor para llevar a cabo la reacción. Al ser la reacción tan rápida se diseña el reactor para una conversión prácticamente completa, por lo que se tomará una conversión del 99,999% y las condiciones de operación de 40°C de temperatura y 5 bares de presión.

Para este reactor se obtiene un volumen de 2.95 m<sup>3</sup>, por lo que se toma un volumen final de 3 metros cúbicos.

## 8. Cálculo y dimensionamiento de equipos

Una vez analizado el proceso productivo se pasa al cálculo y dimensionamiento de los distintos equipos implementados en toda la línea de producción. Se usará la bibliografía para hacer el cálculo de los equipos.

Cabe destacar que en este apartado no se hará mención al cálculo ni al dimensionamiento de los reactores, ya que se ha realizado durante el análisis del proceso de síntesis y ha sido un cálculo interno de chemCAD.

También hay que mencionar que este apartado está orientado al cálculo y dimensionamiento para obtener solo los datos necesarios para realizar más adelante el cálculo de los costes de producción y costes de inversión. Toda la información se ha obtenido de [5] y [12].

### 8.1. Torres de separación

En este punto se explicará el proceso de dimensionado de las torres de separación implantadas en la línea.

En este caso se dimensionarán tres torres de separación, que serán torres de relleno debido a su mayor eficiencia en cuanto a separación y altura, ya que las torres de platos necesitan de más espacio entre plato y plato para realizar la misma separación.

El dato relevante en el dimensionamiento de las torres es el volumen de las mismas, por lo que será necesario calcular la altura y el diámetro de las mismas, ya que suponemos torres cilíndricas.

Para comprobar la eficiencia del uso de torres de relleno se mostrará el cálculo para los dos tipos de torres.

El primer paso es calcular el diámetro mínimo de la torre. El método de cálculo usado es el diseñado por Souders y Brown, por el que se calcula el flujo másico máximo que puede trasegar la torre en las condiciones de trabajo de las corrientes gaseosa y líquida. Este se calcula de la siguiente manera (Ec. 13):

$$W = C[\rho_V \cdot (\rho_L - \rho_V)]^{1/2}$$

*Ecuación 13. Flujo másico máximo en torres de platos*

Donde  $\rho_V$  es la densidad de la corriente gaseosa,  $\rho_L$  es la densidad de la corriente líquida, ambas medidas en lbs/ft<sup>3</sup> y C es un factor de aplicación que se calcula de la siguiente manera (Ec. 14):

$$C = (36.71 + 5.456T - 0.08486T^2) \cdot \ln S - 312.9 + 37.62T - 0.5269T^2$$

*Ecuación 14. Factor para el cálculo del flujo másico máximo*

Donde T es el espacio entre platos, si fuera una torre de platos, medido en pulgadas (ln) y S es la tensión superficial de la corriente líquida medida en Din/cm.

Así se obtiene W, que está calculado para unas condiciones de inundación del plato del 100%. En la práctica, se supone una inundación del 70% para evitar el paso de materia de un plato a otro, por lo que habrá que multiplicar el valor de W por 0,7.

Una vez conocido este dato podemos calcular el área de la sección circular de la torre y partir de ahí, el diámetro.

Como ejemplo se calculará el diámetro de la Torre 16.



$$C = (36.71 + 5.456 \cdot 20 - 0.08486 \cdot 20^2) \cdot \ln 25.9 - 312.9 + 37.62 \cdot 20 - 0.5269 \cdot 20^2 = 592.84$$

$$W = 592.84 \cdot [0.01405 \cdot (58.5635 - 0.01405)]^{1/2} = 537.6288 \frac{lbs}{ft^2 \cdot h}$$

$$W_1 = 0.7 \cdot 537.6288 = 376.3402 \frac{lbs}{ft^2 \cdot h} = 1837.4567 \frac{kg}{m^2 \cdot h}$$

$$A = \frac{W_1}{G_L} = \frac{1837.4567}{8914.24} = 4.8514 m^2$$

$$D = \sqrt{4A/\pi} = 2.48 \cong 2.5 m$$

En cuanto a la altura de la torre se determina teniendo en cuenta la cantidad de platos y el espaciado entre platos. En la práctica no se instalan solo las etapas calculadas, suelen instalarse el doble de platos más un 10% por temas de eficiencia de platos y por variaciones en los caudales de operación. En este ejemplo las etapas teóricas son 40, por lo que la cantidad de platos a instalar es de 88. Teniendo en cuenta que el espacio entre platos es de 20 pulgadas obtenemos una altura de 44,70 metros.

En el caso de la torre de relleno, la distribución del relleno interviene en el flujo másico de la torre. Por ello el flujo másico máximo viene establecido por la bibliografía según el tamaño del relleno en una distribución aleatoria, como se ve en la siguiente imagen (Tabla 17):

Packing Size (in.)	Liquid Rate (gpm/ft <sup>2</sup> )
¾	25
1	40
1½	55
2	70
3½	125

Tabla 17. Flujo másico máximo según tamaño de relleno

Para el caso de la torre en estudio se ha elegido un tamaño de relleno de una pulgada ya que, aunque no se tiene en cuenta la caída de presión en la simulación, un tamaño de relleno más pequeño supondrá una caída de presión considerable y trabajando a vacío es bueno minimizar lo máximo posible las pérdidas de carga. Así el máximo flujo másico para un tamaño de una pulgada de relleno es de 40 gpm/ft<sup>2</sup>.

A raíz de este dato se puede calcular la sección mínima que debe tener la torre para soportar ese caudal y, por tanto, el diámetro de la torre.

Para este caso el diámetro de la torre será el siguiente:

$$A = \frac{W}{G_L} = \frac{40 \text{ gpm} \cdot ft^{-2}}{38.02 \text{ m}^3 \cdot h^{-1}} = 0.388 m^2$$

$$D = \sqrt{4A/\pi} = 0.703 m$$

Por lo que se tomará un diámetro de 0,75 metros. Hay que entender que se asumirá el mismo diámetro para el lecho de relleno.

En cuanto a la altura primero se calculará la altura necesaria de relleno para realizar la separación con éxito. Esta altura se calcula usando la "Height Equivalent Theoretical Plate" (HETP),

con la cual se puede calcular la altura de cada etapa teórica de lecho, como se ve en la siguiente imagen (Tabla 18):

Nominal Packing Size (in.)	HETP (in.)
¾	11 to 16
1	14 to 20
1½	18 to 27
2	22 to 34
3 or 3½	31 to 45

Tabla 18. Valores de HETP según el tamaño del relleno

Se toma un valor medio de los rangos de valores de HETP que tiene cada tamaño de relleno, para este caso se tomará como HETP un valor de 17 pulgadas. También se debe tener en cuenta la viscosidad de la fase líquida, ya que esta influirá en la difusión de los componentes y, por tanto, en la eficiencia de las etapas, como se ve en esta tabla (Tabla 19):

Liquid Viscosity (cps)	Relative HETP (%)
0.22	100
0.35	110
0.75	130
1.5	150
3.0	175

Tabla 19. Crecimiento del HETP según la viscosidad de la corriente líquida

Por lo que sabiendo que la torre tiene 40 etapas teóricas, y que la viscosidad es de 50 centipoises lo que equivale a que aumente la HETP un 17,5%, la altura del relleno será de 20,29 metros, que se quedarán como 21 metros de relleno.

Una vez conocido la altura de relleno necesario se calcula la altura de la torre teniendo en cuenta todos los componentes de una torre de relleno como son el distribuidor, colector, retorno de reboiler, retorno de condensador,... Además, al ser un empaquetamiento distribuido aleatoriamente la altura de relleno por lecho está limitado a 24 pies al usar un relleno Super Intalox Saddles plástico.

Por lo que el relleno se dividirá en tres lechos de 7 metros cada uno, a lo que se le debe sumar las siguientes alturas adicionales (Tabla 20):

ALTURAS (METROS)	
RETORNO CONDENSADOR	1,2
DISTRIBUIDOR	0,5
2 RECOLECTORES	2,2
2 REDISTRIBUIDORES	2,4
3 PLATOS DE SOPORTE	3,6
ALIMENTACION DE VAPOR	1,5
RETORNO DE REBOILER	1

Tabla 20. Distribución de alturas en las distintas partes de la columna de relleno 14

Así finalmente se obtiene una altura de 33,4 metros, que se instalará como una torre de 33,5 metros.

Una vez realizado el cálculo se puede observar la ganancia en tamaño de la torre de relleno, ahorrándose casi 10 metros en altura y casi 2 metros de diámetro. Los volúmenes de la torre y del relleno son de 14,8 y 9,28 m<sup>3</sup>, respectivamente.

Una vez visto el método de cálculo de la torre 16 se muestran los datos de dimensionamiento de las torres 21 (Tabla 21) y 30 (Tabla 22) en las siguientes tablas:

<b>DIMENSIONES</b>	
<b>DIAMETRO</b>	0,45 m
<b>ALTURA RELLENO</b>	5+6+6 m
<b>ALTURA TORRE</b>	29,5 m
<b>VOLUMEN TORRE</b>	4,69 m <sup>3</sup>
<b>VOLUMEN RELLENO</b>	2,70 m <sup>3</sup>

*Tabla 21. Distribución de alturas en las distintas partes de la columna de relleno 21*

<b>DIMENSIONES</b>	
<b>DIAMETRO</b>	0,35 m
<b>ALTURA RELLENO</b>	6+6+6+6,5 m
<b>ALTURA TORRE</b>	45 m
<b>VOLUMEN TORRE</b>	4,33 m <sup>3</sup>
<b>VOLUMEN RELLENO</b>	2,36 m <sup>3</sup>

*Tabla 22. Distribución de alturas en las distintas partes de la columna de relleno 30*

Por último, hay que mencionar las torres estarán construidas de acero al carbono con un recubrimiento de acero inoxidable y el relleno será de polipropileno.

