



Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

Trabajo de Fin de Grado

Curso Académico 2022/2023

**Diseño de un proceso de
obtención de butilfenoles a partir
de derivados de la lignina**

Jorge Rodríguez Fresco



Universidad
Rey Juan Carlos

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

Trabajo de Fin de Grado

El presente trabajo, titulado “DISEÑO DE UN PROCESO DE OBTENCIÓN DE BUTILFENOL A PARTIR DE DERIVADOS DE LA LIGNINA”, constituye la memoria correspondiente a la asignatura Trabajo de Fin de Grado que presenta D JORGE RODRÍGUEZ FRESCO como parte de su formación para aspirar al título de Graduado en Ingeniería Química. Este trabajo ha sido realizado en la UNIVERSIDAD REY JUAN CARLOS, en el Departamento de TECNOLOGÍA QUÍMICA, ENERGÉTICA Y MECÁNICA.

Móstoles, Junio de 2023

Contenido

1.RESUMEN.....	1
2. INTRODUCCIÓN	3
2.1 ANTECEDENTES. PANORAMA ENERGETICO ACTUAL	3
2.2 PRODUCTO DESEADO Y REACTIVOS	4
2.3 DISOLVENTE UTILIZADO. DODECANO	8
2.4 CATALIZADOR EMPLEADO	8
2.5 REACCION DE ALQUILACION DE FENOL.....	9
3. OBJETIVOS	11
4.SOLUCIÓN TECNICA	12
4.1 DIAGRAMA DE BLOQUES	12
4.2 DIAGRAMA DE FLUJO.....	14
4.2.1 Etapa de alquilación de fenol.....	18
4.2.2 Separación de etileno.....	23
4.2.3 Separación del butilfenol y diisopropilfenol del resto de compuestos.	24
4.2.4 Etapa de separación del butilfenol y el diisopropilfenol.....	26
4.3 DISEÑO Y DIMENSIONAMIENTO DE EQUIPOS.....	27
4.3.1. Diseño Reactor R101.....	27
4.3.2 Diseño columna D-101	28
4.3.2.1 Optimización columna D-101	29
4.3.3.Diseño columna D-102.....	32
4.3.3.1 Optimización columna D-102	35
5.ANALISIS ECONOMICO DE LA PLANTA	38
5.1 Inversión necesaria	38
5.2 Coste de operación de la planta	39
5.3 Coste materias primas.....	40
5.4 Estudio de rentabilidad de la planta.....	40
6 .CONCLUSIONES	44
7 .BIBLIOGRAFÍA	45
ANEXO.....	46
ANEXO 1. DETALLES DE LA SIMULACIÓN.....	46

ANEXO 2. CÁLCULOS REALIZADOS DEL REACTOR	47
ANEXO3. CALCULO Y COSTES DE LOS EQUIPOS	60
3.1 DIMENSIONAMIENTO DEL REACTOR	60
3.2 COLUMNA D101	65
3.3 DEPOSITO.....	73
3.4 MEZCLADOR	76
3.5 DIMENSIONAMIENTO DE LA COLUMNA D-102	78
3.6 DIMENSIONAMIENTO Y COSTE DE BOMBAS.....	83
3.6.1 BOMBA B101.....	83
3.6.2 BOMBA G102.....	85
3.6.3 BOMBA G103.....	86
3.6.4 BOMBA G104.....	88
3.7 COLUMNAS FLASH	89
3.8 CAMBIADORES DE CALOR	90
3.8.1 CAMBIADOR E101	90
3.8.2 CAMBIADOR E102	91
3.8.3 CAMBIADOR E103	91
3.8.4 CAMBIADOR E104	91
3.8.5 CAMBIADOR E105	92
3.8.6 CAMBIADOR E106	92
ANEXO 4. RESULTADOS VAN.RENTABILIDAD DEL PROYECTO.....	93

FIGURAS

Figura 1. Consumo de energía primaria mundial en 2019 y variación del consumo de energía y de las emisiones de CO ₂ respecto al año 2018.....	3
Figura 2. Fórmula molecular 4-butilfenol	5
Figura 3. Fórmula molecular fenol	5
Figura 4. Compuestos obtenidos de la fracción líquida al realizar la pirólisis de la biomasa	7
Figura 5. Fórmula molecular 2-propanol.....	7
Figura 6. Deshidratación de 2-propanol a propeno	9
Figura 7. Proceso de obtención del butilfenol a partir de propeno	10
Figura 8. Proceso de obtención de diisopropilfenol a partir de la alquilación del fenol con 2-propanol	10
Figura 9. Diagrama de bloques del proceso	12
Figura 10. Representación esquemática del diagrama de flujo	14
Figura 11. Representación esquemática del diagrama de flujo	15
Figura 12. Árbol de decisión para la selección de modelo termodinámico de Aspen.....	46
Figura 13. Diagrama T-xy del dodecano y butilfenol a 1 bar.....	65
Figura 14. Diagrama T-xy del dodecano y butilfenol a 3 bar.....	65
Figura 15. Diagrama T-xy del dodecano y butilfenol a 5 bar.....	65
Figura 16. Tabla de valores de R y P para la obtención del factor de corrección	68
Figura 17. Fijación de las temperaturas para los cambiadores de calor (Approach)	90

TABLAS

Tabla 1. Datos bibliográficos utilizados en la tesis de Alba García Minguillán	18
Tabla 2. Valores de entrada a escala de laboratorio de cada uno de los compuestos	21
Tabla 3. Valores de entrada a escala de laboratorio de cada uno de los compuestos	21
Tabla 4. Valores de entrada a escala industrial de cada uno de los compuestos	22
Tabla 5. Valores de salida a escala industrial de cada uno de los compuestos.....	22
Tabla 6. Valores de entrada y salida de la columna flash de cada uno de los compuestos	23
Tabla 7. Valores de entrada y salida de la segunda columna flash de cada uno de los compuestos	24
Tabla 8. Temperatura de ebullición de los compuestos del proceso a temperatura ambiente	25
Tabla 9. Datos obtenidos de la columna D101 para cada uno de los compuestos.....	25
Tabla 10. Datos de la corriente que se introduce de nuevo en el mezclador	26
Tabla 11. Datos de las corrientes de la columna D102.....	26
Tabla 12. Datos de la corriente del reactor R101	27
Tabla 13. Etapas y reflujo de la zona 2 en la columna D-101	30

Tabla 14. Coste de cada columna con un número determinado de pisos teóricos y razón de reflujo según la zona 2.	31
Tabla 15. Valores obtenidos columna D101.	32
Tabla 16. Etapas y reflujo de la zona 2 en la columna D102	36
Tabla 17. Coste de cada columna con un número determinado de pisos teóricos y razón de reflujo según la zona 2.	36
Tabla 18. Valores obtenidos columna D102.	37
Tabla 19. Coste de todos los equipos.	38
Tabla 20. Cálculo de la inversión necesario. Método de porcentajes.	39
Tabla 21. Gastos anuales servicios auxiliares.	39
Tabla 22. Gastos anuales de materias primas.	40
Tabla 23. Ventas de productos obtenidos según precios del mercado.	40
Tabla 24. Ventas obtenidas para los diferentes casos estudiados.	41
Tabla 25. Valores obtenidos para las L/D estudiadas del reactor	63
Tabla 26. Valores obtenidos para las L/D estudiadas del reactor	64
Tabla 27. Valores obtenidos para las L/D estudiadas del depósito	75
Tabla 28. Valores obtenidos para las L/D estudiadas del mezclador	77
Tabla 29. Valor de un equipo buscado bibliográficamente siguiendo el método de Williams	89
Tabla 30. Dimensionamiento intercambiador E101	90
Tabla 31. Costes variables y fijos del intercambiador E101	90
Tabla 32. Dimensionamiento intercambiador E102	91
Tabla 33. Costes variables y fijos del intercambiador E102	91
Tabla 34. Dimensionamiento intercambiador E103	91
Tabla 35. Costes variables y fijos del intercambiador E103	91
Tabla 36. Dimensionamiento intercambiador E104	91
Tabla 37. Costes variables y fijos del intercambiador E104	92
Tabla 38. Dimensionamiento intercambiador E105	92
Tabla 39. Costes variables y fijos del intercambiador E105	92
Tabla 40. Dimensionamiento intercambiador E106	92
Tabla 41. Costes variables y fijos del intercambiador E106	92
Tabla 42. VAN Caso A	93
Tabla 43. VAN Caso B	93
Tabla 44. VAN Caso C	94
Tabla 45. VAN Caso D	94
Tabla 46. VAN Caso E	95

GRÁFICAS

Gráfica 1.Presión frente al calor utilizado del reboiler en columna D101	28
Gráfica 2.Nº de etapas reales frente a razón de reflujo columna D101	29
Gráfica 3.Calor empleado frente a presión a una composición de 95% y 97% de pureza de butilfenol	32
Gráfica 4.Nº de etapas frente a presión a una composición de 95% y 97% de pureza de butilfenol.....	33
Gráfica 5.Razón de reflujo frente a presión a una composición de 95% y 97% de pureza de butilfenol	33
Gráfica 6.Presión frente al calor aportado del reboiler para las diferentes presiones para una pureza de 97%.....	34
Gráfica 7.Nº de etapas reales frente a razón de reflujo columna D102.....	35
Gráfica 8.Rentabilidad del proyecto según el caso estudiado	42
Gráfica 9.Relación de cada uno de los costes anuales de la planta	43

1.RESUMEN

La preocupación por el medio ambiente ha dejado de estar en segundo plano para convertirse en un tema de gran importancia, llevando a las empresas de diferentes sectores al desarrollo de nuevas alternativas sostenibles que acaben con el uso de combustibles fósiles y así reducir los gases de efecto invernadero, en especial al uso de CO_2 . Otra preocupación que le surgen a estas empresas es que los combustibles fósiles tienen 'Fecha de caducidad', lo cual implica que en un futuro se prevé un incremento de los precios, generando una inestabilidad económica. Debido a esto, el desarrollo de productos químicos como el butilfenol, a partir de recursos renovables, en vez de su producción habitual, que es a partir de combustibles fósiles, consigue reducir los gases de efecto invernadero (GEI), además de ser una fuente renovable, limpia e inagotable, ya que el butilfenol provendría de biomasa lignocelulósica, eliminando la dependencia hacia la materia prima fósil como el petróleo.

Actualmente, el proceso más utilizado en Europa para la obtención de fenol es el de la oxidación del cumeno a través del proceso cumeno-fenol. El cumeno-fenol es un compuesto que se deriva del benceno y propileno que, a su vez, se obtienen a partir de materias primas petroquímicas como el petróleo crudo y el gas natural. Ante la posibilidad de sustituir este proceso por una ruta alternativa limpia y renovable, en el presente trabajo de fin de grado se propone el desarrollo de un proceso a partir de fenol obtenido de forma limpia y renovable sometiendo a la biomasa lignocelulósica a una serie de tratamientos químicos con el fin de obtener el fenol de forma limpia, lo que a través de una reacción de alquilación de fenol a través de un reactor de mezcla perfecta de tipo Camberry, se produce el butilfenol, compuesto de gran interés para el desarrollo de membranas terc-butílicas.

Este trabajo de fin de grado se centra en el desarrollo de una planta que consiga transformar el fenol obtenido de manera renovable, el 2-pronanol y el dodecano en el compuesto de interés, el butilfenol. Cabe destacar en el reactor se producen dos reacciones, por lo que se obtendrá una serie de compuestos que se tendrán que ir eliminando para poder maximizar la pureza del butilfenol, fijado en un valor de 97% ante la complejidad de separación ante el otro compuesto de interés, el diisopropilfenol, al tener temperaturas de ebullición similares. Un factor importante en el reactor es la utilización del catalizador h-ZSM5, ya que es un catalizador que favorece la producción a la salida del reactor de butilfenol y diisopropilfenol y que obtenga una conversión de fenol significativa (39%).

Para la resolución del proceso se han cogido los datos experimentales de la tesis de Alba García Minguillán, que junto a estudios de mercado del butilfenol, se han podido fijar los parámetros necesarios para la resolución y elaboración de la planta. El valor obtenido en estudios de mercado abarca el mercado en Europa y Asia, donde se estima una producción de 3500 tm/año, lo que implica un valor de 400 kg/h.

Por último, mediante la realización de un estudio económico, se estudian los costes de operación que le supone a la planta producir butilfenol. Conocido el gasto anual de la planta y el volumen de butilfenol producido anualmente, se llega a la conclusión que para que el proceso salga rentable el valor del butilfenol tiene que estar a 40 € por encima de su valor de mercado actual, fijado a 315,20 €/kg. Esto significa que el butilfenol obtenido de este proceso actualmente no es competitivo frente al butilfenol obtenido de los combustibles fósiles, siendo necesario llevar a cabo optimizaciones en el proceso y nuevos avances e investigaciones.

2. INTRODUCCIÓN

2.1 ANTECEDENTES. PANORAMA ENERGETICO ACTUAL

Los combustibles fósiles (petróleo, carbón y gas natural principalmente) han sido utilizados durante los últimos siglos como fuentes de energía, así como materia prima para la industria en la elaboración de productos derivados de ellos.

En la actualidad, debido al crecimiento de la población y la industrialización a nivel mundial, se ha producido un aumento del consumo de recursos energéticos. Esto es un problema a medio y largo plazo ya que su uso continuado, junto con el crecimiento en su demanda, dan lugar a un agotamiento de los mismos, encareciendo el producto en el caso de la necesidad de consumo por parte de la sociedad. Desde el punto de vista medioambiental, el alto consumo de combustibles fósiles es uno de los causantes del calentamiento global.

Según los escenarios elaborados por la Agencia Internacional de la Energía, se ha obtenido una participación global de los combustibles fósiles como fuente de energía primaria mundial del 81% en 2010 y se prevé tener un 75% en 2035. La Figura (1) ilustra los valores del consumo mundial de las principales fuentes de energía primarias en el año 2019, donde la energía procedente de los combustibles fósiles (carbón, petróleo y gas natural) alcanza un 84,3 % y se produce un aumento en el consumo de energía con respecto al año 2018 del 1,3 % [1,2].

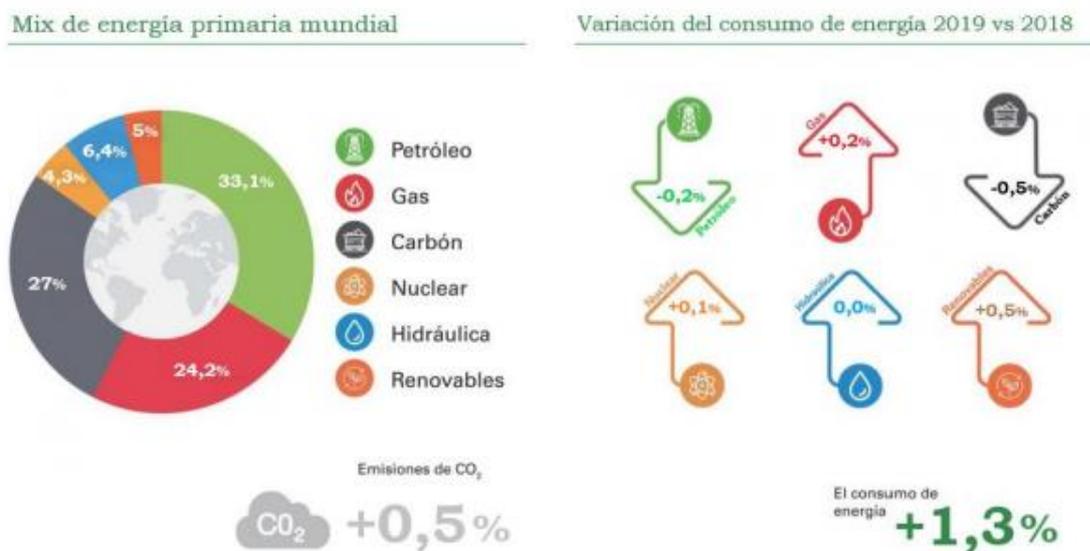


Figura 1. Consumo de energía primaria mundial en 2019 y variación del consumo de energía y de las emisiones de CO₂ respecto al año 2018.