## 8.2. Depósitos de separación

En este apartado se explicará el método de cálculo para el diseño y dimensionamiento de los depósitos de separación ubicados en la línea de producción.

Dentro de este tipo dimensionamiento se estudiarán también los destiladores flash, que se dimensionarán como depósitos verticales. Se dimensionarán cinco depósitos horizontales, uno vertical, un destilador flash y un depósito de separación de salmuera.

En estos equipos el dato relevante para el dimensionamiento vuelve a ser el volumen del equipo, así que se volverá a calcular el diámetro del depósito y su altura en el caso de depósitos verticales o su longitud en caso de depósitos horizontales.

Para empezar a dimensionar estos depósitos se debe seleccionar un tiempo de residencia para el líquido entrante. Una estimación de estos tiempos viene definida, según los tipos de servicios que ofrece cada depósito, en la siguiente tabla (Tabla 23):

Service (times in minutes)	% Full (Ref- erence 1)	$L_{HL}$ to $L_{LL}$ (minimum) Ref- erence 2*)	% Full (Ref- erence 3)	Miscel- aneous
Tower reflux drum	See Table 2	5-based on reflux flow	5 to 10- based on total flow	—
Vapor-liquid separators	—	—	3-5	—
Product to storage	Depends on situa- tion	Fractionator O.H. Prod.—2	—	—
Product to heat exchanger along with other streams	—	Fractionator O.H. Prod. —5	—	—
Product to heater	—	Fractionator O.H. Prod. —10	—	—
Furnace surge drums	—	—	—	10 min. 20 max.
Tower bottoms	—	—	—	5 min.
FRC control	—	—	—	10 max.
LC control	—	—	—	3 min.

Tabla 23. Tiempos de semiresidencia

En este caso todos los depósitos se tratan de separadores de vapor-liquido, por lo que el tiempo de residencia para medio deposito está entre 3 y 5 minutos. De forma inicial se tomará un tiempo de 4 minutos y se modificará si las condiciones de dimensionamiento lo requieren. En cuanto al tiempo de residencia del vapor se suele valorar normalmente por la velocidad máxima del vapor en el depósito. Este se puede calcular por la siguiente expresión (Ec. 15):

$$U_{vapor\ max} = K[(\rho_L - \rho_V)/\rho_V]^{0.5}$$

Ecuación 15. Velocidad máxima de la fase vapor en los depósitos

Donde  $\rho_V$  es la densidad del vapor y  $\rho_L$  es la densidad del líquido, ambas expresadas en lbs/ft<sup>3</sup>, y K es un factor que viene determinada por la siguiente expresión (Ec. 16):

$$K_V = \exp(A + BX + CX^2 + DX^3 + EX^4 + FX^5)$$

$$K_H = 1.25 \cdot K_V$$

Ecuación 16. Factores para depósitos horizontales o verticales

Donde  $K_V$  y  $K_H$  son las constantes dependiendo de si se trata de un depósito vertical u horizontal, respectivamente, y el resto de constantes vienen definidos por los siguientes valores:

- A=-1.942936
- B=-0.814894
- C=-0.179390
- D=-0.0123790
- E=0.000386235
- F=0.000259550

Y X viene definido por la siguiente ecuación (Ec. 17):

$$X = \ln\left(\frac{W_L}{W_V} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}}\right)$$

Ecuación 17. Constante para el cálculo de los factores horizontales y verticales

Donde  $W_L$  y  $W_V$  hacen referencia al caudal másico de líquido y vapor, respectivamente, expresadas en lb/sec. Una vez obtenidos estos datos se puede pasar al dimensionamiento de los depósitos, que variará según si se trata de un depósito horizontal o vertical.

En el caso de los depósitos horizontales se parte del cálculo de la variable  $K_H$ , con el cual se puede calcular  $U_{vapor\ max}$ .

Con este dato se puede calcular el área necesaria, medida en  $ft^2$ , para el caudal de vapor introducido en el depósito según la siguiente expresión (Ec. 18):

$$(A_V)_{min} = Q_V / U_{vapor\ max}$$

*Ecuación 18. Área mínima para la fase vapor en el depósito*

Donde  $Q_V$  es el caudal de vapor medido en  $ft^3/sec$ .

Seguidamente se selecciona un tiempo de residencia para la corriente líquida, que como se mencionó anteriormente será de 4 minutos y con él se calcula el volumen del depósito lleno totalmente de líquido. Este tiempo de residencia está definido sólo para un volumen igual a la mitad del volumen del depósito, por lo que habrá que multiplicar por dos para el cálculo del volumen.

Una vez calculado el volumen se calcula la sección mínima del depósito para un llenado de líquido al 80% de su capacidad, y por consecuencia, el diámetro mínimo del mismo, el cual se calcula de la siguiente manera (Ec. 19):

$$(A_{total})_{min} = (A_V)_{min} / 0.2$$

$$D_{min} = \sqrt{\frac{4(A_{total})_{min}}{\pi}}$$

*Ecuación 19. Área mínima y diámetro mínimo del depósito*

Una vez calculado el diámetro mínimo se tomará como diámetro de diseño el diámetro mínimo más 6 pulgadas. Con este diámetro se calcula la longitud del depósito para el volumen de depósito calculado anteriormente, como se muestra de la siguiente forma (Ec. 20):

$$L = \frac{\text{volumen liquido}}{\frac{\pi}{4} D^2}$$

*Ecuación 20. Longitud del depósito horizontal*

Una vez obtenidos los datos de longitud y diámetro del depósito se comprueba el dimensionamiento según la relación  $L/D$ . Ésta debe estar entre 5 y 3 para obtener un buen dimensionamiento. Si no es así se deberá rediseñar el depósito cambiando el tiempo de residencia líquido o aumentando el diámetro del depósito a base de prueba y error.

Se usará como ejemplo el cálculo del depósito horizontal 8.

Para empezar, se toman los datos necesarios para comenzar el cálculo, que son los siguientes:

- Densidad de la fase vapor: 0,335 lb/ft<sup>3</sup>
- Densidad de la fase líquida: 50,203 lb/ft<sup>3</sup>
- Caudal de vapor: 5,185 ft<sup>3</sup>/s
- Caudal líquido: 0,356 ft<sup>3</sup>/s

- Caudal másico de vapor: 1,735 lb/s
- Caudal másico de líquido: 17,888 lb/s

Partiendo de estos datos primero se calcula la variable X con (Ec. 17):

$$X = -0.172$$

Con el valor de X y con (Ec. 16) se puede obtener el valor de  $K_V$  y  $K_H$ :

$$K_H = 0.205$$

Una vez conocido el valor de  $K_H$  se obtiene el valor de  $U_{v \max}$  con la ecuación (Ec. 15):

$$U_{v \max} = 2.503 \text{ ft/s}^3$$

A través de este dato se calcula el valor del  $A_{V \min}$  usando (Ec. 18) y, por consiguiente, el valor de  $D_{\min}$  usando (Ec. 19).

$$A_{V \min} = 2.072 \text{ ft}^2$$

$$D_{\min} = 3.632 \text{ ft} \rightarrow D = 4.132 \text{ ft}$$

Después se calcula el volumen del depósito lleno de líquido, teniendo en cuenta que se ha optado por un tiempo de semiresidencia de 4,5 minutos para este depósito, obteniéndose un volumen de 192,41  $\text{ft}^3$ , por lo que finalmente se puede calcular la longitud del depósito con (Ec. 20) y comprobar L/D para ver si el dimensionamiento es correcto.

$$L = 14.352 \text{ ft}$$

Con estos valores de L y D se obtiene un valor de L/D de 3,47, que es un valor dentro de los rangos permitidos, luego se admite como un buen dimensionamiento.

En el caso de los depósitos verticales se inicia por el cálculo de  $K_V$  y, con el mismo, el valor de  $U_{\text{vapor max}}$ . Con este dato y conociendo el caudal de vapor de alimentación se puede calcular la sección mínima del depósito y, por tanto, el diámetro de este como se ve en las siguientes ecuaciones (Ec. 21):

$$(A_V)_{\min} = Q_V / U_{\text{vapor max}}$$

$$D_{\min} = \sqrt{\frac{4(A_V)_{\min}}{\pi}}$$

*Ecuación 21. Área mínima de la fase vapor y el diámetro mínimo del depósito vertical*

Una vez determinado el diámetro mínimo del depósito se le suman 6 pulgadas para obtener el diámetro de diseño.

Después se pasa a calcular la altura del depósito. Para ello se debe tener en cuenta la boquilla de entrada de la corriente de alimentación, por lo que se mide velocidad máxima y mínima permitida en la entrada para calcular la sección y, por consiguiente, su diámetro haciendo uso de las siguientes formulas (Ec. 22):

$$(U_{\max})_{\text{nozzle}} = 100 / \rho_{\text{mix}}^{0.5}$$

$$(U_{\min})_{\text{nozzle}} = 60 / \rho_{\text{mix}}^{0.5}$$

*Ecuación 22. Velocidad máxima y mínima en la tubería de alimentación*

Donde  $\rho_{mix}$  es la densidad de la mezcla, medido en  $lbs/ft^3$ . A partir de estos valores y usando el valor de caudal de entrada se puede obtener la sección mínima y máxima, por lo que seleccionando como prediseño una sección de entrada media se puede obtener un diámetro medio.

Una vez obtenido se diseña la altura del espacio reservado para el vapor, que será de 36 pulgadas y medio diámetro de boquilla hacia arriba desde el centro de la boquilla, requiriendo un mínimo de 48 pulgadas, y 12 pulgadas con medio diámetro de boquilla hacia abajo hasta la superficie del líquido, requiriendo un mínimo de 18 pulgadas.

Para obtener la altura reservada para el espacio líquido se calcula el volumen que ocupará el líquido en el tiempo previsto de diseño que se elegirá dentro del rango de tiempos de residencia mostrados anteriormente, por lo que se diseñará para 4 minutos inicialmente de la siguiente forma (Ec. 23):

$$V = Q_L \cdot t$$

*Ecuación 23. Volumen del depósito vertical lleno de líquido*

Así la altura del líquido se calculará de la siguiente manera (Ec. 24):

$$H_L = V \cdot \left(\frac{4}{\pi D^2}\right)$$

*Ecuación 24. Altura de depósito reservado solo para líquido*

Por último, se comprobará el dimensionamiento buscando que la relación L/D se sitúe entre 3 y 5, sino habrá que rediseñar el depósito.

Para mostrar un ejemplo se usará el depósito vertical 14 para verlo.

Los datos de partida para el ejemplo son los siguientes:

- Densidad de la fase vapor:  $0,355 \text{ lb/ft}^3$
- Densidad de la fase líquida:  $54,6191 \text{ lb/ft}^3$
- Densidad de la mezcla de alimentación:  $0,425 \text{ lb/ft}^3$
- Caudal de vapor:  $15,228 \text{ ft}^3/\text{s}$
- Caudal líquido:  $0,020 \text{ ft}^3/\text{s}$
- Caudal másico de vapor:  $5,402 \text{ lb/s}$
- Caudal másico de líquido:  $1,071 \text{ lb/s}$

El cálculo se empieza igual que en el caso del depósito horizontal hasta el cálculo de  $K_V$  usando (Ec. 16)

$$K_V = 0.380$$

Con este valor de  $K_V$  se calcula la  $U_{V \max}$  usando (Ec. 15)

$$U_{V \max} = 4.704 \text{ ft/s}$$

Con este dato y con (Ec. 21) se puede obtener el  $D_{\min}$  de la torre.

$$D_{\min} = 2.030 \text{ ft} \rightarrow D = 2.530 \text{ ft}$$

Una vez calculado el diámetro de la torre, se calcula su longitud, calculando primero el diámetro de la tubería de alimentación con (Ec. 22) y tomando un valor medio de los valores máximos y mínimos calculados:

$$D = 0,124 \text{ ft}$$

Con este dato se calcula la altura de la torre reservada para el vapor con las indicaciones mencionadas anteriormente. Como al cálculo los espacios por encima y por debajo de la tubería de alimentación no superan los mínimos se parte de los valores mínimos.

$$H_V = 66 \text{ inch}$$

También se calcula la altura reservada para el líquido usando (Ec. 23) y (Ec. 24):

$$H_L = 0,936 \text{ inch}$$

Con todos los datos se calcula la altura total sumando las dos alturas y se calcula L/D, obteniéndose 2,54. Este valor está fuera de rango, por lo que se redimensiona aumentando la altura reservada para la fase vapor hasta las 100 pulgadas. De esta forma se obtiene una relación de L/D de 3,66 que entra dentro del rango aceptable.

Por último, todos los depósitos estarán contruidos con acero al carbono, excepto los depósitos 14 y 37 que además llevarán un recubrimiento de acero inoxidable.

### 8.3. Intercambiadores de calor y otros equipos

En este apartado se pasará a dimensionar los intercambiadores de calor de la línea de producción y a mencionar los dimensionamientos del resto de equipos que no se realizan ningún cálculo de dimensionamiento ya que lo realiza el propio software. El resto de información se ha obtenido de [9].

En los intercambiadores de calor los datos necesarios para el dimensionamiento básico son el área de contacto necesaria o área de intercambio. Para ello solo es necesario resolver una simple ecuación, que es la siguiente (Ec. 25):

$$Q = U \cdot A \cdot LMTD$$

*Ecuación 25. Calor transferido en el intercambiador de calor*

Donde:

- Q → Cantidad de calor intercambiado.
- U → Coeficiente global de transmisión.
- A → Área de contacto
- LMTD → Diferencia de temperatura media logaritmica

Para esta ecuación todos los datos son conocidos o estimados, excepto el área de contacto, que es la variable a calcular.

Para ello, Q es un dato calculado por el programa, las temperaturas de entrada y salida son datos de diseño para cada intercambiador, y U se puede aproximar según los datos que aporta la bibliografía a partir de los tipos de corrientes que los trasiegan y si existe algún cambio de fase durante el intercambio.



Para verlo se muestra un ejemplo de cálculo del intercambiador 38 seguidamente:

$$A = \frac{Q}{U \cdot (T_f - T_i)} = \frac{58.3107}{112.5 \cdot 28.95} = 13.75 \text{ ft}^2 = 1.25 \text{ m}^2$$

De esta forma los intercambiadores son dimensionados y, a partir de estos datos, se pueden elegir los tipos de intercambiadores, los materiales de construcción y sus áreas de intercambio, como se ve en la siguiente tabla (Tabla 24):

	AREA (M <sup>2</sup> )	TIPO EXCHANGER	MATERIALES
<b>EXCHANGER 23</b>	10	FIXED TUBE	CS-shell/Cu-tube
<b>EXCHANGER 32</b>	1.2	DOUBLE PIPE	CS-shell/CS-tube
<b>EXCHANGER 24</b>	246	U-TUBE	Cu-shell/Cu-tube
<b>EXCHANGER 27</b>	19.5	FIXED TUBE	CS-shell/Cu-tube
<b>EXCHANGER 20</b>	11	FIXED TUBE	CS-shell/Ti-tube
<b>EXCHANGER 29</b>	13.3	FIXED TUBE	CS-shell/Cu-tube
<b>EXCHANGER 42</b>	3.73	DOUBLE PIPE	CS-shell/CS-tube
<b>EXCHANGER 37</b>	4.17	DOUBLE PIPE	CS-shell/CS-tube
<b>EXCHANGER 38</b>	1.28	DOUBLE PIPE	CS-shell/Cu-tube
<b>EXCHANGER 40</b>	1.4	DOUBLE PIPE	CS-shell/CS-tube
<b>EXCHANGER 41</b>	7	DOUBLE PIPE	CS-shell/Ti-tube

Tabla 24. Datos de diseño de los distintos intercambiadores de calor

Otros de los equipos que se dimensionan son compresores, motores y bombas, pero como se ha comentado antes, estos quedan dimensionados por el cálculo interno que realiza chemCAD.

Por ejemplo, el compresor 28 se dimensiona para una potencia de 44,72 kW, y su motor que es el driver 28 se dimensiona para una potencia de 75 kW. Al igual, las bombas se dimensionan por la potencia transmitida por su eje, la cual se muestra en la siguiente tabla (Tabla 25):

	POTENCIA (KW)
<b>BOMBA 22</b>	3.12
<b>BOMBA 26</b>	1.12
<b>BOMBA 35</b>	0.25

Tabla 25. Datos de diseño de bombas

Las bombas 22 y 26 serán bombas centrifugas fabricadas con acero al carbono, mientras que la bomba 35 será una bomba alternativa.

El compresor será un compresor rotatorio fabricado con acero al carbono, y su driver será un motor eléctrico totalmente encapsulado.

## 9. Propuesta de integración energética

En este apartado se realizará una propuesta de integración energética para reducir el uso de utilities de refrigeración o calefacción. Para ellos se hará uso de corrientes de proceso calientes para calentar corrientes de proceso frías y viceversa. Para ello es necesario analizar las necesidades caloríficas del proceso y determinar si es posible una integración energética.

En la siguiente tabla se muestran los equipos con calefacción o refrigeración y sus necesidades caloríficas (Tabla 26):

<b>EQUIPOS</b>	<b>NECESIDADES CALORIFICAS (MJ/H)</b>
REACTOR OXIDACION 1	-8868.5
REACTOR OXIDACION 2	-8022.53
REACTOR OXIDACION 3	-6858.58
REACTOR OXIDACION 4	-6283.35
REACTOR ESCISION 1	--11361
REACTOR ESCISION 2	-325.792
REACTOR HIDROGENACION AMS	-890.654
CONDENSADOR 16	-8761.88
REBOILER 16	15601.9
INTERCAMBIADOR 20	-1343.63
CONDENSADOR 21	-2430.55
REBOILER 21	4225.45
INTERCAMBIADOR 23	-1597.4
INTERCAMBIADOR 24	-8061.51
INTERCAMBIADOR 27	2349.08
INTERCAMBIADOR 29	-1830.86
CONDENSADOR 30	-1450.5
REBOILER 30	2724.25
INTERCAMBIADOR 32	300.268
INTERCAMBIADOR 37	-627.316
INTERCAMBIADOR 38	58.3109
INTERCAMBIADOR 40	238.361
INTERCAMBIADOR 41	643.917
INTERCAMBIADOR 42	31.38

Tabla 26. Lista de equipos y sus necesidades energéticas

Para el caso de los reactores se usan, tanto en los reactores tanques como en los reactores flujo pistón, reactores encamisados para extraer o aportar calor al medio.

Como medio calefactor se usará vapor saturado de baja presión (3 bares) a 134°C para el caso de los intercambiadores de calor. En el caso de la refrigeración se usará agua fría a 25°C, excepto en los casos en los que las temperaturas a refrigerar descienden por debajo de los 25°C, teniendo en cuenta que los saltos térmicos son de 10°, que se usarán agua con glicol al 10% a 0°C. También se usará amoniaco liquido saturado a -34°C en casos donde usando agua fría o glicol supondría un uso demasiado grande.