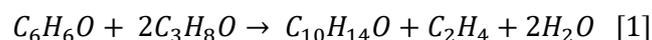
Con el objetivo de reducir las emisiones de estos combustibles fósiles, se están llevando a cabo el desarrollo de alternativas para sustituir, o por lo menos disminuir, el uso de estos combustibles fósiles y sus derivados. Una de las alternativas con mayor auge es el empleo de biomasa. Esta fuente abundante de carbono puede ser empleada para la obtención de biocombustibles y productos químicos de alto valor añadido. En comparación con los combustibles fósiles, el uso de la biomasa supone una mejora para el medio ambiente ya que es una fuente renovable con una amplia disponibilidad, ya que la biomasa se forma por restos de fracción biodegradable de los productos, residuos y desechos de origen biológico procedentes de actividades agrarias, incluidas las sustancias de origen vegetal y de origen animal, de la silvicultura y de las industrias conexas, incluidas la pesca y la acuicultura, así como la fracción biodegradable de los residuos, incluidos los residuos industriales y municipales de origen biológico.

En la actualidad, los procesos de transformación de materias primas para la obtención de productos químicos e hidrocarburos resultan más costosos que los procesos de la industria petroquímica. Por ello, desde el punto de vista de ingeniería química se está intentando desarrollar nuevas rutas catalíticas para convertir la biomasa y sus derivados en productos químicos y combustibles, a través de procesos sostenibles y económicamente viables.

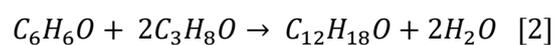
En este trabajo de fin de grado se va a realizar el proceso de obtención de butilfenoles a partir de la lignina procedente de la biomasa lignocelulósica, una fuente alternativa y limpia, ya que se obtendrá los reactivos de la reacción base del trabajo de fin de grado el fenol y 2-propanol a partir de materias primas o compuestos de fuentes renovables en vez de su obtención a partir de combustibles fósiles y otras rutas menos limpias.

2.2 PRODUCTO DESEADO Y REACTIVOS

Para poder explicar este apartado, es necesario definir la reacción base de la que se va a basar el trabajo de fin de grado. En un reactor de mezcla perfecta de tipo Camberly se realizará la siguiente reacción:



A su vez, en el reactor tiene lugar otra reacción, que consiste en otra reacción de alquilación de fenol para la producción de diisopropilfenol:



Por lo tanto, en el reactor se estarán dando dos reacciones irreversibles en paralelo. Con las ecuaciones definidas, se procede a la descripción de los compuestos de estudio.

- **Butilfenol**

El butilfenol es un compuesto orgánico que se compone de un anillo benceno unido a un grupo funcional hidroxilo (-OH) y una cadena de cuatro átomos de carbono (-C₄H₉). Su fórmula molecular es C₁₀H₁₄O y su estructura molecular se puede representar de la siguiente manera:

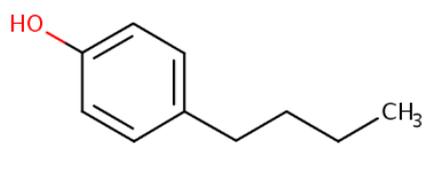


Figura 2. Fórmula molecular 4-butilfenol

Los butilfenoles tienen diversas aplicaciones dentro de la industria, entre las que destaca su uso como materia prima o intermediario para la fabricación de otros compuestos, como resinas fenólicas, antioxidantes o esteres, así como compuesto intermedio para la elaboración de terc-butilfenol, siendo el butilfenol de mayor interés europeo en la actualidad. El butilfenol se emplea también como un aditivo en la industria de plásticos o en la industria alimentaria. También tiene uso en la industria farmacéutica como intermediario para la elaboración de fármacos, como los antidepresivos y los analgésicos o incluso para la elaboración de fragancias.

- **Fenol**

El fenol es un compuesto que presenta un anillo bencénico con un grupo hidroxilo (OH). La fórmula molecular del fenol se puede observar en la figura 3.

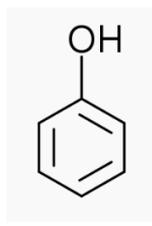


Figura 3. Fórmula molecular fenol

Actualmente, el proceso más utilizado para la obtención de fenol es el de oxidación del cumeno (Isopropilbenceno) a través del proceso cumeno-fenol. Este proceso implica la oxidación de cumeno con oxígeno a altas presiones y temperaturas en presencia de un catalizador de óxido de hierro y molibdeno para producir el hidroperóxido de cumeno. Posteriormente, el hidroperóxido de cumeno se descompone térmicamente en presencia de ácido sulfúrico para formar fenol y acetona. El cumeno, el compuesto utilizado como materia prima para producir fenol en el proceso de cumeno-fenol, se deriva del benceno y el propileno que, a su vez, se obtienen a partir de materias primas petroquímicas como el petróleo crudo y el gas natural.

Por lo tanto, con el motivo de disminuir el uso de combustibles fósiles y potenciar las materias primas renovables, se ha estudiado la posibilidad de conseguir fenol a partir de lignina presente en la biomasa lignocelulósica.

Para llevar a cabo la obtención de fenol a partir de esta materia prima renovable, se someterá a la biomasa lignocelulósica a una pirolisis, ya que esta ruta permite la transformación de la biomasa en tres fracciones (Gaseosa, líquida y sólida). La pirolisis se define como la degradación de la biomasa mediante calor en ausencia de oxígeno a temperaturas comprendidas entre 400-650°C [4] La fracción líquida deberá ser sometida a tratamientos catalíticos de mejora para la obtención de combustibles o productos químicos de interés. [3]

Debido a la estructura de la biomasa lignocelulósica, cada uno de sus componentes (celulosa, hemicelulosa y lignina) se descompone a una temperatura diferente. La hemicelulosa se descompone en primer lugar a temperaturas entre 200-260°C, seguido de la celulosa que se descompone a una temperatura entre 240-350°C y, por último, la lignina sobre 280-500°C [4].

Para llevar a cabo la obtención de la lignina, se somete a la biomasa lignocelulósica a un proceso de pirolisis y consta de 4 etapas [5]:

- Primera etapa (20-120°C): En esta etapa se produce la evaporación del agua presente en la biomasa.
- Segunda etapa (120-300°C): En esta etapa se liberan gases de bajo peso molecular como CO, CO₂ y vapor de agua.
- Tercera etapa (300-400°C): En esta etapa se produce la descomposición de la hemicelulosa, celulosa y sus oligómeros, generando compuestos volátiles con alto contenido en oxígeno y residuo carbonoso.
- Cuarta etapa (>400°C): En esta etapa se produce la degradación del residuo carbonoso generado en las anteriores etapas y se liberan CO, CO₂ y compuestos aromáticos procedentes de reacciones de despolimerización de la matriz carbonosa rica en lignina.

El resultado de someter la biomasa lignocelulósica a pirolisis genera, entre otras cosas, una fracción líquida compuesta por una fracción acuosa y otra fase orgánica, denominada bio-oil, compuesta principalmente por compuestos oxigenados simples, (Aldehídos, cetonas, alcoholes, ácidos y ésteres), azúcares, furanos, compuestos fenólicos y compuestos de alto peso moléculas. Los compuestos aromáticos oxigenados se producen debido a la descomposición térmica de la lignina [6].

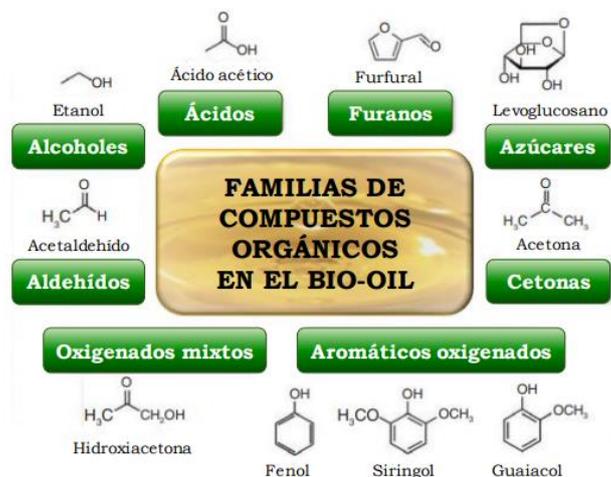


Figura 4. Compuestos obtenidos de la fracción líquida al realizar la pirólisis de la biomasa

Después del pirólisis, los productos resultantes se someten a una serie de tratamientos físicos y químicos para separar y purificar el fenol. Así pues, basándonos en la tesis del estudio, se puede obtener el fenol de materias primas renovables, siendo una ruta muy interesante de cara al medio ambiente y de sustitución de los recursos más limitados en el planeta.

- **2-propanol**

El 2-propanol, también conocido como isopropanol, es un compuesto químico con fórmula molecular C_3H_8O . La fórmula molecular del 2-propanol se puede observar en la figura 4.

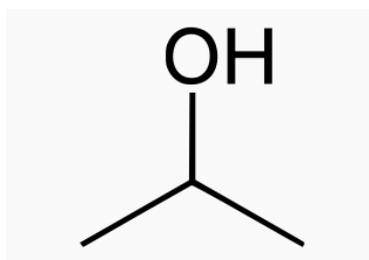


Figura 5. Fórmula molecular 2-propanol

El 2-propanol es un líquido con un olor característico y se utiliza ampliamente en la industria química como disolvente, agente limpiador, desinfectante y para la producción de una amplia variedad de productos químicos y compuestos orgánicos. También se utiliza como antiséptico en la industria médica y farmacéutica y como ingrediente activo en productos de cuidado personal, como desodorantes y lociones para después del afeitado. El 2-propanol es un producto químico versátil y ampliamente utilizado en todo el mundo debido a sus propiedades únicas y su capacidad para disolver una amplia variedad de compuestos orgánicos e inorgánicos.

En el presente tfg se realizará la reacción base mencionada anteriormente con la obtención del 2-propanol obtenido de una ruta limpia y renovable. Se puede obtener a través de varios procesos bio, aunque los más destacables son la síntesis de CO₂ o a través de una fermentación biológica empleando residuos orgánicos como pueden ser la pulpa de la remolacha o la patata, en la que a partir de sus azúcares se puede obtener el 2-propanol

En este caso, el 2-propanol se utilizará como agente alquilante para la reacción de alquilación con fenol para la obtención de butilfenol. Se escoge el 2-propanol ya que presenta mayor solubilidad en fenol que en agua ya que los alcoholes son excelentes disolventes de todo tipo de compuestos orgánicos. En los resultados experimentales obtenidos en la tesis, se observa una conversión del 2-propanol elevado, con lo que coincide con los valores de datos experimentales anteriores [7].

2.3 DISOLVENTE UTILIZADO. DODECANO

Para que sea posible la producción de butilfenol, es necesario utilizar un disolvente adecuado en reacciones de transferencia de hidrógeno. Para ello se ha escogido el dodecano, ya que cumple con una serie de consideraciones que hace que sea la mejor opción [8]:

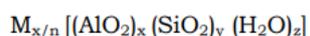
- Ser un compuesto inerte que no afecte al resultado de la actividad catalítica
- No degradarse con la temperatura ni presión
- Mantener los reactivos e intermedios en disolución
- Disipar el calor en reacciones altamente térmicas

En la tesis en la que se basa este trabajo fin de grado, se escogió el dodecano como un disolvente adecuado ya que cumple con todos los puntos expuestos anteriormente. Además, el uso de dodecano como disolvente favorece la producción de butilfenoles, que es nuestro compuesto de interés.

2.4 CATALIZADOR EMPLEADO

Como se ha mencionado anteriormente, para poder obtener el principal compuesto de interés, el butilfenol, se tiene que dar la reacción de alquilación de fenol con el 2-propanol. Para darse esta alquilación, es necesario la presencia de un catalizador ácido que favorezca la producción a la salida del reactor de butilfenol y disisopropilfenol y que tenga una conversión de fenol elevado. Para la realización de este trabajo, se ha seleccionado un catalizador zeolítico.

Los catalizadores zeolíticos son materiales cristalinos microporosos que se utilizan como catalizadores en diversas aplicaciones industriales y químicas. Se caracterizan por ser aluminosilicatos con una estructura de poros tridimensional y con cavidades y canales de dimensiones atómicas (de 3 a 10 Å). Según la definición clásica, la fórmula general de los aluminosilicatos cristalinos es la siguiente [9]:



siendo “M” un catión metálico de valencia “n”, “x” e “y” el número de tetraedros de aluminio y silicio por celda unitaria, y “z” la cantidad de moléculas de agua.

Para la realización de este trabajo de fin de grado, se ha escogido un catalizador zeolítico con estructura MFI denominado zeolita h-ZSM-5 [10]. En estudios experimentales de la tesis de Alba García Minguillán se realizó una comparación entre la zeolita n-ZSM-5 Y h-ZSM-5, en la que se obtuvieron resultados de que el catalizador h-ZSM5 es muy activo en presencia de disolventes que no muestran basicidad de Lewis, llegando a alcanzar valores de selectividad hacia los butilfenoles de un 65%, muy superior al otro catalizador. Además, la zeolita h-ZSM5 presenta mayor porosidad adicional lo que implica un aumento del número de centros ácidos realmente accesibles a las moléculas del reactivo y potencia la actividad del catalizador hacia las reacciones de alquilación.

2.5 REACCION DE ALQUILACION DE FENOL

Para que se lleve a cabo la producción de butilfenol, es necesario que en el reactor se den dos reacciones de alquilación. La alquilación de un compuesto aromático es una estrategia química en la que se adiciona un alqueno a un sustrato aromático. Es una reacción que requiere catálisis ácida. Para la obtención de butilfenol a partir de 2-propanol y de fenol se siguen las siguientes reacciones químicas [11,12]:

- 1) Reacción de deshidratación del propanol para la obtención de propeno favorecida por la presencia de un catalizador ácido. Al obtener propeno a partir de 2-propanol utilizando un catalizador ácido h-ZSM-5, se libera adicionalmente una molécula de agua

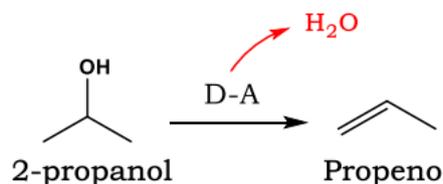


Figura 6. Deshidratación de 2-propanol a propeno

- 2) Dimerización de 2 moléculas de propeno y su posterior isomerización para dar lugar a diferentes olefinas formadas por 6 átomos de carbono
- 3) Una vez formado esas olefinas, al tener la presencia de un catalizador ácido en el medio de reacción hace que se produzca un craqueo catalítico formando olefinas de 2 y 4 átomos de carbono (buteno).
- 4) La olefina de 4 átomos de carbono (buteno) reacciona con la molécula de fenol dando lugar a una reacción de alquilación, y formando la molécula de estudio, el butilfenol

A continuación, se muestran los puntos 2,3 y 4 mediante la siguiente figura (16):

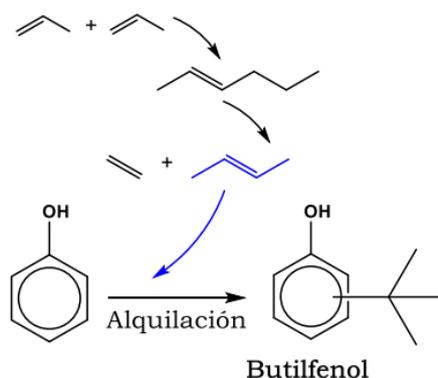


Figura 7. Proceso de obtención del butilfenol a partir de propeno

A su vez, se da también una reacción secundaria entre el fenol y 2-propanol que da como resultado diisopropilfenol por dos reacciones competitivas de alquilación del fenol con 2-propanol sobre los sitios ácidos de la zeolita. En este caso, se siguen los mismos pasos que en la primera reacción, por lo que se obtendría previamente propeno y posteriormente se realizaría la alquilación del fenol con buteno [13,14,15].

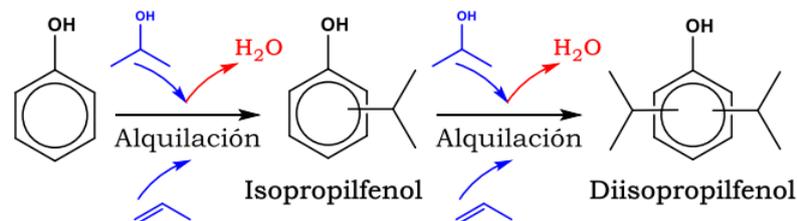


Figura 8. Proceso de obtención de diisopropilfenol a partir de la alquilación del fenol con 2-propanol

Para que tengan lugar estas reacciones de alquilación de fenol y den lugar a butilfenol y diisopropilfenol, es de una gran importancia el uso del catalizador h-ZSM5, ya que hace que la reacción obtenga selectividades de butilfenol y diisopropilfenol de 65 y 35 % respectivamente. Realizando estudios en la tesis de Alba García Minguillán, se observa que en función del catalizador empleado se favorece la reacción hacia una serie de compuestos (sobre todo alquilfenoles) y empleando este catalizador se favorece la producción de butilfenoles y diisopropilfenoles. Otro parámetro fundamental para que se den estas reacciones es el dodecano, un disolvente adecuado que favorece la producción de los compuestos de interés de este trabajo de fin de grado

3. OBJETIVOS

Debido a la preocupación medioambiental y la búsqueda de nuevas rutas que sustituyan a los combustibles fósiles, el objetivo de este Trabajo de Fin de Grado consiste en el desarrollo de una planta química para la obtención de butilfenol a partir de un proceso medioambientalmente sostenible, utilizando como reactivos fenol e isopropanol procedentes de Además, se realizará un estudio técnico-económico de la planta para estudiar la viabilidad del proceso a nivel industrial.