Para estudiar la posibilidad de integración energética se separan las corrientes en frías y calientes con sus caudales y capacidades caloríficas con el fin de buscar el coste mínimo para una red de intercambiadores. De esta se excluyen las utilities usadas en los condensadores y hervidores de las columnas de relleno, de los evaporadores y de los reactores, ya que deben estar a unas temperaturas muy estrictas y su inclusión en la red de intercambiadores puede aumentar el margen de variación de las temperaturas de las corrientes y variar la extracción o aportación de calor en los mismos. Así que las corrientes que se usarán en la propuesta de integración energética son las que aparecen en la siguiente tabla (Tabla 27):

EQUIPOS	NECESIDADES CALORIFICAS (MJ/H)
INTERCAMBIADOR 20	-1343.63
INTERCAMBIADOR 23	-1597.4
INTERCAMBIADOR 24	-8061.51
INTERCAMBIADOR 27	2349.08
INTERCAMBIADOR 29	-1830.86
INTERCAMBIADOR 32	300.268
INTERCAMBIADOR 37	-627.316
INTERCAMBIADOR 38	58.3109
INTERCAMBIADOR 40	238.361
INTERCAMBIADOR 41	643.917
INTERCAMBIADOR 42	31.38

Tabla 27. Lista de equipos que intervienen en la integración energética

Para realizar el estudio de la red de intercambiadores se utiliza el método del punto de pliegue. Con este método se puede encontrar el punto de pliegue dividiendo el sistema en varios intervalos de temperatura.

El primer paso es el cálculo de las necesidades mínimas de enfriamiento y calentamiento que se pueden calcular observando los intervalos de temperatura de las corrientes y, después, con un diagrama de cascada.

Para observar los intervalos de temperatura se elige un salto térmico mínimo que actúa de fuerza impulsora para el intercambio. El valor típico que se usa es 10°C y es el valor que se ha usado en el estudio. Conociendo el valor del salto térmico se interpretan los intervalos de temperatura y las necesidades caloríficas en cada intervalo. Esta interpretación se realiza con las siguientes normas:

- Primero se empieza con la corriente con la temperatura más alta.
- Las temperaturas de las corrientes calientes serán igual a las mismas menos la mitad del salto térmico mínimo establecido.
- Las temperaturas de las corrientes frías serán igual a las mismas más la mitad del salto térmico mínimo establecido.
- Se determina  $\Delta H$ :  $\Delta H = (\sum C_{ho} - \sum C_{cold})\Delta T$
- A continuación, se calcula el calor acumulado al final de cada intervalo.
- Se identifica la mayor necesidad de calor y se añade al inicio de la cascada de calor.
- Por último, se identifican las necesidades mínimas de calefacción al principio de la cascada, las necesidades de refrigeración mínimas al final de la cascada y la temperatura del pinch, que se encuentra donde el calor acumulado se vuelve 0.

Así se obtiene la cascada de calor que se ve a continuación (Tabla 28):

T (K)	$\Delta H_{ACUM}$ (KW)
393.15	365.412
370.531	76.476
362.15	20.7962
360.436	8.41325
352.15	0
347.149	8.53852
345.061	13.3167
338.15	96.835
333.822	123.337
333.456	202.212
328.15	1403.58
323.15	2504.62
318.15	2558.74
308.15	2667.65
298.305	2843.21
298.15	2846.11
293.15	2908.7
288.15	2922.32

Tabla 28. Cascada de calor

Como se puede comprobar según lo descrito anteriormente, las necesidades mínimas de calefacción son de 365,412 kW y las necesidades de refrigeración son de 2922,32 kW. Además, se puede observar que la temperatura de pinch es de 352,15 K, por lo que la temperatura caliente y la temperatura fría del pinch es de 357,15 y 347,15, respectivamente.

Una vez calculadas las necesidades caloríficas se calculan la cantidad de intercambiadores mínimos para realizar la integración energética. Esta se calcula a través de la aplicación de cálculo HINT obteniéndose un valor de 17.

Una vez hecho esto se representa la curva compuesta fría y caliente como se ve a continuación (Fig. 30):

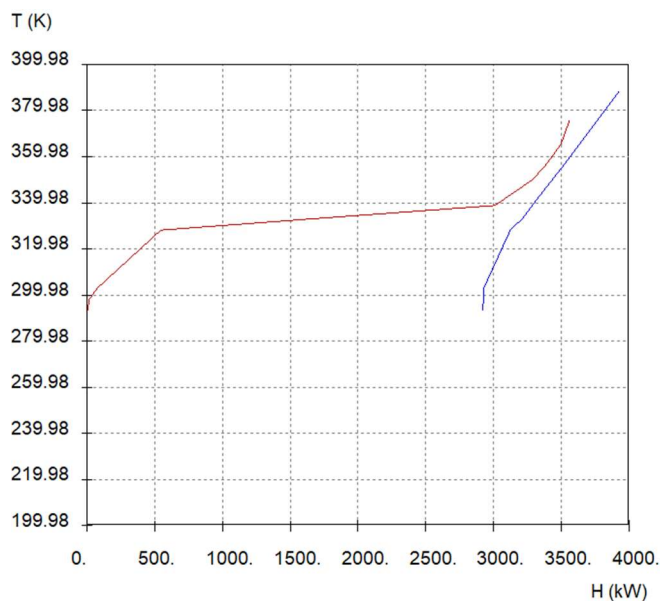


Figura 30. Curvas compuestas frías y calientes

Como se puede observar en la gráfica anterior, las necesidades de refrigeración mínimas son muy grandes, ya que no hay tantas frigorías por debajo del pinch.

Una vez representada la curva compuesta de las corrientes frías y calientes, se pasa a realizar la Gran Curva Compuesta, ya que aporta más información, donde se puede estudiar la selección de servicios a usar en la integración (Fig. 31).

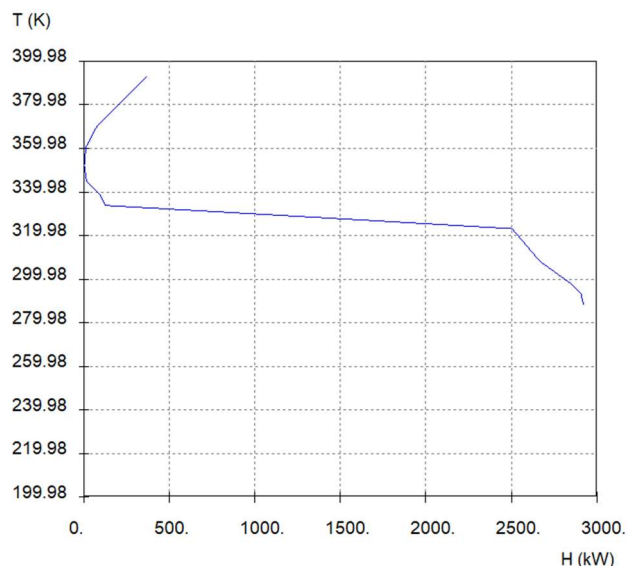


Figura 31. Gran curva compuesta

Como se puede observar en esta figura, no existen bolsas de calor de calor en el proceso y se confirma la selección de servicios que se hizo al inicio de la integración energética. También se puede observar que en la zona del pinch la entalpía es 0, lo que supone que no existe intercambio de calor en ese punto.

Una vez realizado los estudios necesarios, se realiza la propuesta de integración energética. La propuesta se ha realizado a través del software "Hint". Para realizar la propuesta de integración energética se usa el conjunto de reglas heurísticas que crearon Linnhoff y Hindmarch:

1. Se comienza por el punto de pliegue y se emparejan corrientes. Este emparejamiento se realiza teniendo en cuenta que por encima del punto de pliegue la CP de la corriente caliente debe ser menor que la de la corriente fría. Por debajo del punto de pliegue se da el caso contrario.
2. Se calculan las cargas térmicas de las dos corrientes, se comparan y se elimina la que tenga menor carga térmica para poder realizar emparejamientos posteriores.
3. Se calcula la temperatura de salida del intercambiador para la corriente de salida de la corriente no eliminada.
4. Se repiten los pasos anteriores con el resto de las corrientes. Cuando las corrientes no están situadas en el punto de pliegue no es necesario respetar las condiciones de CP.

Usando estas reglas finalmente se realiza la siguiente propuesta de integración energética (Fig. 32):

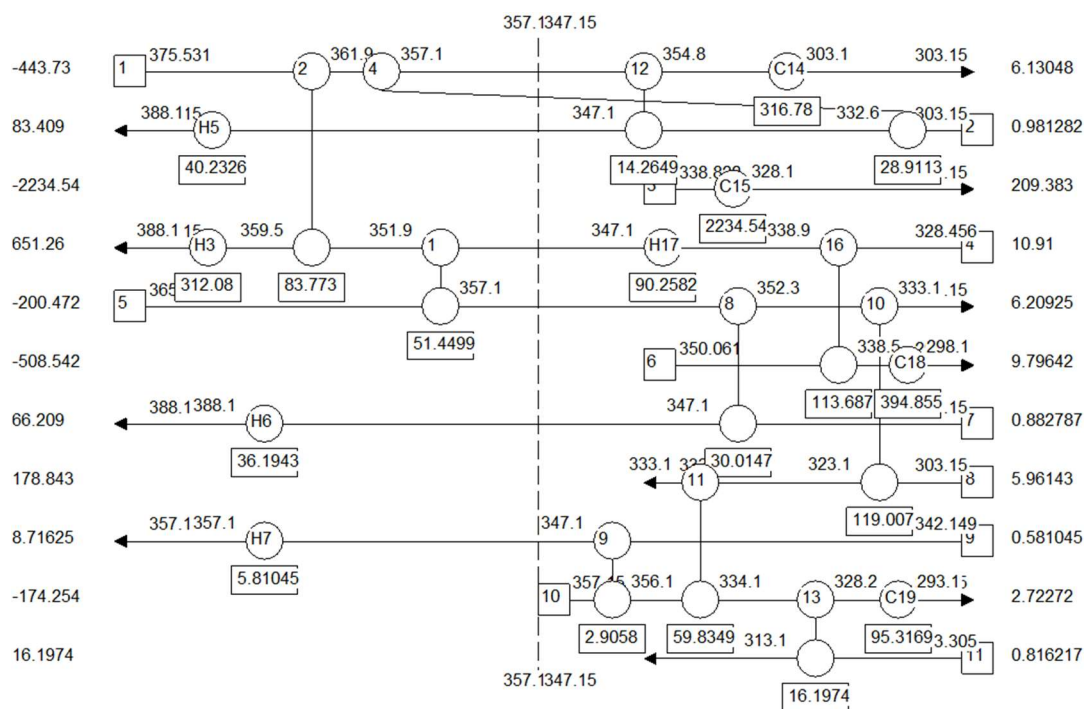


Figura 32. Propuesta de integración energética

Como se ha mencionado anteriormente las necesidades mínimas para la integración eran:

- Calor de calefacción: 365,412 kW
- Calor de refrigeración: 2922,32 kW
- Intercambiadores: 17

Con la propuesta que se ha realizado los servicios energéticos necesarios son los siguientes:

- Calor de calefacción: 484,575 kW
- Calor de refrigeración: 3041,49 kW
- Intercambiadores: 19

Se puede observar que la integración no es la óptima para reducir al máximo el ahorro calorífico, pero es la disposición con el mayor ahorro energético que se ha podido encontrar.

## 10. Análisis económico

En este punto se realizará un estudio de los costes económicos para definir la rentabilidad del proyecto, lo que supone estimar los de implantación de una planta de producción de acetona y el coste de producción o de operación, en el que se incluyen la compra de materias primas, la venta de producto terminado o el uso de utilities. La información se ha obtenido de [12] y [15].

Para empezar, se analizará la inversión inicial que es el capital necesario para la compra de todos los equipos necesarios para llevar a cabo el proyecto en curso. Esta inversión puede estimarse a partir de varios métodos como se muestra a continuación, siendo cada método más preciso que el anterior:

- **Estimaciones basadas en el orden de magnitud.** Estas se basan en información sobre costes de capital de plantas ya construidas utilizando factores de cambio de escala y teniendo en cuenta la inflación. Con esta estimación el coste real se encuentra entre

una cota superior de un 40% por encima del valor estimado y una cota inferior de un 20% por debajo del valor estimado.

- **Estimaciones basadas en los costes de los equipos principales.** Estas estimaciones se basan en una lista de los equipos principales del proceso. Cada equipo se dimensiona individualmente y se estima su coste, por lo que se necesita un diagrama de flujo de procesos, y la suma total de los costes de cada equipo se corrige para determinar el coste total de la planta. De esta forma el coste real de la planta se encuentra entre una cota superior del 30% por encima del valor estimado y una cota inferior del 20% del valor estimado.
- **Estimaciones preliminares.** Estas estimaciones están basadas en dimensionamientos más detallados de cada uno de los equipos de la instalación. Se necesita una primera distribución en planta de los equipos para una estimación inicial de los costes de tuberías, servicios externos e instrumentación. También se debe incluir una estimación de los costes de los equipos usados en los servicios auxiliares. Para ello se necesita el diagrama de flujo de procesos de la instalación, diagramas isométricos de las tuberías y de disposición de la planta. El coste real de la planta se encuentra entre una cota superior de un 25% por encima del valor estimado y una cota inferior de un 15% por debajo del valor estimado.
- **Estimaciones definitivas.** Estas se basan en especificaciones detalladas de cada equipo, servicio auxiliar, instrumentación, instalación eléctrica y servicios externos. Se necesita el diagrama de flujo de procesos, esquemas de los recipientes, diagramas auxiliares isométricos de las tuberías y de disposición de la planta, y los P&ID previos. El coste real de la planta se encuentra entre una cota superior de un 15% por encima del valor estimado y una cota inferior de un 7% por debajo del valor estimado.
- **Estimaciones detalladas finales.** Para estas estimaciones se necesita la ingeniería de detalle completa del proceso y todos los servicios auxiliares y externos necesarios para el correcto desempeño de la planta. También se necesitan información de los proveedores sobre los costes definitivos de cada uno de los equipos principales. Por tanto, se necesita el diagrama de flujo de procesos, diagrama isométrico de las tuberías e instrumentación, diagrama de disposición de los equipos y disposición de la planta, esquemas de los recipientes y de los equipos principales, y los P&ID definitivos. El coste real de la planta se encuentra entre una cota superior de un 6% por encima del valor estimado y una cota inferior de un 4% por debajo del valor estimado.

En la siguiente imagen (Fig. 33) se puede observar una representación de la precisión de la estimación con el coste de la estimación, es decir, con el trabajo realizado.

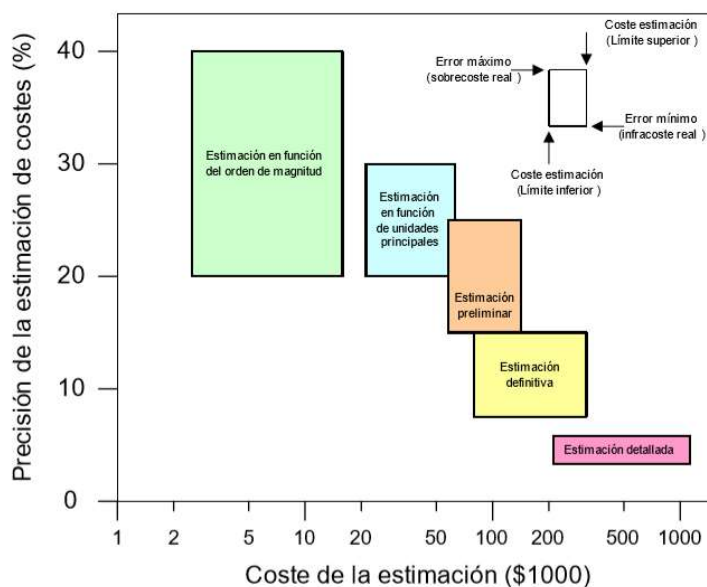


Figura 33. Precisión en los distintos métodos de cálculo de costes

Teniendo en cuenta estos tipos de estimaciones, se ha recogido la información necesaria para realizar el segundo tipo de estimación, calculando la inversión inicial a partir del coste de los principales equipos.

Hay que mencionar que el método usado para calcular los costes de cada equipo es el método de módulo de base de referencia. En el cálculo de los costes de estos equipos va incluido los costes directos (tuberías, estructuras, instrumentación, mano de obra,...) y los costes indirectos (transporte, seguros, impuestos, ingeniería y supervisión,...). Estos costes variarán según el tipo de material usado y las condiciones de operación, ya que este método está basado para calcular equipos a presión atmosférica y fabricados con acero al carbono, por lo que habrá que realizar los cambios necesarios según varíen las condiciones de cada equipo.

Una vez están definidas las condiciones, se procede a calcular los costes de los equipos.

### ➤ Reactores

Para realizar la estimación del coste de los reactores se hará uso del método CAPCOST, que se trata de una correlación de constantes y variables que dependen del dato de dimensionamiento de los reactores que, en este caso, es el volumen. La ecuación (Ec. 26) para el cálculo es la siguiente:

$$\log_{10} C_p^0 = K_1 + K_2 \log_{10}(A) + K_3 [\log_{10}(A)]^2$$

Ecuación 26. Costo de los equipos

Los valores de  $K_1$ ,  $K_2$  y  $K_3$  se obtienen de las tablas de valores de la bibliografía que dependen del tipo de equipo, por lo que los valores para el cálculo de los reactores son los siguientes (Tabla 29):



	VALORES
$K_1$	3.4974
$K_2$	0.4485
$K_3$	0.1074

Tabla 29. Valores de las constantes para cálculo de costos

Cabe mencionar que estos valores están pensados para el cálculo de depósitos verticales, pero se ha tomado el mismo como dato más cercano para su cálculo. De esta forma se estiman los siguientes valores para los distintos reactores (Tabla 30):

	VOLUMEN (M <sup>3</sup> )	COSTE (\$)
REACTOR 1	2	4400
REACTOR 2	3	5400
REACTOR 3	5	7300
REACTOR 4	7	9000
REACTOR 19	0.1	2000
REACTOR 33	0.1	2000
REACTOR 34	3	5400

Tabla 30. Coste de los reactores

Cabe mencionar que los costes de los reactores 19 y 33 se han realizado para un volumen de 0,3 m<sup>3</sup>, ya que por debajo de ese valor la desviación de la estimación es bastante grande. Como se ha mencionado anteriormente, estos costes están calculados para una fabricación de acero al carbono y a presión atmosférica, por lo que se debe recalculan los costes para las distintas condiciones y materiales de fabricación, haciendo uso de la siguiente ecuación (Ec. 27):

$$C_{BM} = C_p^0 (B_1 + B_2 F_M F_P)$$

Ecuación 27. Coste corregido por presión y material

Donde  $B_1$  y  $B_2$  representan constantes,  $F_M$  es un factor de corrección del material y  $F_P$  es un factor de corrección de la presión. Mientras que  $F_M$  se obtiene por unos valores predeterminados según el tipo de material, el factor  $F_P$  se calcula por una ecuación que es la siguiente (Ec. 28):

$$F_P = \frac{\frac{(P + 1)D}{2[850 - 0.6(P + 1)]} + 0.00315}{0.0063}$$

Ecuación 28. Factor de presión

Donde  $P$  es la presión manométrica en bares y  $D$  es el diámetro en metros, suponiendo un grosor de pared mayor a 6,3 milímetros.