Los objetivos específicos del proyecto son los siguientes:

- Planteamiento de la planta de la producción de butilfenol, así como el diagrama de bloques y el diagrama del proceso.
- Diseño del reactor de alquilación de fenol con 2-propanol calculando los parámetros necesarios para la obtención de los productos a partir de resultados experimentales obtenidos de la tesis de Alba García Minguillán.
- Diseño y optimización de la estrategia de separación del producto deseado butilfenol
- Estimación del coste de los equipos y servicios auxiliares que intervienen en la planta de producción de butilfenol.
- Evaluación económica de la planta de producción de butilfenol, así como otros productos de interés, para poder analizar su viabilidad y rentabilidad económica mediante la estimación de la inversión necesaria y el estudio del coste de operación

4.SOLUCIÓN TECNICA

En este punto del trabajo se llevará a cabo el planteamiento de la planta, representando el diagrama de bloques y de proceso, así como el cálculo de los balances de materia y diseño de los equipos. Todo esto será realizado con el fin de obtener un análisis económico y determinar la rentabilidad de la planta de producción.

4.1 DIAGRAMA DE BLOQUES

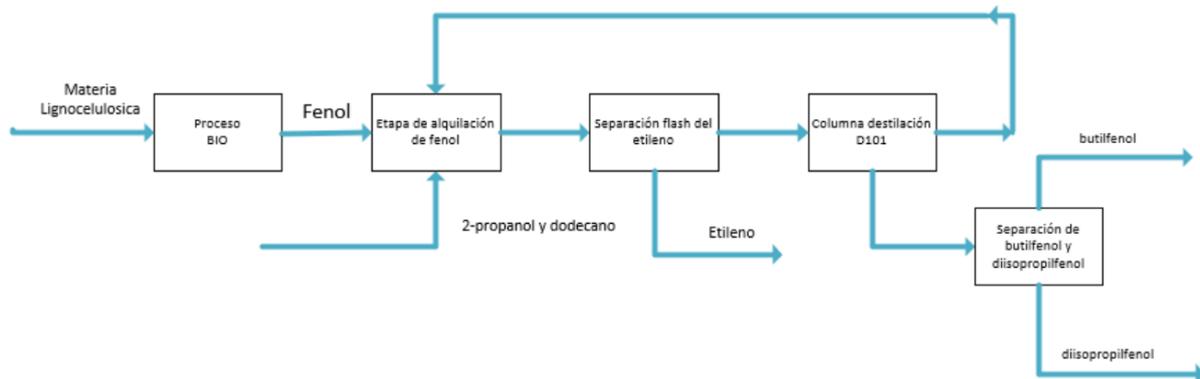


Figura 9. Diagrama de bloques del proceso

En la ilustración 4 se presenta el diagrama de bloques para la producción de butilfenol a partir de 2-propanol, fenol y dodecano. Se divide en 4 etapas:

1. En la etapa de obtención de fenol, se somete a la materia lignocelulósica a un proceso de pirolisis rápida, donde se generan una serie de compuestos, entre los que destaca el fenol. Una vez obtenida esa mezcla acuosa más una mezcla orgánica resultante de este proceso, se somete a todo a una etapa de separación para poder obtener fenol a una pureza elevada. De la misma manera que el fenol, el 2-propanol se obtiene de procesos bio explicados anteriormente.
2. En la etapa de alquilación del fenol, se somete al fenol a una reacción de alquilación a una presión de 10 bar y 140°C en un reactor de mezcla perfecta de tipo Carberry. Para poder llevar a cabo la alquilación del fenol, es necesario utilizar 2-propanol, también llamado isopropanol, como agente alquilante ya que los alcoholes son excelentes disolventes orgánicos. También se introduce una cantidad determinada de dodecano, ya que esto favorece la producción de butilfenol, nuestro compuesto de interés. En esta etapa también se añadirá la corriente que se obtiene por cabeza de la columna D 101, ya que contiene 2-propanol, dodecano y fenol, con una pequeña cantidad de agua.

3. En la etapa de separación de los productos de interés, se tendrá que separar el etileno de los otros compuestos debido a que se encuentra en estado gaseoso a temperatura ambiente, por lo que es recomendable separarlo para evitar problemas en posteriores separaciones. Para ello, se somete a la corriente de salida del reactor a una columna de destilación flash a 1 bar y 108°C, lo que hace separar gran parte del etileno por cabeza debido a su volatilidad frente al resto de compuestos. En este caso, al someter a la columna flash a este valor de temperatura, se separa parte del 2-propanol y del agua ya que sus temperaturas de ebullición se encuentran en valores por debajo a la temperatura de operación de la columna flash. Posteriormente, se somete a esta corriente a otra destilación flash para obtener una pureza del etileno > 95. La corriente de 2-propanol y agua no se trata debido al bajo rendimiento económico que se obtiene de esta corriente.

4. Una vez separado el etileno, se somete a los compuestos restantes a una columna de destilación. A la hora de operar dentro de la columna, se realizó un estudio sobre que presión y temperatura a trabajar. Se ha observado que a medida que se aumenta la presión, la separación se complica y resulta más costoso el proceso. Se ha escogido una presión de 1 bar y 225°C para separar los compuestos del butilfenol y diisopropilfenol.

5. En la etapa de separación del butilfenol y diisopropilfenol, debido a su proximidad en cuanto a sus temperaturas de ebullición, se somete a los compuestos a determinadas presiones. Se observa que a medida que se aumenta la presión, se favorece a la separación de los compuestos, por lo que procede a trabajar a una presión de 5 bar para facilitar la separación, ya que a mayores presiones se obtiene valores de pureza de butilfenol y diisopropilfenol similares y el gasto que supone elevar la presión es mayor que el porcentaje de pureza obtenido (La pureza aumenta un 0,05%). Se elevará la temperatura a 335°C para poder favorecer al máximo la separación de ambos compuestos dentro de la columna de destilación.

4.2 DIAGRAMA DE FLUJO

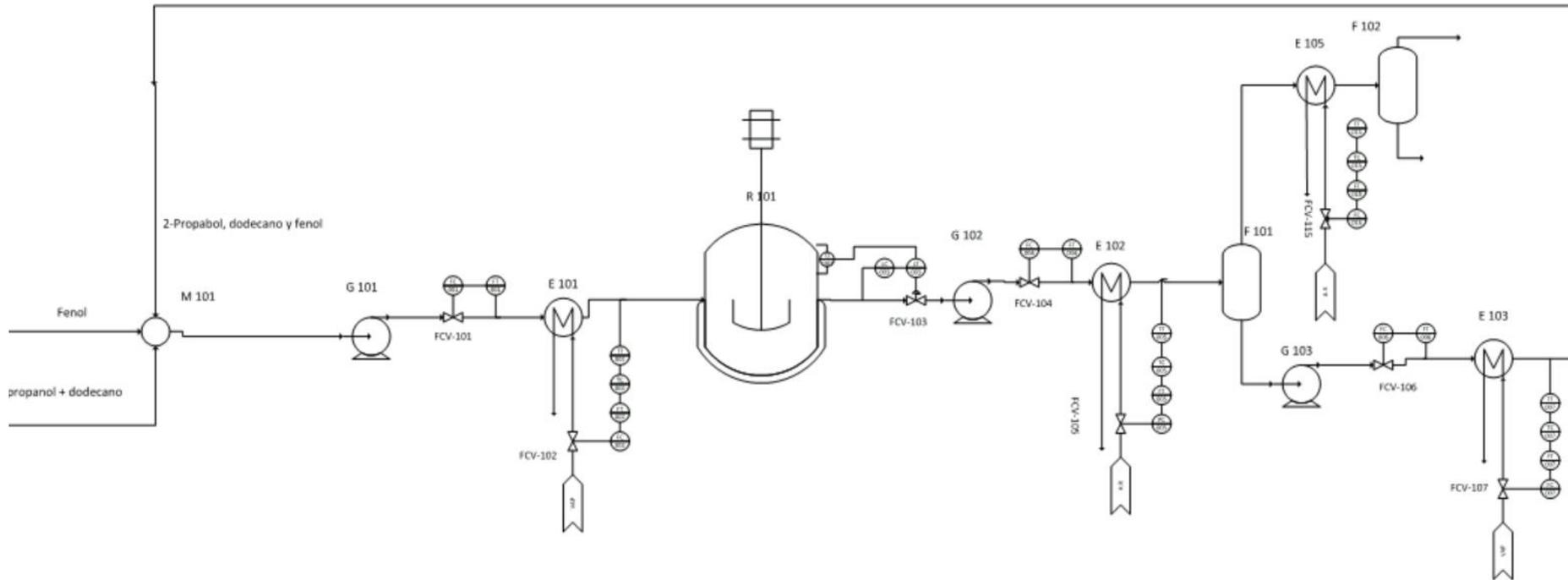


Figura 10. Representación esquemática del diagrama de flujo

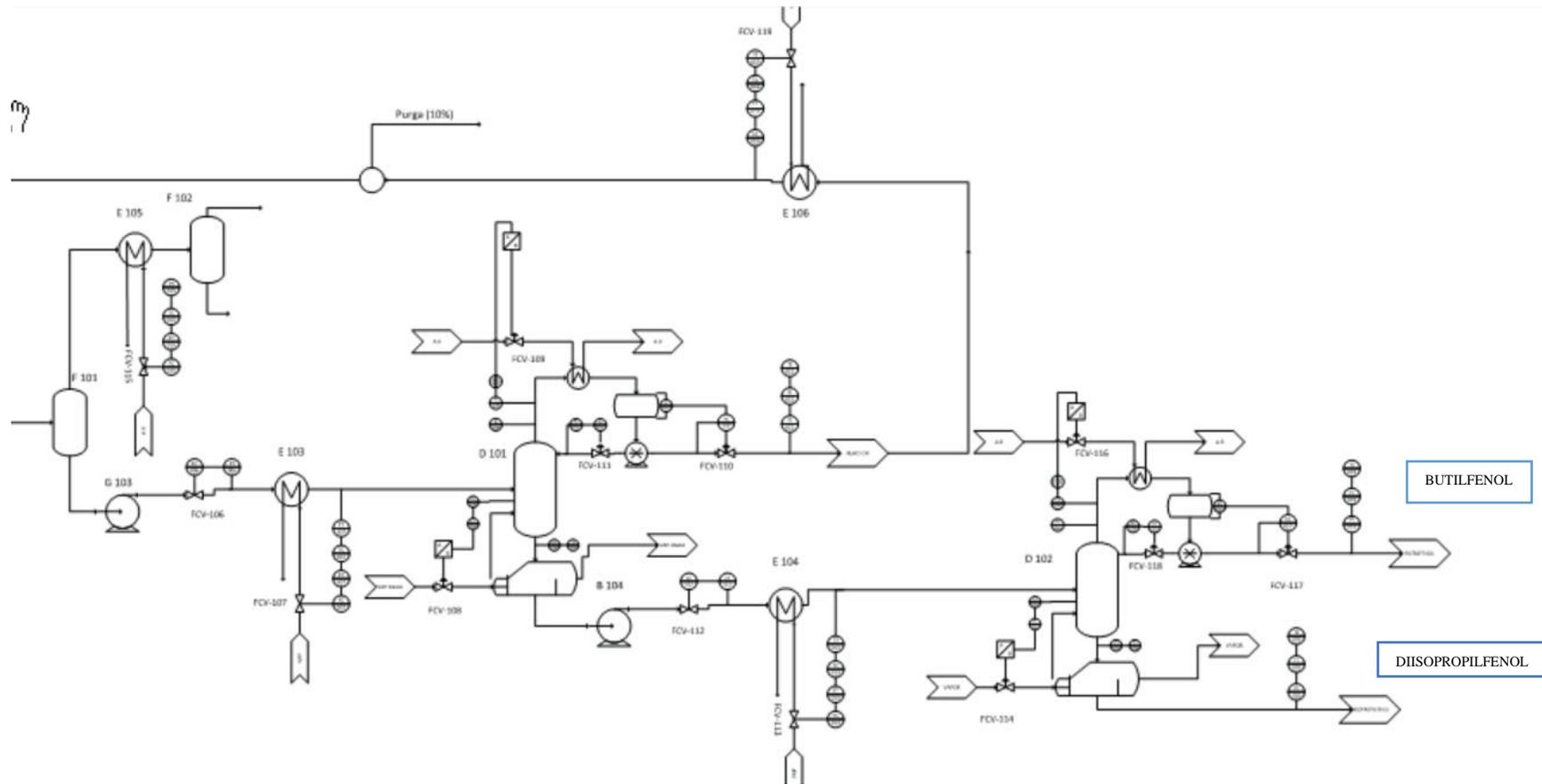


Figura 11. Representación esquemática del diagrama de flujo

En el presente diagrama se han establecido una serie de elementos de control para poder garantizar la seguridad y el correcto funcionamiento de la planta.

En primer lugar, se tienen las corrientes con dodecano, 2-propanol y fenol, además de una corriente de reciclaje que contiene los 3 compuestos con una cantidad mínima de agua. Estas corrientes se introducen dentro de un mezclador (M 101), que está a 80°C y 1 bar de presión. Una vez sale esta corriente de mezclador en esas condiciones, se introduce dicha corriente en una bomba (G 101), donde se eleva la presión de 1 bar a una presión de 11 bar, ya que el reactor opera a una presión de 10 bar y el 1 bar restante se debe a pérdidas del cambiador de calor y a pérdidas de las tuberías. Esto está regulado con la válvula FCV101, donde se encarga de comprobar que la corriente que sale del mezclador cumpla con la cantidad de corriente y presión adecuados. Al igual que la presión, se regula la temperatura hasta los 140°C con un cambiador de calor (E 101) y con la válvula de control FCV-102 se regula la temperatura de la corriente antes de entrar al reactor.

En el caso del reactor, debido a que se regula las temperaturas de entrada y salida, se mete un regulador de nivel a través de una válvula FCV-103 para garantizar que el volumen dentro del reactor no sobrepase en ningún momento. A la salida del reactor, se somete a la corriente de salida del reactor a una disminución de presión a través de la bomba G102 a 1 bar, donde tiene un controlador de presión y caudal a la salida de la bomba para garantizar que no hay problemas (FCV 104). Se utiliza también un cambiador de calor (E 102) para disminuir la temperatura a 108 °C, donde tiene un controlador de temperatura, presión y caudal en la corriente de agua de refrigeración para regular la cantidad de agua de refrigeración a través de la válvula FCV 105.

Una vez que se somete a la corriente a una columna flash, los compuestos gaseosos que salen por cabeza (etileno, agua y 2-propanol) se introducen en un intercambiador de calor (E 105) para disminuir la temperatura a 30°C. Se introduce la válvula FCV-116 para regular la temperatura y composición del agua de refrigeración para asegurar que la corriente entra a 30°C en la segunda columna flash.

Para la columna D101, previamente se somete a la corriente de alimentación de la columna a una bomba (G 103) y a un cambiador de calor (E 103), con las válvulas FCV 106 y FCV 107 con los elementos de control de presión, composición y temperatura pertinentes para asegurarse que la presión y la temperatura entran en condiciones óptimas (1 bar y 225°C). En el caso de la presión, se pone una bomba para compensar las pérdidas de presión del cambiador y de la tubería.

Dentro de la columna, se instalan válvulas tanto en la corriente de agua de refrigeración (FCV 109) en el condensador para enfriar como en la corriente de vapor (FCV 109) en el reboiler para controlar la temperatura que sale tanto por la cabeza como el fondo de la columna , así como la cantidad de servicio auxiliar necesario para cumplir con las temperaturas especificadas. En cuanto al depósito instalado a la salida de la corriente del condensador (L-101), se ha instalado una válvula (FCV 110) para regular el nivel de depósito. En el caso de la corriente que se introduce de nuevo en la columna de destilación, se mete una válvula (FCV 111) para controlar la presión y composición de la corriente que entra de nuevo a la columna D-101.

En el caso de la columna D102, se ponen las mismas válvulas que para la columna D-101. En el caso de la corriente de alimentación, se utilizan un cambiador de calor (E104) para elevar la temperatura a 335°C. También se utiliza una bomba (G 104) para que la corriente entra a una presión óptima para su separación.

Por último, la corriente de la cabeza de la columna D101 es la corriente que lleva la cantidad de fenol, 2-propanol y fenol para recircularlo en el mezclador. Debido a la temperatura a la que sale la corriente (201,7°C), se pone un cambiador de calor (E 106) para disminuir su temperatura con agua de refrigeración hasta los 80°C. Para ello, se instala una válvula que contiene controladores de presión, temperatura y cantidad para asegurar que la corriente sale a una temperatura de 80°C

Importante: Todas las bombas tienen una segunda bomba de repuesto en caso de fallo de la original. No están puestas en el diagrama estas bombas duplicadas.

4.2.1 Etapa de alquilación de fenol

Para poder desarrollar este trabajo de fin de grado, es necesario calcular los datos obtenidos escala de laboratorio y luego extrapolarlos a un proceso industrial. Para llevarlos a un proceso industrial, se ha buscado bibliográficamente la producción de obtención de butilfenol en Europa y Asia a través de estudios de mercado, se ha estimado una producción de estos butilfenoles en Europa y Asia de aproximadamente 3500 tm/año. Para ello se tendrá que realizar unos cálculos a escala de laboratorio a partir de los datos obtenidos de la tesis de Alba García Minguillán

- ESCALA DE LABORATORIO

A través de los datos obtenidos en un laboratorio, se procede a diseñar el reactor donde se producen las reacciones de alquilación del fenol con 2-propanol utilizando como disolvente el dodecano. Para ello se parten con los datos obtenidos en el experimento:

- **Datos**

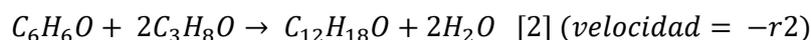
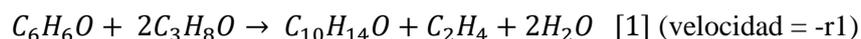
Tabla 1. Datos bibliográficos utilizados en la tesis de Alba García Minguillán

Datos a escala de laboratorio	
Cantidad de 2-propanol	180 mg \approx 3 mmol
Cantidad de dodecano	5,25 g \approx 7 mL
Cantidad de fenol	188 mg \approx 2 mmol

Para la elaboración de los cálculos, es necesario conocer una serie de datos obtenido durante el experimento y son los siguientes:

- X_{fenol} : 0,39
- $S_{Butilfenol}$: 0,65
- $S_{Diisopropilfenol}$: 0,35

Debido a que no se tiene información de los pasos previos para la obtención del butilfenol, las ecuaciones que se van a introducir al reactor se simplifican en dos y son las siguientes:



Esto conlleva a que en el reactor se están produciendo dos reacciones irreversibles en paralelo, por lo que habrá que calcular las velocidades de reacción para cada uno de los casos, así como la producción de butilfenol y diisopropilfenol que se genera. Hay que tener en cuenta que la estequiometría de la reacción es igual en el caso del fenol, diisopropilfenol y butilfenol es la misma y la cantidad de reactivos usados en ambas reacciones es la misma y en las mismas cantidades,

Para poder obtener la velocidad de reacción global $(-r_1 + -r_2)$, se empleará la siguiente fórmula:

$$(-r_1 \pm r_2) = \frac{\text{moles reaccionados de fenol}}{t \cdot W} \quad [3]$$

Donde:

- $(-r_1 + -r_2)$: Es la velocidad de reacción expresada en $\text{mmol}/\text{h} \cdot \text{g}$
- t : Es el tiempo en que se realiza el experimento expresado en horas
- W : Es el peso de catalizador empleado en el laboratorio en gramos

Como se tiene la conversión global del fenol y la cantidad inicial, se obtiene la cantidad final a partir de la siguiente ecuación

$$X_{\text{Fenol}} = \frac{\text{Cantidad inicial}_{\text{fenol}} - \text{Cantidad final}_{\text{fenol}}}{\text{Cantidad inicial}_{\text{fenol}}} \quad [4]$$

Despejando:

$$\text{Cantidad final}_{\text{fenol}} = 2 - 2 * 0,39 = 1,22 \text{ mmol fenol}$$

Por lo tanto, la cantidad reaccionada es la siguiente:

$$\text{Cantidad reaccionada}_{\text{fenol}} = \text{Cantidad inicial}_{\text{fenol}} - \text{Cantidad final}_{\text{fenol}} \quad [5]$$

$$\text{Cantidad reaccionada}_{\text{fenol}} = 2 - 1,22 = 0,78 \text{ mmol fenol}$$

Con los moles reaccionados calculados, la velocidad de reacción que se obtiene es la siguiente:

$$(-r_1 + -r_2) = \frac{0,78 \text{ mmol fenol}}{4 \text{ h} \cdot 0,185 \text{ g}} = 1,05 \text{ mmol/h} \cdot \text{g}$$

Con el valor de la reacción global obtenido, se aplica la fórmula de reactor de mezcla perfecta de tipo Carberry para calcular la alimentación de entrada necesaria de fenol:

$$\frac{W}{F_{fenol_0}} = \frac{X_{fenol}}{r_{total}} \quad [6]$$

Donde:

- W : Es el peso de catalizador en gramos
- F_{fenol_0} es la alimentación del reactor de fenol en mmol/h
- X_{fenol} : Es la conversión del fenol
- r_{total} : Velocidad global de reacción $\text{mmol/h} \cdot \text{g}$

Por lo tanto:

$$F_{fenol_0} = \frac{1,05 \text{ mmol/h} \cdot \text{g} \cdot 0,185 \text{ g}}{0,39} = 0,498 \text{ mmol/h}$$

$$F_{fenol_0} = 0,498 \frac{\text{mmol}}{\text{h}} \cdot \frac{94,11 \text{ mg}}{1 \text{ mmol}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} = 0,046 \text{ g/h}$$

Con el valor de alimentación de fenol, se obtienen los valores del resto de compuestos de entrada (anexo 2)

Por último, queda obtener las cantidades de productos de interés que se obtienen. Para ello se utiliza el dato obtenido de la tesis de Ala García Minguillán de selectividad del butilfenol y diisopropilfenol y conversión de fenol:

$$S_{Butilfenol} \cdot X_{fenol} = \frac{\text{Moles}_{butilfenol}}{\text{Moles}_{fenol \text{ in}}} \quad [7]$$

Donde:

- $S_{Butilfenol}$: Selectividad del butilfenol
- X_{fenol} : Conversión de fenol

Se sustituyen los datos y se obtiene la masa de butilfenol:

$$Moles_{Butilfenol} = 0,65 \cdot 0,39 \cdot 2 = 0,507 \text{ mmol butilfenol}$$

Con el dato de los moles de butilfenol calculados, se calcula la cantidad de butilfenol en la salida

$$F_{butilfenol} = 0,507 \text{ mmol} \cdot \frac{150 \text{ mg}}{1 \text{ mmol}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} \cdot \frac{1}{4 \text{ h}} = 0,019 \text{ g/h}$$

Los valores obtenidos del resto de compuestos, tanto de entrada como de salida, se han calculado a partir de estos datos vienen calculados en el **anexo 2**.

Por lo tanto, las cantidades de entrada y salida del reactor son las siguientes:

Tabla 2. Valores de entrada a escala de laboratorio de cada uno de los compuestos

Compuesto	Caudal Entrada (g/hr)
Fenol	0,046
2-propanol	0,06
dodecano	1,31

Tabla 3. Valores de entrada a escala de laboratorio de cada uno de los compuestos

Compuesto	Caudal salida (g/hr)
Butilfenol	0,019
Agua	0,007
Etileno	0,0035
Diisopropilfenol	0,012
Fenol sin reaccionar	0,028
Dodecano	1,31
2-Propanol	0,036

- **ESCALA INDUSTRIAL**

Una vez realizados los cálculos de laboratorio, se va a llevar el proceso a nivel industrial. Para ello como se ha mencionado anteriormente, se ha fijado una cantidad de salida de butilfenol del reactor de 400 kg/h , dato obtenido en un estudio de mercado, en el que fija como un dato de producción en Europa y Asia de 3500 tm/año en el año 2021. Para este valor, se ha sumado cantidades que se generan entre los grandes productores de butilfenol.

En cuanto a los cálculos, han sido establecidas en el **anexo 2**, donde vienen descritas las fórmulas y la metodología empleadas.

Por lo tanto, la cantidad de entrada del reactor a nivel industrial es el siguiente:

Tabla 4. Valores de entrada a escala industrial de cada uno de los compuestos

Compuesto	Caudal salida (kg/h)
Fenol	968,42
Dodecano	31772,02
2-propanol	1265,15

En cuanto a las condiciones de salida de reactor a nivel industrial, estos son los datos obtenidos:

Tabla 5. Valores de salida a escala industrial de cada uno de los compuestos

Compuesto	Caudal salida (kg/h)
Butilfenol	400
Agua	146,56
Etileno	74,66
Diisopropilfenol	250,37
Fenol sin reaccionar	590,74
Dodecano	31772,02
2-propanol sin reaccionar	780,84

Una vez obtenido los compuestos de salida, se tendrá que recircular el fenol, dodecano y 2-propanol de nuevo al reactor, mientras que el etileno es imprescindible separarlo antes de introducirlos en las columnas de destilación para evitar problemas de separación, ya que se encuentra en estado gaseoso con una temperatura de ebullición de -108° . Para la separación de los compuestos resultantes de la corriente de salida del reactor se utiliza la herramienta de Aspen Plus (**anexo 1**).

4.2.2 Separación de etileno

.Una vez que se ha obtenido la corriente de salida del reactor, es necesario separar el etileno del resto de compuestos, ya que se encuentra en estado gaseoso a temperatura ambiente (presenta una temperatura de ebullición de $-103,2\text{ }^{\circ}\text{C}$ a 1 bar), lo que dificultaría el resto de los procesos de separación. Para ello se va a utilizar una columna de destilación flash, en la que se va a trabajar a una presión de 1 bar y a una temperatura de $108\text{ }^{\circ}\text{C}$ para asegurar la mayor separación de etileno posible. Para poder cumplir con estos requisitos, será necesario introducir una bomba (G 102) y un cambiador de calor (E 102) para garantiza que entra en esas condiciones de presión y de temperatura. Los resultados obtenidos son los siguientes:

Tabla 6. Valores de entrada y salida de la columna flash de cada uno de los compuestos

TABLA FLASH 1			
Compuesto	Alimento Flash (kg/h)	Cabeza columna (kg/h)	Fondo columna (kg/h)
Dodecano	31772	43,59	31728,4
Fenol	590,74	4,39	586,35
2-Propanol	780,84	74,98	705,85
Agua	146,36	99,36	47,19
Etileno	74,66	67,91	6,74
Diisopropilfenol	250,37	0,07	250,99
Butilfenol	400	0,089	399,91

Como se puede observar, se ha retirado una parte de 2-propanol, dodecano y agua. Esto se debe a que para poder separar gran parte del etileno de la corriente es necesario elevar la temperatura hasta 108°C , lo que hace que compuestos como el 2-propanol y agua, con temperatura de ebullición menor a ese valor, haga que se evaporen y se vayan por la columna. En el caso del dodecano, al haber tanta cantidad de dicho compuesto, se arrastra una pequeña cantidad por cabeza.

Para poder mejorar la eficiencia de esta corriente salida por cabeza, se somete a otra columna de destilación flash para obtener un etileno con una mayor pureza. Para realizar esta separación, se trabaja con una presión de 1 bar y $30\text{ }^{\circ}\text{C}$, obteniendo los siguientes resultados:

Tabla 7. Valores de entrada y salida de la segunda columna flash de cada uno de los compuestos

TABLA FLASH 2			
Compuesto	Alimento Flash (kg/h)	Cabeza columna (kg/h)	Fondo columna (kg/h)
Dodecano	43,59	0,077	43,51
Fenol	4,39	0,0022	4,38
2-Propanol	74,98	2,23	72,75
Agua	99,36	1,43	98,03
Etileno	67,91	66,05	1,86
Diisopropilfenol	0,07	0	0,07
Butilfenol	0,089	0	0,089

Se observa una mayor pureza en la corriente del etileno, llegando a tener una pureza del 95%. La otra corriente obtenida, debido a que presenta agua en su mayoría no se va a tratar, ya que no resulta rentable económicamente.

4.2.3 Separación del butilfenol y diisopropilfenol del resto de compuestos.

Una vez separado el etileno, para poder separar estos compuestos del resto (fenol, 2-propanol, dodecano y agua) es necesario conocer cuáles son las condiciones de presión y temperatura óptimas para facilitar la separación. Para ello, se utiliza la herramienta de Aspen Plus para determinar dichas condiciones.

En cuanto a la presión, cabe destacar que el clave pesado en esta columna va a ser el butilfenol, ya que interesa que en la separación se vaya por el fondo de la columna el butilfenol y el diisopropilfenol, mientras que por la cabeza tendrán que salir el 2-propanol, el fenol y el dodecano, ya que estos compuestos se pueden recircular de nuevo al reactor para abaratar el proceso y aprovechar los recursos lo máximo posible. Para ello se han establecido diferentes valores de presión para determinar a qué presión es mejor separar toda la mezcla (**anexo 3**). Se observa que a medida que se aumenta la presión, resulta más complicada la separación de los compuestos a través de la columna, por lo que se decide trabajar a una presión de 1 bar (atmosférica).

A la hora de operar una columna de destilación hay dos variables muy importantes dentro de una columna de destilación que son:

- Número de pisos: donde se produce el contacto entre el líquido y el vapor. Según asciende el vapor por la columna se va enriqueciendo de los componentes más ligeros mientras que el líquido se enriquece de los pesados, es por ello por lo que a medida que aumenta el número de platos, es más fácil llegar a concentraciones altas de los compuestos de interés.
- Reflujo: otra de las variables importantes dentro de una columna. Es la cantidad de líquido que se devuelve por cabeza de columna. Para un mismo número de pisos, cuanto mayor es la razón de reflujo, mayor es la pureza obtenida, aunque también disminuye la cantidad de destilado que abandona la columna.

Atendiendo a las temperaturas de ebullición de los compuestos que entran en la columna, se obtiene la siguiente tabla:

Tabla 8. Temperatura de ebullición de los compuestos del proceso a temperatura ambiente

Compuesto	T. Ebullición (°C)
Agua	100
2-propanol	82,15
Fenol	181,84
Dodecano	216,32
Butilfenol	246,04
Diisopropilfenol	254,5

Como el clave pesado en este caso es el butilfenol y el clave ligero es el dodecano, se observa que la temperatura de ebullición del dodecano es de 216,31°C, mientras que la del butilfenol es de 246,04°C, lo que implica que dicha separación se podría realizar en una columna de destilación debido a la diferencia de temperatura entre ambos compuestos.

Tabla 9. Datos obtenidos de la columna D101 para cada uno de los compuestos

COLUMNA D-101			
Compuesto	Alimento Columna D-101 (kg/h)	Cabeza columna D-101 (kg/h)	Fondo columna D-101 (kg/h)
Dodecano	31728,4	31728,2	0,23
Fenol	586,35	586,35	0
2-Propanol	705,85	705,85	0
Agua	47,19	47,19	0
Etileno	6,74	6,74	0
Diisopropilfenol	250,99	0,058	250,24
Butilfenol	399,91	1,17	398,89

Se obtiene una cantidad de diisopropilfenol y butilfenol superior al 99% por fondo de la columna, separándose del resto de compuestos que se destinan a una recirculación, ya que son los compuestos a partir de los cuales se da la reacción en el reactor.

La corriente que sale por cabeza que corresponde a 2-propanol, fenol y dodecano será recirculada a la corriente de alimento del reactor mediante el mezclado M 101. Para garantizar la pureza de la corriente se purgará un 10% la cantidad de caudal pertinente, por lo que la cantidad recirculada será la siguiente:

Tabla 10. Datos de la corriente que se introduce de nuevo en el mezclador

COLUMNA D-101		
Compuesto	Alimento antes de purga (kg/h)	Alimento despues de purga(kg/h)
Dodecano	31728,2	28555,38
Fenol	586,35	527,715
2-Propanol	705,85	635,265
Agua	47,19	42,471
Etileno	6,74	6,066
Diisopropilfenol	0,058	0,0522
Butilfenol	1,17	1,053

4.2.4 Etapa de separación del butilfenol y el diisopropilfenol

Para llevar a cabo esta separación, es necesario tener en cuenta la diferencia entre las temperaturas de ebullición de ambos compuestos (Ver tablas.). En este caso, la temperatura de ebullición del butilfenol es de 246,04 °C, mientras que el diisopropilfenol es de 254,5°C, lo que hace que la destilación en este caso sea más compleja que en la columna anterior.