Los valores de los mismos vienen representados en la siguiente tabla, junto con los costes corregidos de cada uno de los reactores (Tabla 31):

	$B_1$	$B_2$	$F_M$	$F_P$	COSTE (\$)
REACTOR 1	2.25	1.82	1	1.14	19000
REACTOR 2	2.25	1.82	1	1.23	24000
REACTOR 3	2.25	1.82	1	1.37	35000
REACTOR 4	2.25	1.82	1	1.47	44000
REACTOR 19	2.25	1.82	4.7	1	21000
REACTOR 33	2.25	1.82	4.7	1	21000
REACTOR 34	2.25	1.82	1.7	1.23	33000

Tabla 31. Factores de equipo, material, presión y costes corregidos

➤ **Torres de relleno**

Para el cálculo de los costes de las torres de relleno y sus lechos el método es el mismo que se ha mencionado en el apartado anterior, variando los valores de  $K_1$ ,  $K_2$  y  $K_3$  para los casos de torre y de relleno. Para ambos casos, el dato de dimensionamiento con el que se estiman los costes es el volumen de la torre y del relleno. Así se pueden obtener los costes que se pueden observar en la tabla siguiente (Tabla 32):

	<b>VOLUMEN (M<sup>3</sup>)</b>	<b>K<sub>1</sub></b>	<b>K<sub>2</sub></b>	<b>K<sub>3</sub></b>	<b>F<sub>M</sub></b>	<b>F<sub>P</sub></b>	<b>COSTE (\$)</b>
<b>TORRE 16</b>	14.8	3.4974	0.4485	0.1074	1.7	1.25	90000
<b>RELLENO 16</b>	9.28	2.4493	0.9744	0.0055	1	1	2500
<b>TORRE 21</b>	3.71	3.4974	0.4485	0.1074	1.7	1.25	37000
<b>RELLENO 21</b>	2.14	2.4493	0.9744	0.0055	1	1	600
<b>TORRE 30</b>	4.33	3.4974	0.4485	0.1074	1.7	1.25	41000
<b>RELLENO 30</b>	2.36	2.4493	0.9744	0.0055	1	1	700

Tabla 32. Datos cálculo de costes de torres y rellenos

Hay que destacar que  $F_P$ , en este caso, toma ese valor debido a que las torres trabajan a una presión inferior a 0,5 bares absolutos, lo que significa que trabaja a vacío. En el caso de los lechos no se tiene en cuenta  $F_P$  por lo que se le da un valor de 1.

➤ **Bombas**

En el caso de las bombas su coste se calcula igual que en los dos apartados anteriores, variando los valores de las distintas constantes según el tipo de bomba que se use en cada caso. En la siguiente tabla se puede observar los valores de las constantes y el coste corregido (Tabla 33):

	<b>POTENCIA (KW)</b>	<b>K<sub>1</sub></b>	<b>K<sub>2</sub></b>	<b>K<sub>3</sub></b>	<b>F<sub>M</sub></b>	<b>F<sub>P</sub></b>	<b>COSTE (\$)</b>
<b>BOMBA 22</b>	3.12	3.3892	0.0536	0.1538	1.5	1	11000
<b>BOMBA 26</b>	1.12	3.3892	0.0536	0.1538	1.5	1	10000
<b>BOMBA 35</b>	0.25	3.8696	0.3161	0.122	1.3	1	19000

Tabla 33. Datos cálculo de costes de bombas

En este caso tampoco se tiene en cuenta el factor  $F_P$  ya que la presión de trabajo no es un factor corrector del precio.

➤ **Compresores**

El cálculo de los costes sigue siendo el mismo que en los apartados anteriores, además de que se añade al cálculo el driver que hace funcionar el compresor, como se ve en la siguiente tabla (Tabla 34):

	<b>POTENCIA (KW)</b>	<b>K<sub>1</sub></b>	<b>K<sub>2</sub></b>	<b>K<sub>3</sub></b>	<b>F<sub>M</sub></b>	<b>F<sub>P</sub></b>	<b>COSTE (\$)</b>
<b>COMPRESOR 28</b>	44.72	5.0355	-1.8002	0.8253	2.4	1	49000
<b>DRIVER 28</b>	75	1.956	1.7142	-0.2282	1.5	1	35000

Tabla 34. Datos cálculo de costes de compresor y motor

Tanto en el caso del driver como en el caso del compresor no se tiene en cuenta el factor  $F_P$  porque no influye en la corrección del precio.

➤ **Depósitos**

Para los depósitos no hay variación en el método de cálculo de los costes corregidos, como se ve en la tabla siguiente (Tabla 35):

	VOLUMEN (M <sup>3</sup> )	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	F <sub>M</sub>	F <sub>P</sub>	COSTE (\$)
<b>DEPOSITO 8</b>	5.45	3.5565	0.3776	0.0905	1	1.15	25000
<b>DEPOSITO 11</b>	5.3	3.5565	0.3776	0.0905	1	1.09	24000
<b>DEPOSITO 12</b>	5.2	3.5565	0.3776	0.0905	1	1.07	23000
<b>DEPOSITO 13</b>	5.1	3.5565	0.3776	0.0905	1	1.07	23000
<b>DEPOSITO 18</b>	3.5	3.5565	0.3776	0.0905	1	1.25	21000
<b>DEPOSITO 37</b>	0.3	3.4974	0.4485	0.1074	1.7	1.25	12000
<b>DEPOSITO 14</b>	1.32	3.4974	0.4485	0.1074	1.7	1	19000
<b>DEPOSITO 36</b>	1.8	3.5565	0.3776	0.0905	1	1.25	15000

Tabla 35. Datos cálculo de costes de depósitos

Cabe destacar que, si durante el cálculo de F<sub>P</sub> este obtiene un valor menor a 1, se le asigna valor 1 al mismo.

➤ **Intercambiadores de calor**

Para los intercambiadores de calor el método de cálculo no varía, teniendo en cuenta que en este caso cada tipo de intercambiador influye en las constantes de cálculo, como se ve en la tabla siguiente (Tabla 36):

	VOLUMEN (M <sup>3</sup> )	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	F <sub>M</sub>	F <sub>P</sub>	COSTE (\$)
<b>EXCHANGER 23</b>	10	4.3247	-0.303	0.1634	1.4	1	61000
<b>EXCHANGER 32</b>	1.2	3.3444	0.2745	-0.0472	1	1	8000
<b>EXCHANGER 24</b>	246	4.1884	-0.2503	0.1974	1.7	1	233000
<b>EXCHANGER 27</b>	19.5	4.3247	-0.303	0.1634	1.4	1	64000
<b>EXCHANGER 20</b>	11	4.3247	-0.303	0.1634	4.7	1	145000
<b>EXCHANGER 29</b>	13.3	4.3247	-0.303	0.1634	1.4	1	61000
<b>EXCHANGER 42</b>	3.73	3.3444	0.2745	-0.0472	1	1	10000
<b>EXCHANGER 37</b>	4.17	3.3444	0.2745	-0.0472	1	1	10000
<b>EXCHANGER 38</b>	1.28	3.3444	0.2745	-0.0472	1.4	1	9000
<b>EXCHANGER 40</b>	1.4	3.3444	0.2745	-0.0472	1	1	8000
<b>EXCHANGER 41</b>	7	3.3444	0.2745	-0.0472	4.7	1	31000

Tabla 36. Datos cálculo de costes de intercambiadores de calor

Cabe destacar que en varios de estos intercambiadores se ha usado titanio para evitar corrosión y en otros se ha usado cobre para evitar el ataque del hidrogeno a los materiales.

Una vez calculados todos los costes de los equipos principales se realiza la suma conjunta para obtener el coste de la inversión inicial, por lo que se obtiene un coste total de 1.290.000 \$. Hay que tener en cuenta que este coste está reflejado para el año 2001, el año de inicio de este proyecto es en 2018, por lo que se habrá producido inflación o depreciación de los precios con el transcurso de los años. Para medir esta variación de los precios se hace uso del Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI). Conociendo el CEPCI de cada año se puede obtener una estimación del coste para el año planteado haciendo uso de la siguiente formula (Ec. 29):

$$\frac{C_1}{C_2} = \frac{I_1}{I_2}$$

*Ecuación 29. Correlación entre coste e índice CEPCI*

Para 2001 el CEPCI tiene un valor de 397 mientras que el valor del CEPCI para 2018 es de 603, por lo que el coste estimado para 2018 es de 1.970.000 \$.

Además, a este coste se le deben añadir unos costes adicionales debido a contingencias comunes como problemas meteorológicos, huelgas o pequeños cambios de diseño y a la tarifa del contratista. También se le deben añadir los costes de acondicionamiento del emplazamiento, costes de implantación de edificios auxiliares y costes de sistemas externos auxiliares como almacenes de materia primas o de producto terminado, muelles de carga equipos de suministro de utilities, ... Este cálculo se realiza con la siguiente formula (Ec. 30):

$$C_{GR} = 1.68 \sum_{i=1}^n C_{BM,i}$$

*Ecuación 30. Coste de inversión inicial*

Donde  $C_{GR}$  es la inversión inicial, la cual se obtiene un valor de inversión inicial de unos 3.300.000 \$, que al convertirlo a euros se obtiene un valor de 2.900.000 €.