Para poder resolver la columna, se ha probado realizar una destilación a vacío. Se han realizado varios estudios a diferentes valores de presión dentro de los límites a vacío (Entre 100 y 500 mbar) (**anexo 3**). Como en la columna anterior, dos son los parámetros que hay que tener en cuenta, el número de etapas y la razón de reflujo. Realizando los cálculos bajo estas condiciones se observa que la separación de los compuestos se realiza a razones de reflujo superiores de 20, mientras que el número de etapas asciende a más de 80 etapas. Esto se debe a la poca diferencia de temperatura de ebullición entre ambos compuestos, lo que hace que resulte muy complicado su separación.

Debido a que para esas presiones tan bajas no se obtienen los resultados esperados, se procede a trabajar con presiones más altas. Se procede a trabajar con presiones hasta de 30 bares y se observa que la diferencia de pureza entre 5 y 30 bares es mínima, y la razón de reflujo y el número de etapas también es mínima, por lo que se escoge la presión de 5 bar para operar la columna, ya que esto es mejor desde el punto de vista económico. Se observa, además, que a partir de 10 bares no se ve una diferencia de mejora en la separación, por lo que se decide realizar el estudio y las gráficas hasta los 10 bares.

A continuación, se muestran los resultados obtenidos:

Tabla 11. Datos de las corrientes de la columna D102

COLUMNA D-102			
Compuesto	Alimento Columna D-102 (kg/h)	Cabeza columna D-102 (kg/h)	Fondo columna D-102 (kg/h)
Dodecano	0,23	0,23	0
Diisopropilfenol	250,24	11,21	239,01
Butilfenol	398,89	387,67	11,22

Con ese estudio realizado con presiones más altas y lo que se obtiene es una separación con un valor de 97% de pureza de butilfenol por cabeza y un 95% de pureza de diisopropilfenol, con un número de etapas y razón de reflujo mucho mejores desde el punto de vista económico. (Razón de reflujo de 18,405 y un número de etapas teóricas de 42)

4.3 DISEÑO Y DIMENSIONAMIENTO DE EQUIPOS

En este apartado del trabajo se realizarán los diseños de todos los equipos utilizados para el desarrollo del proyecto en el punto 4.2.

4.3.1. Diseño Reactor R101

La corriente de mezcla del entre el 2-propanol, dodecano y fenol junto a la corriente de recicló obtenida en la columna D-101 es reacondicionada antes de entrar en el reactor R-101, siendo la corriente de entrada al reactor la siguiente de fenol de 968,42 kg/h, de 2-propanol de 1265,15 kg/h y de dodecano de 31772,02 kg/h, con una cantidad muy pequeña de agua a causa de la recirculación.

Lo importante para realizar el diseño del reactor de alquilación de fenol es conocer la composición de salida del mismo. De esa forma, conociendo el tiempo de residencia y el caudal volumétrico de salida, se puede calcular el volumen del reactor y, por lo tanto, realizar su posterior dimensionamiento. Una vez calculado tanto el balance de materia, como el resto de los parámetros mencionados, se realiza el diseño del reactor.

En el caso de la presión y temperatura empleados, se han cogido los establecidos en la tesis de Alba García Minguillán, siendo los valores de 10 bar y 140°C.

Con todos estos datos, se halla el volumen del equipo y se calculan las dimensiones del reactor (**Anexo 3**). A continuación, se muestran los valores obtenidos:

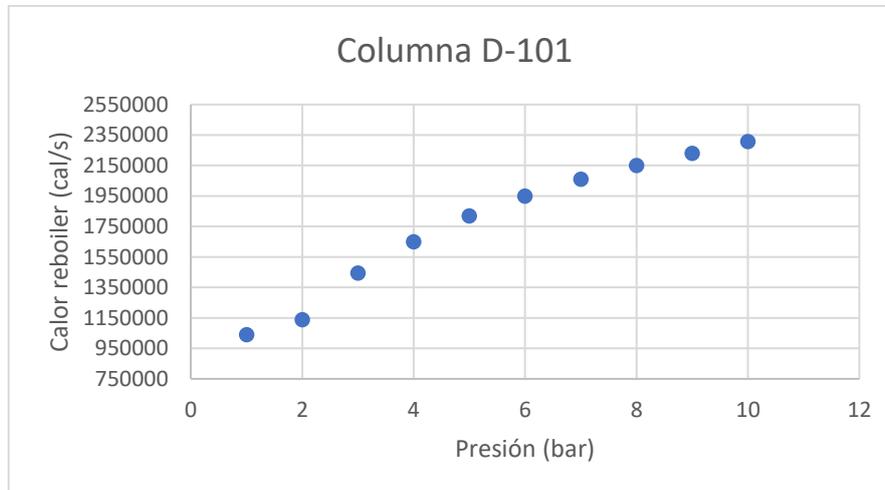
Tabla 12. Datos de la corriente del reactor R101

REACTOR R101			
Tipo de Reactor	Carberry	Volumen	360,74 m ³
Temperatura	140°C	Longitud	10,11 m
Presión	10 bar	Diámetro	6,74 m
Tiempo de residencia	4,02 h	HLL	1,68 m
Relación molar Fenol/2-propanol	1/2	NLL	1,05 m
Catalizador h-ZSM5	3822,10 kg	LLL	0,42 m

Cabe destacar que, para el cálculo de longitud y diámetro, se han establecido diferentes valores de L/D para observar cual es la opción más económica. Para un reactor de mezcla perfecta, es fundamental que la relación L/D sea próxima a la unidad. En este caso, desde el punto de vista económico, la opción más rentable sería de 5, aunque por dimensionamiento del equipo no resulta una opción realista, ya que esto lo acercaría más a un reactor de flujo pistón. Ante esta situación se ha escogido una relación L/D de 1,5, ya que, aunque resulte menos rentable económicamente, se acerca a la unidad, además de no dispararse en exceso económicamente, cumpliendo en la mayor medida con los dos requisitos.

4.3.2 Diseño columna D-101

Para poder realizar el dimensionamiento de la columna, se debe fijar en la columna que compuesto actúa como clave ligero y cual como clave pesado. Debido a que 3 de los compuestos que se encuentran en la corriente de alimentación de la columna (2-propanol, dodecano y fenol) se van a recircular de nuevo al reactor, se ha establecido como clave ligero el que compuesto de los 3 que tiene mayor temperatura de ebullición que en este caso es el fenol (**Tabla 8.**). Como se ha establecido el fenol como compuesto ligero, el compuesto pesado será aquel con la siguiente temperatura de ebullición más elevado, en este caso el butilfenol. Para un mismo objetivo de pureza, la columna puede trabajar a presiones altas o bajas. Para saber con qué presión trabajar, se representa ésta última frente al calor del reboiler:

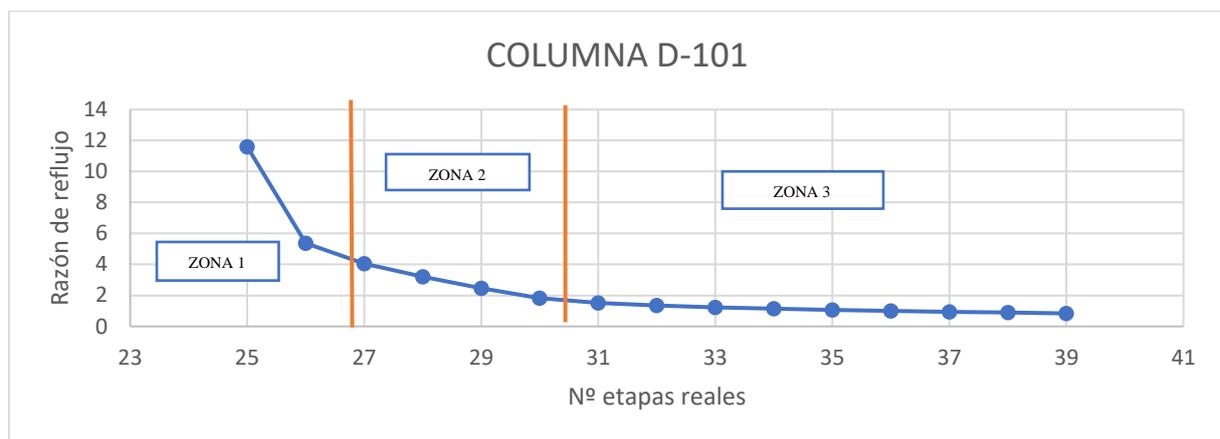


Gráfica 1. Presión frente al calor utilizado del reboiler en columna D101

Como se puede observar, a medida que aumenta la presión en la columna, el calor de aporte necesario por parte del reboiler es mayor, lo que implica un mayor gasto energético y por lo tanto un mayor gasto económico. Por lo tanto, la mejor opción desde el punto de vista económico es trabajar a una presión de 1 bar, estableciéndose una pérdida de presión en la columna de 0,5 bar, lo que implica una presión en el fondo de la columna de 1,5 bares. En este caso habrá que tener en cuenta la pérdida de presión en la conducción, así como la pérdida de presión que se produce en el intercambiador de calor E-103, por lo que será necesario implementar una bomba para poder compensar estas pérdidas y que entre en la columna de destilación a la suficiente presión y temperatura para evitar los problemas dentro de la columna.

4.3.2.1 Optimización columna D-101

Para realizar la separación de la columna D-101 se puede operar con distintas relaciones entre el número de etapas y la razón de reflujo. Para conocer la relación óptima entre estas variables, se realiza una gráfica donde se ve visualmente esta relación:



Gráfica 2. N° de etapas reales frente a razón de reflujo columna D101

Atendiendo a la gráfica, se pueden diferenciar tres zonas:

- Zona 1: No es una zona óptima ya que, aunque la razón de reflujo sea más pequeña, el número de etapas empleado es alto, por lo que desde el punto de vista económico no es viable.
- Zona 2: Es la zona óptima debido a la relación entre el número de etapas teóricas y la razón de reflujo.
- Zona 3: En esta zona la razón de reflujo es demasiado elevada, lo que implica una salida menor del caudal del destilado. Si se tiene un número de etapas pequeño se dispara la razón de reflujo.

Tras establecer las zonas dentro de la gráfica, se selecciona el número de etapas o pisos teóricos que se encuentran en la zona 2 donde se obtienen purezas del diisopropilfenol y butilfenol superiores al 99%. Ya que los platos de la columna no tienen un 100% de eficacia, el número de etapas reales será igual a las etapas teóricas entre la eficiencia de cada plato, que en este caso es del 85%.

Tabla 13. Etapas y reflujo de la zona 2 en la columna D-101

Nº etapas teóricas	Nº etapas reales	Razón de reflujo
25	27	4,055
26	28	3,199
27	29	2,463
28	30	1,834

Para conocer el número de etapas óptima con el que la columna va a operar se va a realizar lo siguiente:

1. Diseño de la columna junto todos los elementos que componen la columna, que se compone del reboiler, el acumulador de cabeza y el reboiler
2. Cálculo de los costes de la columna y de todos los elementos que componen la estructura completa. Se muestra en el **anexo 3**.
3. Realizar el mismo proceso para todos los pisos teóricos que se encuentran en la zona 2 y ver cuál de todos es el más rentable.

Una vez fijado esto, se diseñan los distintos elementos que componen la columna de destilación

Diseño estructura

Hace referencia a la propia columna de destilación, donde entra la corriente de alimentación y se llevan a cabo los intercambios líquido-vapor entre los platos que incorporan en su interior. Para el diseño de la estructura, es necesario conocer la longitud y el diámetro de la columna para posteriormente calcular el HLL, NLL y LLL. Un dato a tener en cuenta es que para el coste de estructura se tiene en cuenta el coste de los platos reales necesarios para llevar a cabo la separación

Diseño condensador

Esta parte de la columna se caracteriza por ser la parte de la columna en la que sale la fracción de vapor que se a la temperatura de rocío. Una vez ese vapor llega a un condensador total, que se encarga de retirar el calor latente y convierte todo el vapor a líquido saturado, es decir, líquido a su temperatura de burbuja.

Para el cálculo del coste del condensador es necesario conocer su área de intercambio de calor, parámetro que lo proporciona la herramienta de Aspen Plus. Otro dato a tener en cuenta es la cantidad de agua de refrigeración será necesaria para el intercambio de calor y el gasto que genera.

Diseño acumulador

El acumulador de la cabeza permite almacenar el líquido condensado obtenido del condensador durante un tiempo determinado para asegurar que la columna no llegue a un estado de operación sin reflujo. También permite asegurar que ninguna fracción de condensado retorne a fase vapor, produciendo cavitaciones en las bombas. En cuanto al tiempo de operación se ha fijado un valor de 10 minutos.

Diseño reboiler

El líquido que desciende por gravedad a través de la columna llega hasta el reboiler o calderín, que consiste en un vaporizador calentado por vapor de agua a elevada temperatura, generando vapor y recirculándolo a la columna de destilación para que ascienda a través de ella, mientras que al mismo tiempo se obtiene una corriente líquida por fondo de columna. Al igual que en el caso del condensador, será necesario obtener su área de intercambio de calor y la cantidad de vapor de calefacción necesario.

Una vez calculados los costes de la estructura, del condensador, del reboiler y los servicios auxiliares empleados, se comparan, para los diferentes nº de etapas y razón de reflujo de la zona 2 para ver que opción resulta económicamente más viable.

Tabla 14. Coste de cada columna con un número determinado de pisos teóricos y razón de reflujo según la zona 2.

Pisos teóricos	25	26	27	28
pisos reales	27	28	29	30
Razon de reflujo	4,05	3,19	2,46	1,83
Columna	310.526,63 €	322.486,23 €	334.469,18 €	346.475,69 €
condensador	78.337,77 €	69.805,44 €	61.779,74 €	55.754,72 €
reboiler	154.326,88 €	142.562,66 €	123.850,47 €	109.801,41 €
deposito	39.327,87 €	39.327,87 €	39.327,87 €	39.327,87 €
agua refrigeracion	4.015,27 €	4.015,25 €	4.015,24 €	4.015,25 €
vapor de agua	66.160,52 €	65.923,83 €	65.925,43 €	65.932,96 €
Coste total	652.694,95 €	644.121,30 €	629.367,93 €	621.307,91 €

Una vez realizados todos los cálculos sobre dimensionamiento y costes de los equipos y servicios auxiliares, se puede concluir que la columna más rentable económicamente es la de 30 pisos reales.

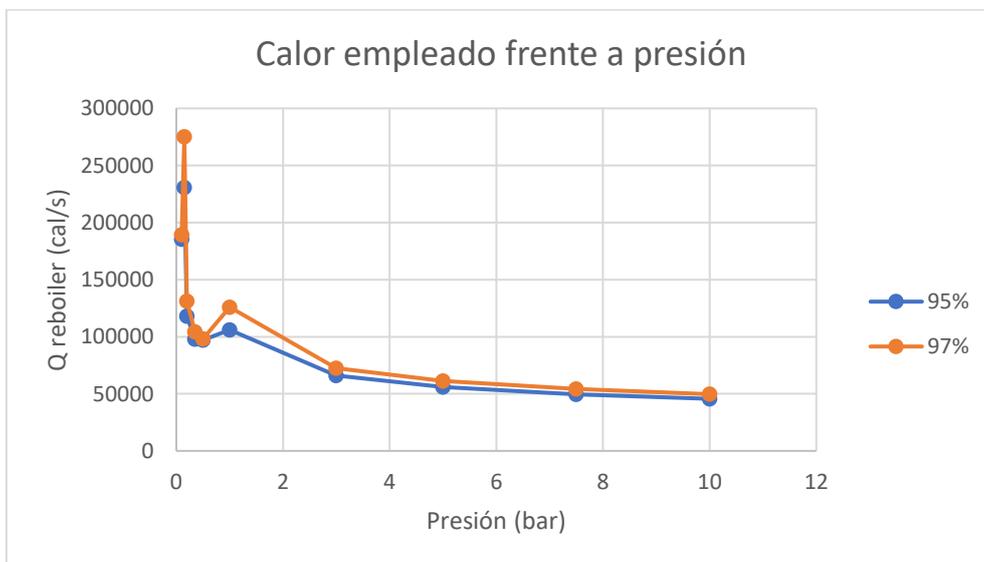
Cabe destacar que a medida que disminuye el número de etapas, la razón de reflujo es mayor, lo que hace el uso de un mayor número de recursos, así como emplear más recursos para poder cumplir con las especificaciones de separación. Sin embargo, si se aumenta el número de pisos aumenta el coste de la estructura de la columna. Aun así, en este caso compensa tener un mayor número de etapas, ya que sale más viable económicamente.