Una vez calculada la inversión inicial se necesita calcular los costes de producción, estos son los costes relacionados con la compra de utilities, materias primas, tratamientos de corrientes residuales, electricidad o sueldos de trabajadores para poder llevar a cabo la producción día a día. En la siguiente tabla se recogen todos los tipos de costes que se pueden encontrar durante la producción, al igual que las estimaciones de algunos de ellos (Tabla 37):

<b>COSTES DIRECTOS (DMC)</b>		
<b>MATERIAS PRIMAS</b>		$C_{RM}$ Productos empleados en el proceso principal
<b>TRATAMIENTO RESIDUOS</b>		$C_{WT}$ Tratamiento de residuos para cumplir normativa medioambiental
<b>UTILITIES</b>		$C_{UT}$ Servicios auxiliares necesarios para el proceso
<b>MANO DE OBRA</b>		$C_{OL}$ Personal necesario para operar la planta
<b>SUPERVISION ADMINISTRACION</b>	Y	$0.18C_{OL}$ Personal administrativo y de ingeniería
<b>MANTENIMIENTO REPARACIONES</b>	Y	$0.06C_{GR}$ Mano de obra y material para mantenimiento
<b>SUMINISTROS</b>		$0.15(0.06C_{GR})$ Suministros necesarios para operar la planta (EPIs, lubricantes,...)
<b>SUMINISTROS LABORATORIO</b>	DE	$0.15C_{OL}$ Material de laboratorio para control de calidad y localizar fallos
<b>PATENTES Y DERECHOS DE PROPIEDAD INDUSTRIAL</b>		$0.03COM$
<b>COSTES FIJOS (FMC)</b>		
<b>DEPRECIACION</b>		$0.1C_{GR}$ Amortización de obra civil y equipos
<b>IMPUESTOS LOCALES Y SEGUROS</b>	Y	$0.032C_{GR}$
<b>COSTES GENERALES (OVERHEAD)</b>		$0.6(C_{OL}+0.18C_{OL}+0.06C_{GR})$ Incluye costes asociados a la operación de los servicios auxiliares
<b>COSTES GENERALES (GE)</b>		
<b>COSTES ADMINISTRACION</b>	DE	$0.15(C_{OL}+0.18C_{OL}+0.06C_{GR})$ Gestión de salarios, nominas, edificios y otras actividades
<b>COSTES DE DISTRIBUCION Y VENTAS</b>	Y	$0.11COM$ Costes necesarios para marketing y ventas de producto
<b>I+D</b>		$0.05COM$ Actividades de investigación relacionadas con proceso productivo.

Tabla 37. Lista tipos de costes productivos

En la tabla anterior el término COM hace referencia al coste de producción de la planta (Cost Of Manufacturing) que es el coste buscado.

Así el COM se puede expresar como la suma de los tres tipos de costes desglosados antes, por lo que se obtendría la siguiente ecuación (Ec. 31):

$$COM = 0.28C_{GR} + 2.73C_{OL} + 1.23(C_{UT} + C_{WT} + C_{RM})$$

Ecuación 31. Cálculo costes de producción

También se puede calcular el coste total de producción teniendo en cuenta la depreciación, que se calcularía de la siguiente manera (Ec. 32):

$$COM_d = 0.18C_{GR} + 2.73C_{OL} + 1.23(C_{UT} + C_{WT} + C_{RM})$$

*Ecuación 32. Calculo costes de producción con depreciación*

Antes de calcular el coste final de producción hay que mencionar los precios con los que se van a calcular los distintos costes.

Para empezar, se exponen los costes de las utilities usadas como el coste del agua de refrigeración, que según las tarifas para industria de EMUASA es de 1,39122 €/m<sup>3</sup>. El precio del vapor de agua se calcula usando [17], conociendo el precio del carburante que se usa para calentar que, en este caso, es gasolina y cuesta 1,5 \$/L, por lo que al cálculo se obtiene vapor de agua de baja presión que produce un coste de 154,72 \$/Ton. El costo de la electricidad para uso industrial es de 0,083 según la última actualización del Ministerio de Industria, Comercio y Turismo. Se usan también otros refrigerantes como el amoniaco liquido saturado, que tiene un precio de 269 \$/Ton, y propilenglicol al 10%, que tiene un precio de 132 €/Ton.

En cuanto a materias primas la mayoría de sus precios se han obtenido a través de ICIS. La materia prima principal es el cumeno, cuyo precio es de 925 €/Tm, y la siguiente materia prima es el hidrógeno, cuyo valor es de 2 €/m<sup>3</sup> según Air Liquide. También se tienen otras materias primas secundarias como el ácido sulfúrico, el cual hace de catalizador durante la escisión, que tiene un valor de 230 \$/Ton. Después está el catalizador de paladio, cuyo precio es de 128 \$/kg y con la suposición de que tiene una vida media de 6 meses, el cloruro de calcio que actúa de desecante, cuyo precio es de 150 \$/Ton, y el hidróxido sódico que tiene un valor de 325 \$/Ton.

Además, se debe de tener en cuenta que se producen costes por verter residuos al alcantarillado, el cual tiene un precio de 0,661 €/m<sup>3</sup> según EMUASA.

Por último hay que calcular el número de operarios que se necesitarán para operar la planta. Este cálculo se puede estimar a través de la siguiente ecuación (Ec. 33):

$$N_{OL} = (6.29 + 0.23N_{np})^{0.5}$$

*Ecuación 33. Calculo número de trabajadores mínimo por turnos*

Donde  $N_{OL}$  representa el número de operarios por turno y  $N_{np}$  es el número de etapas de procesos no sólidos, por lo que se obtiene un número de 3,37 operarios. La planta trabajará las 24 horas del día, por lo que habrá que contar con tres turnos de ocho horas cada uno. Además, por cada operador se contratan 5 operarios más, por lo que se obtiene un total de 17 operarios. Por último, el salario medio de los operarios de plantas químicas en España es de unos 1600 € netos al mes.

Así una vez expuestos todos los precios que se van a tener en cuenta se puede hacer el cálculo de cada uno de los costes como se ve en la siguiente tabla (Tabla 38):

	<b>DEMANDA (KG/H)</b>	<b>COSTE (€)</b>
<b>CUMENO</b>	8000	70.850.000
<b>ACIDO SULFURICO</b>	202,5	344000
<b>HIDROGENO</b>	11	965.000
<b>CATALIZADOR</b>	1500 kg cada 6 meses	338.000
<b>HIDROXIDO SODICO</b>	0.0047	11
<b>CLORURO CALCICO</b>	2070	2.300.000
<b>VAPOR BAJA</b>	8706	10.000.000
<b>AGUA REFRIGERACION</b>	328800	3.900.000
<b>AMONIACO</b>	7680	15.000.000
<b>PROPILEGLICOL 10%</b>	8900	9.900.000
<b>ELECTRICIDAD</b>	75 kW	15.000
<b>ALCANTARILLADO</b>	354086	2.000.000
<b>OPERARIOS</b>	17 operadores	330.000

Tabla 38. Coste de materias primas

Conociendo estos costes se pueden obtener cada uno de los costes descritos anteriormente y obtener el coste de producción siguiendo la fórmula descrita anteriormente, como se puede ver en la siguiente tabla (Tabla 39):

	<b>COSTES (€)</b>
<b>COSTES UTILITIES</b>	41.300.000
<b>COSTES TRATAMIENTOS RESIDUALES</b>	2.000.000
<b>COSTES MATERIAS PRIMAS</b>	70.600.000
<b>COSTES OPERADORES</b>	326.000

Tabla 39. Costes de producción finales

Con estos datos se obtiene finalmente un coste anual total de producción de 141.700.000 €. Como se puede observar los costes de producción son muy superiores a la inversión inicial, lo que suponen unos gastos considerables.

Finalmente se calculan los posibles ingresos entrantes por la venta de la acetona atendiendo a los valores de mercado de la acetona y la cantidad de kilos producidos, con lo que se obtiene un ingreso de 21.000.000€.

## 11. Estudio de rentabilidad

En este punto se pasará a estudiar la rentabilidad de la planta para determinar si la planta es viable para su instalación. Para ello se verán los flujos de caja netos, los cuales sirven para calcular el VAN y el TIR que es un buen indicativo de la viabilidad o rentabilidad del proyecto.

Primero se calcula el Beneficio Bruto (BB), que es la diferencia entre los ingresos por venta y el coste total de producción. Hay que mencionar que en este primer cálculo no se tiene en cuenta la depreciación en los costes de producción, por lo que el cálculo sería el siguiente:

$$BB = 21.000.000 - 141.700.000 = -120.700.000\text{€/año}$$

Para llegar al VAN se necesitan calcular algunos datos más, pero solo viendo el beneficio bruto ya se puede deducir que la planta no es rentable.

Esto se debe a que los costes de operación son mucho mayores que los ingresos, seguramente debido a que los volúmenes de producción son bajos para una planta de este tipo.

También hay que tener en cuenta que el precio del cumeno se sitúa sobre los 900 €/Tn cuando se usan 8000 kg/h de cumeno, mientras que el precio de la acetona se sitúa sobre los 950 €/Tn cuando se producen sobre unos 2950 kg/h de acetona, por esto no se superan los gastos.

Otra razón es que en este proceso se crea otro producto de gran valor comercial como es el fenol, el cual tiene un precio de mercado de unos 1590 €/Tn cuando se están produciendo unos 5000 kg/h lo cual supone un gran ingreso.

En contraposición se va a proponer un escenario hipotético donde la planta podría ser rentable modificando los costes de producción.

Para empezar, en este escenario se tomará en cuenta que el fenol producido también es comercializado, pero aumentando su precio un 10%, aunque sin tener en cuenta el coste de los equipos de separación para obtener el fenol en condiciones de comercializar. Igualmente, la acetona se ha aumentado su precio a 1050 \$/ton, así se pueden aumentar los ingresos. En cuanto a los gastos se ha reducido el coste del cumeno a 750 €/ton.

Se ha reducido el coste del vapor de baja a 80 \$/ton y el amoniaco se ha reducido a 90 \$/ton. En cuanto al agua de refrigeración se ha asumido que se recircula toda el agua y se vuelve a enfriar por torres de refrigeración, por lo que no se elimina los costes de la compra constante de agua de refrigeración, aunque no se calculan los costes del mantenimiento del agua en su recirculación como el control de la dureza del agua, ni el coste de las torres de refrigeración. Por último, se reduce también el coste del propilenglicol a 70 €/ton.