Tabla 15. Valores obtenidos columna D101.

Columna D-101			
Nº Pisos reales	30	Nivel HLL	0,059 m
Etapas teóricas	28	Nivel NLL	0,037 m
Reflujo	1,834	Nivel LLL	0,014 m
Plato alimentación	11	Área condensador	42,5 m ²
Presión	1 bar	Agua refrigeración	16730,22 kg/h
Perdida de presión	0,5 bar	Área reboiler	128,04 m ²
Altura	15,63 m	Vapor calefacción	925,59 kg/h
Diámetro	1,56 m	Volumen Acumulador	12,78 m ³

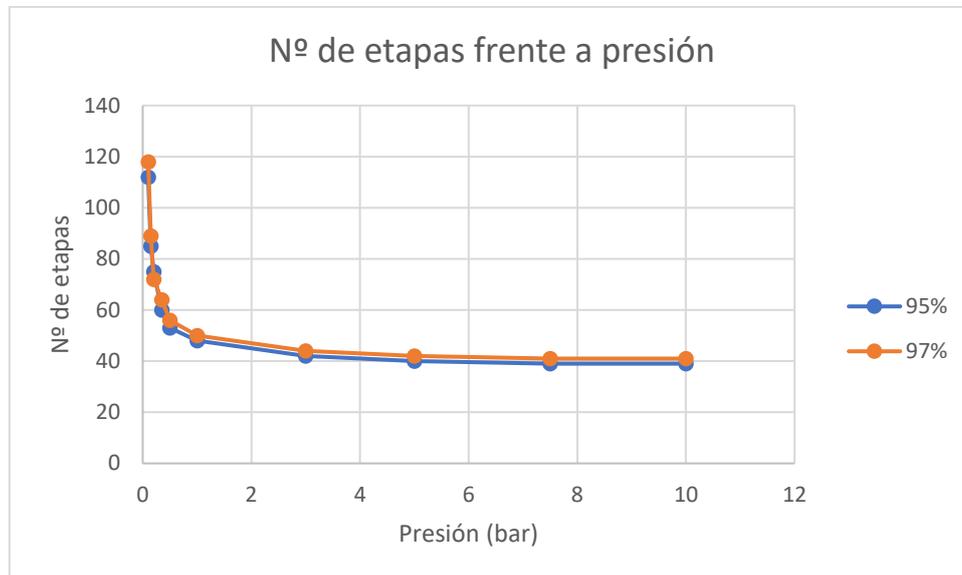
4.3.3. Diseño columna D-102

Para el diseño de esta columna, es necesario fijar que compuesto actúa como clave ligero y cual como clave pesado. En este caso, se dispone de diisopropilfenol y butilfenol, por lo que atendiendo a la tabla de temperatura de ebullición [Tabla 8], el clave ligero es el butilfenol y el clave pesado es el diisopropilfenol. Como se ha comentado anteriormente, al tratarse de dos compuestos con temperatura de ebullición similares, es necesario aumentar su presión y temperatura para poder realizar una separación con una alta pureza. Para este caso, se ha estudiado diferentes presiones y determinados % de pureza del butilfenol en cabeza, ya que, aun aumentando la temperatura y presión, el nº de etapas y la razón de reflujo son muy elevados, lo que implica un elevado coste económico de la columna. Para ello, se ha buscado datos de butilfenoles en el mercado, donde se observan purzas de entre un 95% y un 99%. Realizando la simulación del proceso en la herramienta de Aspen Plus, se ha conseguido purzas de butilfenol del 97%, por lo que se procede a estudiar dos casos, uno con un butilfenol de 95% de pureza y otro al 97% de pureza, con la finalidad de observar diversos parámetros:



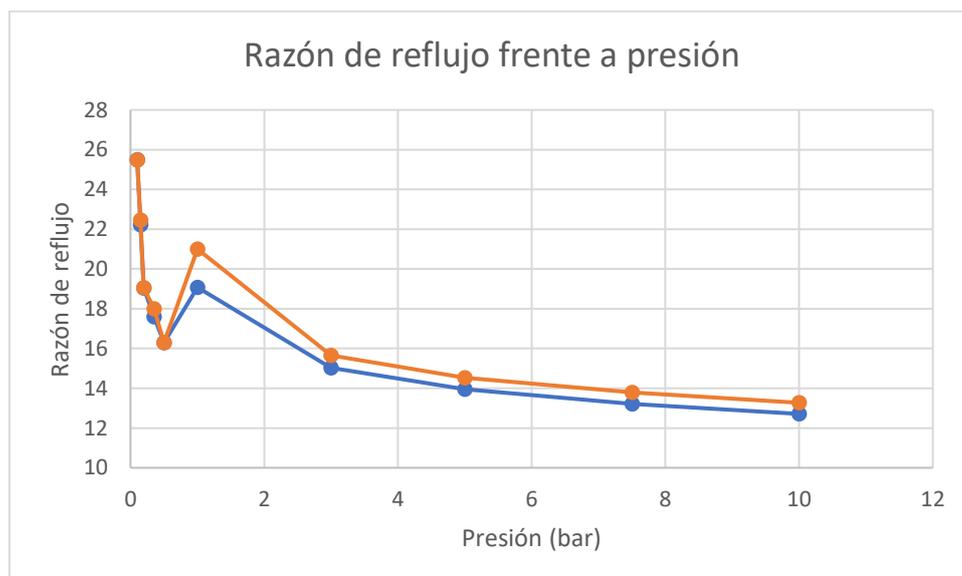
Gráfica 3. Calor empleado frente a presión a una composición de 95% y 97% de pureza de butilfenol

En la anterior gráfica se observa que el calor utilizado para la separación del butilfenol es muy próxima a partir de una presión de 5 bar. Además, se puede deducir de esta gráfica que para una pureza del 97% los valores de calor empleado son muy próximos a los de 95%.



Gráfica 4. N° de etapas frente a presión a una composición de 95% y 97% de pureza de butilfenol

En el caso del número de etapas ocurre algo similar que, con el calor empleado, el número de etapas empleadas para la separación del butilfenol es mínima en comparación a la presión y al 95% del butilfenol.



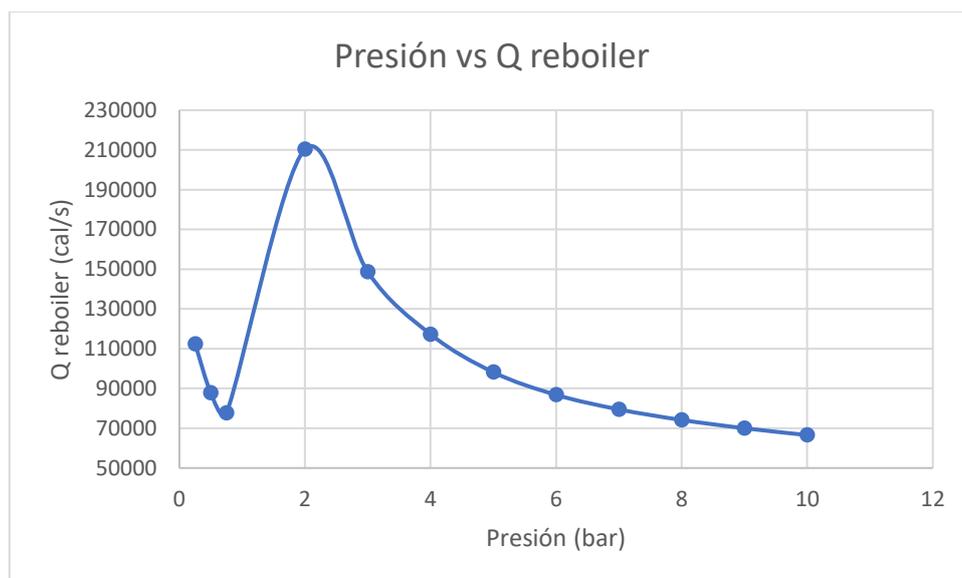
Gráfica 5. Razón de reflujo frente a presión a una composición de 95% y 97% de pureza de butilfenol

Como se puede observar, a medida que se aumenta la presión, disminuye el número de etapas y la razón de reflujo, lo que implica que a mayor presión más viable es la separación. En el caso de la presión más óptima, se escoge la de 5 bar, ya que, aunque a 10 bar da resultados un poco mejores, la diferencia de resultados entre ambas presiones es mínima, lo que hace que el aumento de presión necesario, sumado a la temperatura que habría que elevar a la corriente para la separación supondría un gasto mucho mayor que el coste de la etapa de más que habría que utilizar a 5 bares en comparación de los 10 bares, haciéndolo menos rentable desde el punto de vista económico

Para ello se trabaja con una presión de 5 bar, con una pérdida de carga en la columna de 0,5 bar como en la columna anterior. Además, previamente se calienta la mezcla para que entre en la etapa de alimentación en condiciones óptimas para facilitar la separación.

A la hora del dimensionamiento, se van a seguir los mismos pasos que en la columna D-101.

Para un mismo objetivo de pureza, la columna puede trabajar a presiones altas o bajas. Para saber con qué presión trabajar, se representa ésta última frente al calor del reboiler:



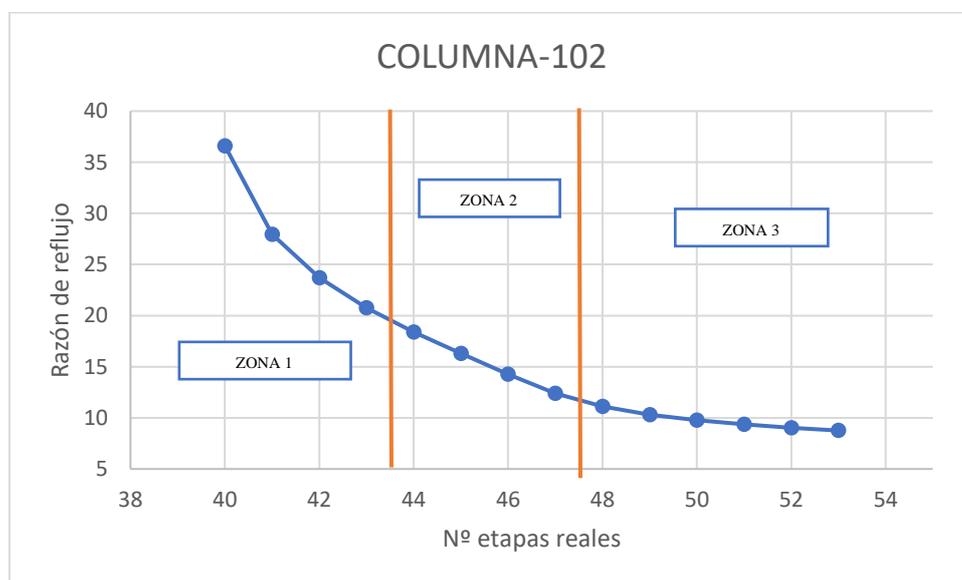
Gráfica 6. Presión frente al calor aportado del reboiler para las diferentes presiones para una pureza de 97%

Como se puede observar, las presiones que oscilan entre 0,25 y 2 bar no son estables, por lo que es difícil sacar algo en claro de esos valores. Además, se observa que para esos valores de presión el número de platos utilizados y la razón de reflujo necesario es económicamente inviable. Teniendo todo esto en cuenta, se realiza el estudio a partir de los 3 bares. Como se observa en la gráfica [6], a medida que aumenta la presión, disminuye el calor de aporte necesario por parte del reboiler, lo que implica un menor gasto energético y a priori un menor gasto energético. Teniendo en cuenta la presión y el calor aportado, se realizará un estudio entre los valores entre 5 y 10 bar para determinar qué valor resulta el más rentable, resultando ser el de 5 bares. Por lo tanto, la mejor opción desde el punto de vista económico

es trabajar a una presión de 5 bar por lo mencionado en las gráficas anteriores, estableciéndose una pérdida de presión en la columna de 0,5 bar, lo que implica una presión en el fondo de la columna de 5,5 bares. En este caso habrá que tener en cuenta la pérdida de presión en la conducción, así como la pérdida de presión que se produce en el intercambiador de calor E-101, por lo que será necesario implementar una bomba para poder compensar estas pérdidas y que entre en la columna de destilación a la suficiente presión y temperatura para evitar los problemas dentro de la columna.

4.3.3.1 Optimización columna D-102

Para realizar la separación de la columna D-102 se puede operar con distintas relaciones entre el número de etapas y la razón de reflujo. Para conocer la relación óptima entre estas variables, se realiza una gráfica donde se ve visualmente esta relación:



Gráfica 7. N° de etapas reales frente a razón de reflujo columna D102

Atendiendo a la gráfica, se pueden diferenciar tres zonas, al igual que en caso anterior:

- Zona 1: No es una zona óptima ya que, aunque la razón de reflujo sea más pequeña, el número de etapas empleado es alto, por lo que desde el punto de vista económico no es viable.
- Zona 2: Es la zona óptima debido a la relación entre el número de etapas teóricas y la razón de reflujo.
- Zona 3: En esta zona la razón de reflujo es demasiado elevada, lo que implica una salida menor del caudal del destilado. Si se tiene un número de etapas pequeño se dispara la razón de reflujo.

Tras establecer las zonas dentro de la gráfica, se selecciona el número de etapas o pisos teóricos que se encuentran en la zona 2 donde se obtienen purezas del diisopropilfenol y butilfenol superiores al 97%. Ya que los platos de la columna no tienen un 100% de eficacia, el número de etapas reales será igual a las etapas teóricas entre la eficiencia de cada plato, que en este caso es del 85%.

Tabla 16. Etapas y reflujo de la zona 2 en la columna D102

Nº etapas teóricas	Nº etapas reales	Razón de reflujo
42	44	18,405
43	45	16,304
44	46	14,276
45	47	12,404

Para conocer el número de etapas óptima con el que la columna va a trabajar se van a realizar los mismos pasos que en la columna D 101. Una vez calculados los costes de la estructura, del condensador, del reboiler y los servicios auxiliares empleados, se comparan, para los diferentes nº de etapas y razón de reflujo de la zona 2 para ver que opción resulta económicamente más viable.

Tabla 17. Coste de cada columna con un número determinado de pisos teóricos y razón de reflujo según la zona 2.

Pisos teóricos	42	43	44	45
pisos reales	44	45	46	47
Razón de reflujo	18,405	16,304	14,276	12,404
Columna	486.229,37 €	497.129,23 €	508.023,74 €	518.913,02 €
condensador	17.698,45 €	17.450,52 €	17.058,19 €	16.754,05 €
reboiler	51.451,95 €	48.139,43 €	44.823,98 €	41.783,64 €
deposito	2.143,94 €	2.144,25 €	2.144,76 €	2.145,73 €
agua refrigeracion	97,18 €	97,24 €	97,28 €	97,36 €
vapor de agua	40.947,68 €	40.937,09 €	40.921,18 €	40.857,88 €
Coste total	598.568,57 €	605.897,75 €	613.069,13 €	620.551,68 €

Una vez realizados todos los cálculos sobre dimensionamiento y costes de los equipos y servicios auxiliares, se puede concluir que la columna más rentable económicamente es la de 44 pisos reales.

Cabe destacar que a medida que disminuye el número de etapas, la razón de reflujo es mayor, lo que hace el uso de un mayor número de recursos, así como emplear más recursos para poder cumplir con las especificaciones de separación. Sin embargo, si se aumenta el número de pisos aumenta el coste de la estructura de la columna. Aun así, en este caso compensa tener un mayor número de etapas, ya que sale más viable económicamente.

Tabla 18. Valores obtenidos columna D102.

Columna D-102			
Nº Pisos reales	44	Nivel HLL	0,046 m
Etapas teóricas	42	Nivel NLL	0,029 m
Reflujo	18,405	Nivel LLL	0,011 m
Plato alimentación	22	Área condensador	1,24 m ²
Presión	5	Agua refrigeración	320,07 kg/h
Perdida de presión	0,5 bar	Área reboiler	24,79 m ²
Altura	23,47 m	Vapor calefacción	213,89 kg/h
Diámetro	1,2	Volumen Acumulador	0,133 m ³

5. ANALISIS ECONOMICO DE LA PLANTA

Una vez desarrollado el dimensionamiento y el coste de cada uno de los equipos, servicios auxiliares y materias primas utilizados para la obtención de butilfenol, se analiza la rentabilidad de dicha planta y si el desarrollo de este proceso de obtención butilfenol proporciona un valor competitivo en comparación a los butilfenoles empleados en la actualidad.

5.1 Inversión necesaria

En primer lugar, es necesario conocer el coste de todos los equipos utilizados en el diseño de la planta, donde se calculan a partir de las ecuaciones del anexo. Una vez obtenidos, dichos costes son actualizados mediante el índice de precios industriales (IPRI). Este IPRI es consultado en el Instituto Nacional de Estadística, ya que este índice varía cada mes. Para el cálculo de los equipos se ha establecido el valor de IPRI del mes de enero del 2023. El coste de los equipos viene definido en la siguiente tabla:

Tabla 19. Coste de todos los equipos.

Equipos	Euros €
Reactor	1.127.199,24 €
Columna D-101	621.307,91 €
Columna D-102	598.538,62 €
Flash 1	193.325,00 €
Flash 2	1.365,65 €
Mezclador	41.248,96 €
Cambiador E-101	56.988,56 €
Cambiador E-102	33.783,67 €
Cambiador E-103	62.413,44 €
Cambiador E-104	14.782,14 €
Cambiador E-105	26.806,67 €
Cambiador E-106	26.660,72 €
Bomba B1	37.460,44 €
Bomba B2	52.382,29 €
Bomba B3	67.682,39 €
Bomba B4	667,37 €
Total	2.962.613,05 €

Los cálculos de los equipos vienen explicados y definidos en el **anexo 2 y 3**.

Una vez conocido el gasto total de los equipos de la planta, se emplea el método de porcentajes para establecer, de manera aproximada, del coste de la inversión necesaria para esta planta de producción. Para ello, se aplican una serie de porcentajes establecidos los cuales se ven en la siguiente tabla:

Tabla 20. Cálculo de la inversión necesario. Método de porcentajes.

Equipos		2.962.613,05 €
materiales	70% de E	2.073.829,13 €
Obra civil y servicios	28% de M	580.672,16 €
Tuberías y estructuras	45% de M	933.223,11 €
instrumentación	10% de M	207.382,91 €
electricidad	10% de M	207.382,91 €
aislamiento	5% de M	103.691,46 €
pintura	2% de M	41.476,58 €
ingeniería de proceso	No evaluable	1.000.000,00 €
ingeniería de detalle	40% de M+E	2.014.576,87 €
construcción	60% de M+E	3.021.865,31 €
ISLB	Suma de lo anterior	13.146.713,50 €
servicios auxiliares	4% de ISLB	525.868,54 €
off sites e interconexiones	8% de ISLB	1.051.737,08 €
Puesta en marcha	3,5 de ISLB	460.134,97 €
subtotal	Suma de lo anterior	15.184.454,09 €
imprevistos	10% de lo anterior	1.518.445,41 €
Total		16.702.899,50 €

Aplicando el método de los porcentajes, se obtiene una inversión necesaria de 15.602.575,86 €. Dicha inversión se realizará en los 3 primeros años y se divide en partes iguales.

5.2 Coste de operación de la planta

En cuanto a los gastos de operación de planta, se tendrán en cuenta los servicios auxiliares necesarios para cumplir con los requisitos de la planta, así como las materias primas empleadas para la obtención de los productos de dicha planta. Conocidos los caudales empleados y el coste de cada uno de ellos, se calcula el gasto total por año, suponiendo que la planta opera 8000 horas por año.

Tabla 21. Gastos anuales servicios auxiliares

Costes de operación de la planta		Total euros
Agua de refrigeración D101	0,03 €/m ³	4.015,25 €
Agua de refrigeración D102	0,03 €/m ³	97,36 €
Agua de refrigeración E102	0,03 €/m ³	1.918,97 €
Agua de refrigeración E105	0,03 €/m ³	2.022,49 €
Agua de refrigeración E106	0,03 €/m ³	19.901,74 €
Vapor de agua D101	6,5 €/Tm	65.932,96 €
Vapor de agua D102	9,3 €/Tm	40.857,88 €
Vapor de agua E101	6,5 €/Tm	2.396.500,08 €
Vapor de agua E103	9,3 €/Tm	4.129.702,20 €
Vapor de agua E104	9,3 €/Tm	133.310,47 €
Potencia bombas	0,042 €/kW h	6.634,03 €
Total		6.800.893,43 €

***Los precios de las materias primas han sido establecidos a partir de datos bibliográficos.**

5.3 Coste materias primas

En cuanto al coste de materias primas se ha calculado como la diferencia entre lo que entra inicialmente en el reactor menos lo que se recupera en la cabeza de la columna D-101.

Tabla 22. Gastos anuales de materias primas.

Compuesto	euros
Dodecano	287.547.840,84 €
fenol	812.139.609,10 €
2-propanol	882.849.069,00 €
total	1.982.536.518,94 €

Estos valores han sido obtenidos bibliográficamente [17]. Desde el punto económico, el coste de las materias primas es desorbitado, aunque teniendo en cuenta el coste de cada uno de los compuestos y la ganancia económica del diisopropilfenol y butilfenol, tiene sentido.

5.4 Estudio de rentabilidad de la planta

Para poder obtener el coste unitario del butilfenol, es necesario obtener primero el valor obtenido del diisopropilfenol, ya que habrá que restar el coste de producción anual a lo obtenido por el diisopropilfenol. Para ello se ha obtenido el precio del diisopropilfenol que hay actualmente en el mercado, que es de 0,1 kg de 2,4 diisopropilfenol a 95% a 44,6 euros [17]

$$Ganancia\ diisopropilfenol = \frac{44,6\ € \cdot 250,22 \frac{kg}{h} \cdot 8000\ h}{0,1\ kg} = 892.784.960\ €$$

Por otra parte, se calcula la cantidad de butilfenol obtenido. Se han buscado precios del butilfenol y se ha obtenido un valor de 78,8 € los 0,250 kg [17]:

$$Ganancia\ butilfenol = \frac{78,8\ € \cdot 398,89 \frac{kg}{h} \cdot 8000\ h}{0,25\ kg} = 1.005.841.024\ €$$

Por lo tanto, la rentabilidad de la planta a día de hoy con los precios establecidos en el mercado sería el siguiente:

Tabla 23. Ventas de productos obtenidos según precios del mercado.

Compuesto	Euros
Butilfenol 97%	1.005.841.024,00 €
Diisopropilfenol 95%	892.784.960,00 €
Total	1.898.625.984,00 €

***Los precios de los compuestos obtenidos han sido establecidos a partir de datos bibliográficos**

(17)

Para que el proyecto sea rentable, es necesario obtener el coste del butilfenol que tendría que tener para compensar los costes totales de la planta. Para ello:

$$\text{Coste} = \text{Coste anual} - \text{Ganancia diisopropilfenol}$$

$$\text{Coste} = 1.994.565.804 \text{ €} - 892.784.960 \text{ €} = 1.101.780.844 \text{ €}$$

Para que el proyecto sea rentable, el valor del coste unitario del butilfenol tiene que ser igual o superior al último coste calculado. Para ello:

$$398,89 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \cdot 8000 \frac{\text{h}}{\text{año}} = 3.191.120 \text{ kg/h}$$

$$1.101.780.844 \frac{\text{€}}{\text{año}} \cdot \frac{1 \text{ año}}{3.191.120 \text{ kg}} = 345,26 \text{ €/kg}$$

Finalmente, el precio de venta unitario del butilfenol es de 345,26 €/kg. Se ha buscado precios del butilfenol, cuyo valor actual esta en 315,2 €/kg (17). Teniendo en cuenta el dato bibliográfico del precio encontrado, el precio del butilfenol obtenido del proceso es 40 € más caro que lo que se esta vendiendo actualmente, por lo que no resulta rentable debido a la falta de competitividad obtenido por otras materias primas.

Paralelo a esto, se van a plantear una serie de escenarios en base a rangos de precios con el fin de determinar un precio de venta el cual fuese rentable para la planta y permitiese recuperar la inversión.

Tabla 24. Ventas obtenidas para los diferentes casos estudiados.

		€/kg	Ventas butilfenol (€/año)	Ventas Totales (Butilfenol + Diisopropilfenol) (€/año)
Caso A	Precio butilfenol mercado	315,20 €	1.005.841.024,00 €	1.898.625.984,00 €
Caso B	Precio butilfenol mercado + 10 €	325,20 €	1.037.752.224,00 €	1.930.537.184,00 €
Caso C	Precio butilfenol mercado + 20 €	335,20 €	1.069.663.424,00 €	1.962.448.384,00 €
Caso D	Precio butilfenol mercado + 30 €	345,20 €	1.101.574.624,00 €	1.994.359.584,00 €
Caso E	Precio butilfenol mercado + 40 €	355,20 €	1.133.485.824,00 €	2.026.270.784,00 €

Los tres primeros casos quedan descartados ya que el precio de venta unitario del butilfenol es inferior al calculado anteriormente, originando pérdidas anuales y no recuperando la inversión.

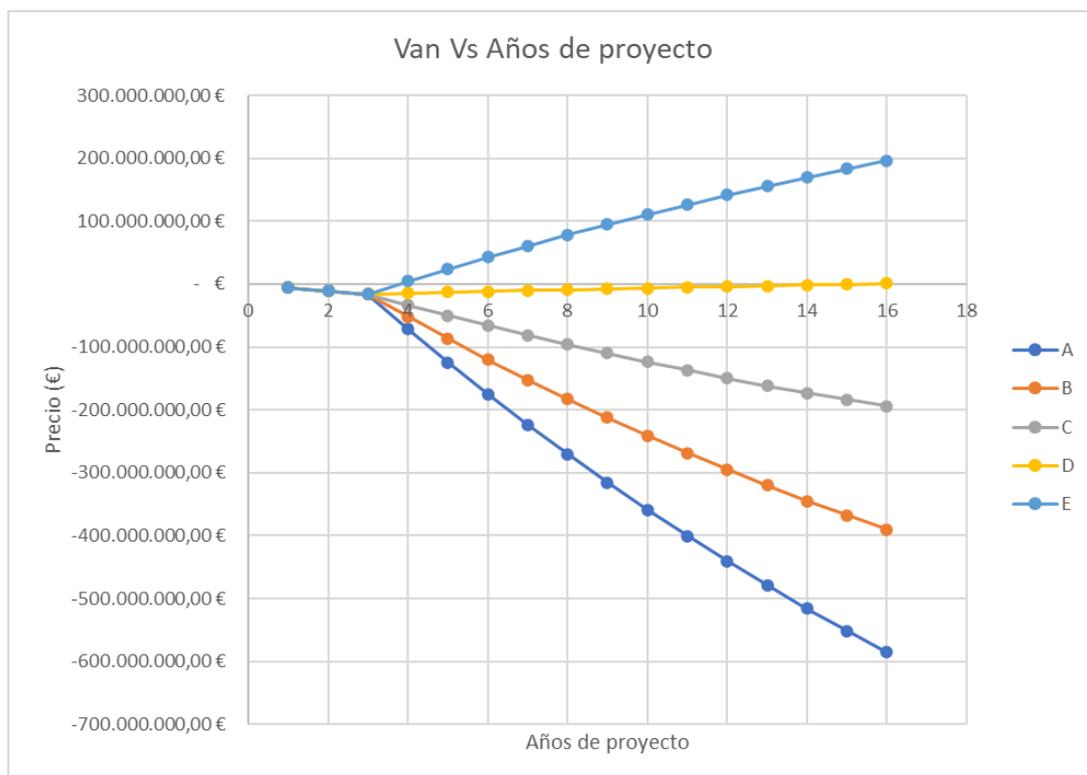
El resto de los casos se estudian mediante el cálculo del VAN, siendo el Valor Actual Neto de la planta de producción de este TFG, siendo un criterio de inversión que actualiza los pagos y cobros para conocer las pérdidas o ganancias de un proyecto.

- $VAN > 0$; El proyecto genera beneficios, por lo que resulta rentable.
- $VAN = 0$; El proyecto no genera ni beneficios ni pérdidas
- $VAN < 0$; El proyecto genera pérdidas. No resulta rentable

Una vez obtenido la inversión necesaria a realizar el proyecto, así como el coste y las ventas anuales, se calcula el VAN teniendo en cuenta lo siguiente:

- Se considera un intervalo de operación de 15 años para la planta propuesta.
- Se considera que la planta opera 8000 h/año
- La inversión se va a repartir de forma equitativa durante los tres primeros años de proyecto
- Se fijan unos impuestos del 30%
- Se considera una amortización lineal en los 10 años de operación de la planta.
- Se fija un valor de 12 % para la tasa de interés con el fin de estudiarla.

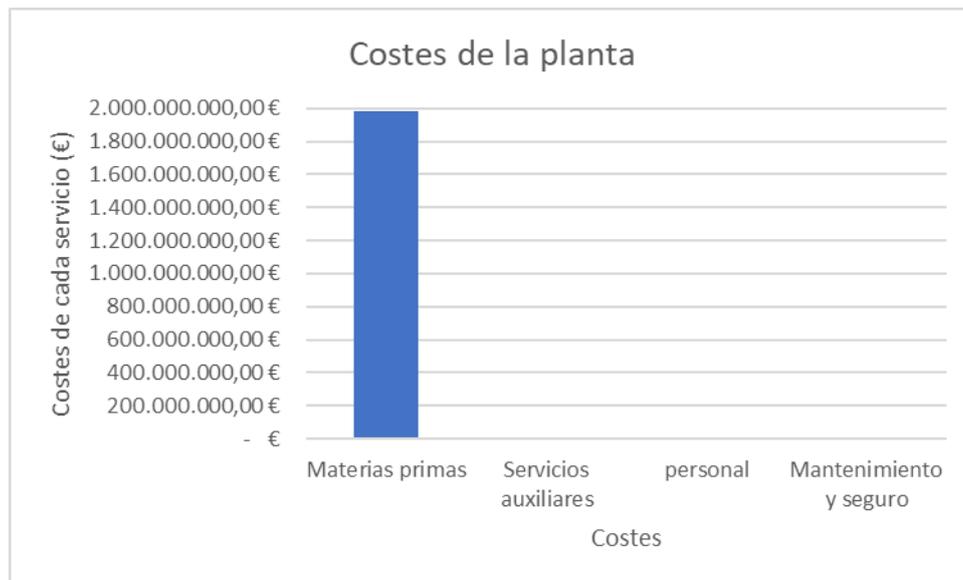
A continuación, se muestran los resultados de los diferentes casos:



Gráfica 8. Rentabilidad del proyecto según el caso estudiado

En la siguiente imagen se muestra que el único caso por el cual el proyecto resulta rentable es cuando se establece el caso E (Precio de butilfenol + 40 €). Por otra parte, se observa que para el caso A, que corresponde al caso con el precio del butilfenol al real, se obtienen pérdidas de dinero desorbitadas, lo que hace que este proceso a día de hoy resulta inviable desde el punto de vista económico.

Otro factor a tener en cuenta en el análisis económico es el coste tanto de las materias primas en comparación del resto de costes siendo el siguiente:



Gráfica 9. Relación de cada uno de los costes anuales de la planta

Como se observa en la gráfica, el coste de las materias primas en comparación es desorbitado debido al elevado coste de cada uno de los compuestos dentro del mercado, lo que hace el gasto mayoritario en función de los otros costes.

En conclusión, se puede decir que llevar este proceso a nivel industrial supone una pérdida económica muy significativa teniendo en cuenta los precios actuales. Además, la demanda obtenida en este TFG corresponde a una estimación de la producción en Europa y Asia, lo que hace que esta industria tenga magnitudes elevadas de costes y ganancias. Se tendrán que estudiar otras opciones o conseguir abaratar las materias primas para conseguir un balance económico más estable.