Así los nuevos costes de producción quedan de la siguiente manera (Tabla 40):

	<b>PRECIO (€)</b>
<b>CUMENO</b>	57.440.000
<b>ACIDO SULFURICO</b>	344.000
<b>HIDROGENO</b>	965.000
<b>CATALIZADOR</b>	338.000
<b>HIDROXIDO SODICO</b>	11
<b>CLORURO CALCICO</b>	2.300.000
<b>VAPOR BAJA</b>	5.148.000
<b>AMONIACO</b>	5.110.000
<b>PROPILENGLICOL 10%</b>	5.230.000
<b>ELECTRICIDAD</b>	15.000
<b>ALCANTARILLADO</b>	2.000.000
<b>OPERARIOS</b>	330.000
<b>ACETONA</b>	23.100.000
<b>FENOL</b>	73.900.000

Tabla 40. Nuevo escenario de precios

Con estos nuevos costes e ingresos se recalculan los costes de producción como se ve a continuación (Tabla 41):

	<b>COSTES (€)</b>
<b>COSTES UTILITIES</b>	17.800.000
<b>COSTES TRATAMIENTOS RESIDUALES</b>	160.000
<b>COSTES MATERIAS PRIMAS</b>	59.100.000
<b>COSTES OPERADORES</b>	326.000

Tabla 41. Costes de producción en escenario favorable



Con estos costes finalmente se obtiene unos costes de producción totales de 96.200.000 € al año.

Con estos nuevos datos se puede realizar de nuevo el estudio de rentabilidad de la planta.

El estudio se realizaría como se ha comentado antes, primero se calcula el Beneficio Bruto de la planta de la siguiente manera (Ec. 34):

$$BB = IV - COM$$

*Ecuación 34. Cálculo de beneficio bruto*

Obteniéndose un valor de 545.000 €/año.

Después se calcula el Beneficio Neto Antes de Impuestos (BNAI). Este se calcula descontándole al BB la depreciación (D) de la siguiente como se ve en la siguiente ecuación (Ec. 35):

$$BNAI = BB - D$$

*Ecuación 35. Calculo de beneficio neto antes de impuestos*

La depreciación se calcula tomando la diferencia entre los costes totales de producción con y sin depreciación como se ha visto antes, obteniendo un valor de 291.000 €/año y, por tanto, un BNAI de 253.000 €/año.

A continuación, se calcula el Beneficio Neto Después de Impuestos (BNDI) al que se le descuenta la cantidad determinada por la tasa legal impositiva (i), que suele ser del 25% como se ve en [13], y que se determina con la siguiente ecuación (Ec. 36):

$$BDAI = BNAI * (1 - i)$$

*Ecuación 36. Calculo beneficio después de impuestos*

Por lo que se obtiene un beneficio de 189.700 €/año.

Finalmente se calcula el Flujo de Caja (FC), que es el BNDI al que se le añade la depreciación, obteniéndose el beneficio final como se ve a continuación (Ec. 37):

$$FC = BNDI + D$$

*Ecuación 37. Calculo flujo de caja*

Se obtiene al final un beneficio de 481.000 €/año.

Una vez obtenidos estos datos se puede calcular el VAN (Valor Actual Neto) y el TIR (Tasa Interna de Retorno) para comprobar la rentabilidad de la planta.

El VAN es el valor actualizado de los futuros flujos de caja que se van a generar teniendo en cuenta el interés del préstamo y comparar con la inversión inicial, como se ve en la siguiente ecuación (Ec. 38):

$$VAN = -I + \sum_{j=1}^n \frac{FC_j}{(1+i)^j}$$

*Ecuación 38. Cálculo de VAN*

Si el VAN es positivo la planta es rentable. Este es el método más usado para el estudio de la rentabilidad de un proyecto.

El TIR es el interés máximo que igual el VAN a cero. De esta forma podemos ver el interés necesario en la planta para obtener beneficio. Este se calcula de la siguiente manera (Ec. 39):

$$0 = -I + \sum_{j=1}^n \frac{FC_j}{(1+i)^j}$$

*Ecuación 39. Cálculo del TIR*

Se calcula el TIR para un periodo de 10 años. Al inicio, el primer flujo de caja es la inversión inicial y a partir de ahí se calculan los futuros flujos de caja para los próximos 10 años como se ve a continuación (Tabla 42):

<b>AÑOS</b>	<b>FULO DE CAJA (€)</b>
<b>0</b>	-2.912.000
<b>1</b>	-2.576.705
<b>2</b>	-2.248.691
<b>3</b>	-1.928.321
<b>4</b>	-1.615.977
<b>5</b>	-1.312.060
<b>6</b>	-1.016.992
<b>7</b>	-731.216
<b>8</b>	-455.195
<b>9</b>	-189.419
<b>10</b>	65.602

*Tabla 42. Tabla de flujos de caja*

Estos flujos de caja producen un VAN de cero para un TIR del 5%, que es un TIR aceptable, aunque algo bajo en el mercado. Como se puede ver, para este tipo de interés la planta se amortiza en un periodo de 10 años.

## 12. Conclusiones

Después de realizar el estudio de rentabilidad se puede observar que la planta no es rentable para la simple producción de acetona, sino que se necesita la obtención del fenol también para poder llegar a rentabilizar la planta. También hay que tener en cuenta que aun así la planta no llega a ser del todo rentable en estas condiciones, ya que los volúmenes de producción son bastante bajos y los precios propuestos para su rentabilidad están fuera del mercado actual, por lo que se debería aumentar los volúmenes de producción y ventas para poder llegar a rentabilizar la planta con unos precios de compra-venta más reales.

### 13. Referencias bibliográficas

- [1] National Center for Biotechnology Information, «National Center for Biotechnology Information,» PubChem Compound Database, [En línea]. Available: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acetone>.
- [2] IHS Chemical Economic Handbooks, «IHS,» IHS, Junio 2019. [En línea]. Available: <https://www.ihs.com/products/acetone-chemical-economics-handbook.html>.
- [3] FMI (Future Market Insights), «Future Market Insights,» Junio 2019. Available: <http://www.futuremarketinsights.com/reports/acetone-market>.
- [4] Aspen Technology, Inc (1996). *Don't Gamble With Physical Properties For Simulations*. Noviembre 2018.  
<https://pdfs.semanticscholar.org/2fd4/2d66fb3a658a01d7bcd4c4c025a72c6f5e88.pdf>
- [5] BRANAN, C.R. (2002). *Rules of Thumb for Chemical Engineers. Third edition*. Amsterdam; New York: Gulf Professional Pub
- [6] ZAKOSHANSKY, V. (2009). "Phenol process celebrates its 60th anniversary: The role of chemical principles in technological breakthroughs" en *Russian Journal of General*. 2009, Vol. 79, Ejemplar 10, Paginas 2244-2266.
- [7] KLEINLOH W., MICHALIK C., «Process for production of phenol and acetone from cumene». Patente US6225513 b1, 01 Mayo 2001.
- [8] CAVALIERI D'ORO (1992). "Phenol-acetone process: cumene oxidation kinetics and industrial plant simulation" en *Chemical Engineering Science*. Vol. 47, Nº 9-11, paginas 2511-2516.
- [9] KERN, D. Q (1999). *Procesos de transferencia de calor*: Compañía Editorial Continental, S.A
- [10] VALÉRIE M, DE BELLEFON C, SCHWEICH D. (2002). "Kinetics of  $\alpha$ -Methylstyrene Hydrogenation on Pd/Al" en *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2002, Vol. 41, Ejemplar 7, Paginas 1711-1715.
- [11] HENLEY, Ernest. Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química. Editorial Reverte. John Wiley & sons. 1988.
- [12] TURTON R, BAILIE R.C, WHITING W.B, SHAEIWITZ J.A (1998). *Analysis, synthesis, and design of chemical processes, 3rd ed.* (2001) New York: Prentice Hall
- [13] Agencia Tributaria, «agenciatributaria,» Gobierno de España, [En línea]. Available: [http://www.agenciatributaria.es/AEAT.internet/Inicio/\\_Segmentos\\_/Empresas\\_y\\_profesionales/Empresas/Impuesto\\_sobre\\_Sociedades/Periodos\\_impositivos\\_a\\_partir\\_de\\_1\\_1\\_2015/Tipos\\_de\\_gravamen/Tipos\\_de\\_gravamen\\_aplicable\\_a\\_periodos\\_impositivos\\_iniciados\\_en\\_el\\_ano](http://www.agenciatributaria.es/AEAT.internet/Inicio/_Segmentos_/Empresas_y_profesionales/Empresas/Impuesto_sobre_Sociedades/Periodos_impositivos_a_partir_de_1_1_2015/Tipos_de_gravamen/Tipos_de_gravamen_aplicable_a_periodos_impositivos_iniciados_en_el_ano).
- [14] McGraw-Hill, Enciclopedia Salvat, Ciencia y Tecnología, 1964.
- [15] PETERS M.S., TIMMERHAUS K.D., WEST R.E., *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. New York: McGraw-Hill, 2003
- [16] HATTORI K, TANAKA Y, SUZUKI H, IKAWA T y KUBOTA H. (2002). "Kinetics of liquid phase oxidation of cumene in bubble column" en *Journal of Chemical Engineering of Japan*. 1970, Vol. 3, Ejemplar 1, Paginas 72-78.

[17] TLV. *Compañía Especialista en Vapor*. [Consulta: Mayo 2019]  
<https://www.tlv.com/global/LA/calculator/>

[18] VAQUERO ACEVEDO, F. J (2016). *Ingeniería Conceptual de una Planta de Producción de Acetona*. Trabajo de Fin de Grado. Universidad de Sevilla.

[19] D. F. O. Raymond E. Kirk, *Enciclopedia de la Tecnología Química*, 1995.

[20] ERTISA, *Planta de fenol*, [En línea]. Available:  
<http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/4382/fichero/INTRODUCCION%252Fintroduccion.pdf>.

# Anexo 1