6 .CONCLUSIONES

Una vez realizado el diseño de la planta y calculado los costes totales, las conclusiones que pueden extraerse son las siguientes:

- Para la obtención del valor de butilfenol es necesario emplear una cantidad de 2-propanol, fenol y dodecano elevados. Cabe destacar que la mayoría se recircula al reactor de nuevo con una cantidad pequeña de agua, lo que hace que se abarate el proceso. Además, un punto a favor que tienen estos tres compuestos es que se separan con facilidad del butilfenol y diisopropilfenol, lo que esta corriente de reciclo, aún con cantidades elevadas, se realiza de manera satisfactoria sin la necesidad de disparar el presupuesto.
- Debido a la poca diferencia entre la temperatura de ebullición entre el butilfenol y el diisopropilfenol, es necesario emplear un número de etapas elevado (44 etapas reales), con una razón de reflujo elevada (18,405), obteniendo una pureza del diisopropilfenol de un 97%. En el caso de necesitar una pureza, será necesario establecer otros procesos o rutas para ver si se puede mejorar la pureza del compuesto. De todas formas, se han buscado bibliográficamente compuestos de butilfenoles en venta y se encuentran purezas de entre 95 y 99%, estando dentro de los límites del mercado.
- En cuanto al análisis económico de la planta, se observa que los valores obtenidos de inversión necesaria para la producción de butilfenol son muy elevadas, además que para el proyecto comience a ser rentable sería necesario que el valor de butilfenol estuviese en los valores de mercado actual más 40 euros por encima del precio de mercado. Por lo tanto, el proyecto no resulta rentable económicamente, siendo necesario utilizar otras rutas de obtención de butilfenol a día de hoy. Si cabe destacar que esta manera de obtención es totalmente limpia y renovable, por lo que en un futuro puede ser una alternativa siempre y cuando se reduzca el precio de las materias primas o se incrementa el precio del butilfenol en el mercado.

7 .BIBLIOGRAFÍA

1. BP, "Statistical Review of World Energy 2020," (2020).
2. BP, "Statistical Review of World Energy 2019," (2019).
3. J. C. Serrano-ruiz & J. A. Dumesic, "Catalytic routes for the conversion of biomass into liquid hydrocarbon transportation fuels," *Energy Environ. Sci.*, 4, (2011), 83–99
4. A. Demirbaş & G. Arin, "An overview of biomass pyrolysis," *Energy Sources*, 24, (2002), 471–482
5. A. V. Bridgwater, "Fast Pyrolysis of Biomass: A Handbook," Cpl Press, (2005).
6. M. I. Jahirul, M. G. Rasul, A. A. Chowdhury & N. Ashwath, "Biofuels production through biomass pyrolysis. A technological review," *Energies*, 5, (2012), 4952–5001.
7. G. W. Huber, S. Iborra & A. Corma, "Synthesis of Transportation Fuels from Biomass: Chemistry, Catalysts, and Engineering," *Chem. Rev.*, 106, (2006), 4044–4098
8. P. Ferrini, C. A. Rezende & R. Rinaldi, "Catalytic Upstream Biorefining through Hydrogen Transfer Reactions: Understanding the Process from the Pulp Perspective," *ChemSusChem*, 9, (2016), 3171–3180.
9. J. He, C. Zhao & J. A. Lercher, "Impact of solvent for individual steps of phenol hydrodeoxygenation with Pd/C and HZSM-5 as catalysts," *J. Catal.*, 309, (2014), 362–375
10. E. M. Flanigen, "Chapter 2. Zeolites and Molecular Sieves an Historical Perspective," in *Studies in Surface Science and Catalysis*, 137, Elsevier Science B.V., (2001), 11–35.
11. W. Xu, S. J. Miller, P. K. Agrawal & C. W. Jones, "Zeolite topology effects in the alkylation of phenol with propylene," *Appl. Catal. A Gen.*, 459, (2013), 114–120. butil
12. B. Wang, C. W. Lee, T. X. Cai & S. E. Park, "Identification and influence of acidity on alkylation of phenol with propylene over ZSM-5," *Catal. Letters*, 76, (2001), 219–224. Butil
13. L. Wei, Y. Shang & P. Yang, "Alkylation of phenol with isopropanol over MCM-49 zeolites," *React.Kinet.Catal.Lett*, 93, (2008), 265–271.
14. K. Y. Nandiwale & V. V. Bokade, "Selective synthesis of propofol (2,6-diisopropylphenol), an intravenous anesthetic drug, by isopropylation of phenol over H-beta and H-mordenite," *RSC Adv.*, 4, (2014), 32467–32474
15. G. D. Yadav & S. S. Salgaonkar, "Selectivity Engineering of 2,6-Diisopropylphenol in Isopropylation of Phenol over Cs₂.5H₀.5PW₁₂O₄₀/K-10 Clay," *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, (2005), 1706– 1715.
16. E. Modrogan, M. H. Valkenberg & W. F. Hoelderich, "Phenol alkylation with isobutene - influence of heterogeneous Lewis and/or Brønsted acid sites," *J. Catal.*, 261, (2009), 177–187.
17. [Thermo Scientific Chemicals | Fisher Scientific](#)
18. [tarifa.pdf \(bombashasa.com\)](#)

ANEXO

ANEXO 1. DETALLES DE LA SIMULACIÓN

Para poder utilizar la herramienta, es necesario determinar los compuestos que se van a simular, así como el método termodinámico utilizado en el desarrollo del proceso en la planta. En cuanto a los compuestos utilizados, como el producto de interés es el butilfenol y diisopropilfenol y según la tesis de Alba García Minguellán no se especifica en un butilfenol o diisopropilfenol en concreto, se tendrá que especificar que butilfenol y que diisopropilfenol se utiliza para la simulación. Como se ha observado en la herramienta Aspen Plus, los butilfenoles y diisopropilfenoles entre si poseen propiedades químicas prácticamente idénticas. En el caso del butilfenol, se ha escogido el 4-butilfenol y en el caso del diisopropilfenol, el 2,4-diisopropilfenol.

En cuanto al método termodinámico empleado, se ha seguido el siguiente esquema:

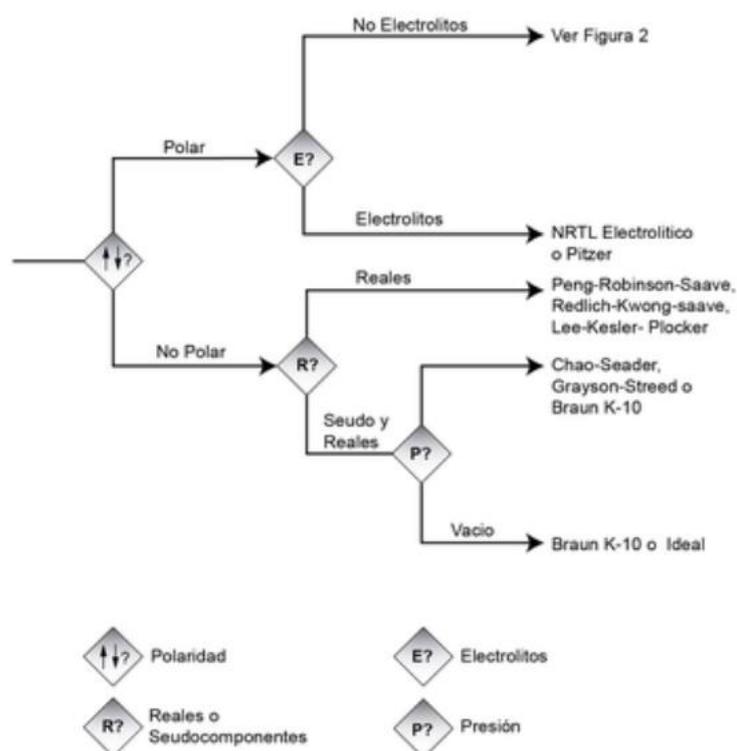


Figura 12.Árbol de decisión para la selección de modelo termodinámico de Aspen

Los componentes con los que se van a trabajar son polares ya que se disuelven en agua. Por lo tanto, el método empleado es el NRTL

ANEXO 2. CÁLCULOS REALIZADOS DEL REACTOR

En este anexo, se va a explicar todo el proceso de obtención de los datos del reactor, incluyendo lo explicado en la parte de la solución técnica del reactor con la finalidad de facilitar la explicación.

- Escala laboratorio

A través de los datos obtenidos en un laboratorio, se procede a diseñar el reactor donde se producen las reacciones de alquilación del fenol con 2-propanol utilizando como disolvente el dodecano. Para ello se parten con los datos obtenidos en el experimento:

- **Datos**

Tabla 1. Datos bibliográficos utilizados en la tesis de Alba García Minguillán

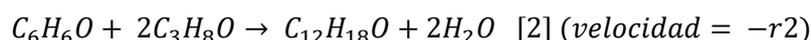
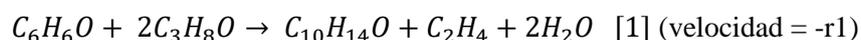
Datos a escala de laboratorio	
Cantidad de 2-propanol	180 mg \approx 3 mmol
Cantidad de dodecano	5,25 g \approx 7 mL
Cantidad de fenol	188 mg \approx 2 mmol

Para la elaboración de los cálculos, es necesario conocer una serie de datos obtenido durante el experimento y son los siguientes:

- X_{fenol} : 0,39
- $S_{Butilfenol}$: 0,65
- $S_{Diisopropilfenol}$: 0,35

Una vez fijada la composición de entrada a escala de laboratorio del reactor, será necesario obtener los valores de cada uno de los compuestos de salida.

Debido a que no se tiene información de los pasos previos para la obtención del butilfenol, las ecuaciones que se van a introducir al reactor se simplifican en dos y son las siguientes:



Esto conlleva a que en el reactor se están produciendo dos reacciones irreversibles en paralelo, por lo que habrá que calcular las velocidades de reacción para cada uno de los casos, así como la producción de butilfenol y diisopropilfenol que se genera. Hay que tener en cuenta que la estequiometría de la reacción es igual en el caso del fenol, diisopropilfenol y butilfenol es la misma y la cantidad de reactivos usados en ambas reacciones es la misma y en las mismas cantidades,

Como se tiene la conversión global del fenol y la cantidad inicial, se obtiene la cantidad final a partir de la siguiente ecuación

$$X_{Fenol} = \frac{\text{Cantidad inicial}_{fenol} - \text{Cantidad final}_{fenol}}{\text{Cantidad inicial}_{fenol}} \quad [3]$$

$$\text{Cantidad final}_{fenol} = 2 - 2 * 0,39 = 1,22 \text{ mmol fenol}$$

Por lo tanto, la cantidad reaccionada es la siguiente:

$$\text{Cantidad reaccionada}_{fenol} = \text{Cantidad inicial}_{fenol} - \text{Cantidad final}_{fenol} \quad [4]$$

$$\text{Cantidad reaccionada}_{fenol} = 2 - 1,22 = 0,78 \text{ mmol fenol}$$

Para poder obtener la velocidad de reacción global $(-r_1 + -r_2)$, se empleará la siguiente formula:

$$(-r_1 \pm r_2) = \frac{\text{moles reaccionados de fenol}}{t \cdot W} \quad [5]$$

Donde:

- $(-r_1 + -r_2)$: Es la velocidad de reacción expresada en $\text{mmol}/\text{h} \cdot \text{g}$
- t : Es el tiempo en que se realiza el experimento expresado en horas
- W : Es el peso de catalizador empleado en el laboratorio en gramos

Por lo tanto, la velocidad de reacción que se obtiene es la siguiente:

$$(-r_1 + -r_2) = \frac{0,78 \text{ mmol fenol}}{4 \text{ h} \cdot 0,185 \text{ g}} = 1,05 \text{ mmol}/\text{h} \cdot \text{g}$$

Con el valor de la reacción global obtenido, se aplica la fórmula de reactor de mezcla perfecta con presencia de catalizador para calcular la alimentación de entrada necesaria de fenol:

$$\frac{W}{F_{fenol_0}} = \frac{X_{fenol}}{r_{total}} \quad [6]$$

Donde:

- W: Es el peso de catalizador en gramos
- F_{fenol_0} es la alimentación del reactor de fenol en $mmol/h$
- X_{fenol} : Es la conversión del fenol
- r_{total} : Velocidad global de reacción $mmol/h \cdot g$

$$F_{fenol_0} = \frac{1,05 \text{ mmol}/h \cdot g \cdot 0,185 \text{ g}}{0,39} = 0,498 \text{ mmol}/h$$

$$F_{fenol_0} = 0,498 \frac{\text{mmol}}{h} \cdot \frac{94,11 \text{ mg}}{1 \text{ mmol}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} = 0,046 \text{ g}/h$$

Para el propanol:

$$\text{Cantidad reaccionada}_{2\text{-prop}} = \text{Cantidad inicial}_{fenol} - 2 \cdot \text{Cantidad inicial}_{fenol} \cdot X_{fenol} \quad [7]$$

$$\text{Cantidad final}_{2\text{-prop}} = 4 - 2 \cdot 2 \cdot 0,39 = 2,44 \text{ mmol } 2\text{-propanol}$$

Calculando la entrada y salida del 2-propanol en kg/h:

$$F_{2\text{-prop entrada}} = 4 \text{ mmol} \cdot \frac{60,09 \text{ mg}}{1 \text{ mmol}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} = \frac{0,240 \text{ g}}{4 \text{ h}} = 0,060 \text{ g}/h$$

$$F_{2\text{-prop salida}} = 2,44 \text{ mmol} \cdot \frac{60,09 \text{ mg}}{1 \text{ mmol}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} = \frac{0,146 \text{ g}}{4 \text{ h}} = 0,036 \text{ g}/h$$

Como en el dodecano se utilizan 5,25 g según la tesis de Alba García Minguillán, se dividirá entre 4 para obtener la cantidad de dodecano en una hora:

$$F_{Dodecano} = \frac{5,25 \text{ g}}{4 \text{ h}} = 1,31 \text{ g}/h$$

Por último, queda obtener las cantidades de productos de interés que se obtienen. Para ello se utiliza el dato obtenido de la tesis de Alga García Minguillán de selectividad del butilfenol y diisopropilfenol y conversión de fenol:

$$S_{Butilfenol} \cdot X_{fenol} = \frac{Moles_{butilfenol}}{Moles_{fenol\ in}} \quad [8]$$

Donde:

- $S_{Butilfenol}$: Selectividad del butilfenol
- X_{fenol} : Conversión de fenol

Se sustituyen los datos y se obtiene la masa de butilfenol:

$$Moles_{Butilfenol} = 0,65 \cdot 0,39 \cdot 2 = 0,507 \text{ mmol butilfenol}$$

Para el caso de diisopropilfenol:

$$S_{Diisopropilfenol} \cdot X_{fenol} = \frac{Moles_{diisopropilfenol}}{Moles_{fenol\ in}} \quad [9]$$

Se sustituyen los datos y se obtiene la masa de diisopropilfenol:

$$Moles_{Diisopropilfenol} = 0,35 \cdot 0,39 \cdot 2 = 0,273 \text{ mmol diisopropilfenol}$$

Para el caso del agua y del etileno, otros productos generados de las reacciones de alquilación de fenol, se obtienen por estequiometría con respecto al butilfenol y diisopropilfenol. Para ello:

Para la reacción 1:

$$Moles_{agua} = 2 \cdot Moles_{butilfenol} = 2 \cdot 0,507 \text{ mmol} = 1,014 \text{ mmol agua}$$

$$Moles_{etileno} = Moles_{butilfenol} = 0,507 \text{ mmol etileno}$$

Para la reacción 2:

$$Moles_{agua} = 2 * Cantidad_{Diisopropilfenol} = 2 \cdot 0,273 = 0,546 \text{ mmol agua}$$

Con los productos calculados, se pasa todo a g/h :

Para butilfenol:

$$F_{butilfenol} = 0,507 \text{ mmol} \cdot \frac{150 \text{ mg}}{1 \text{ mmol}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} \cdot \frac{1}{4 \text{ h}} = 0,019 \text{ g/h}$$

Para diisopropilfenol:

$$F_{diisoprop} = 0,273 \text{ mmol} \cdot \frac{178 \text{ mg}}{1 \text{ mmol}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} \cdot \frac{1}{4 \text{ h}} = 0,012 \text{ g/h}$$

Para el agua:

$$F_{agua} = 1,56 \text{ mmol} \cdot \frac{18 \text{ mg}}{1 \text{ mmol}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} \cdot \frac{1}{4 \text{ h}} = 0,007 \text{ g/h}$$

Para el etileno:

$$F_{butilfenol} = 0,507 \text{ mmol} \cdot \frac{28 \text{ mg}}{1 \text{ mmol}} \cdot \frac{1 \text{ g}}{1000 \text{ mg}} \cdot \frac{1}{4 \text{ h}} = 0,0035 \text{ g/h}$$

Por lo tanto, las cantidades de entrada y salida del reactor son las siguientes:

Tabla 2. Valores de entrada a escala de laboratorio de cada uno de los compuestos

Compuesto	Caudal Entrada (g/hr)
Fenol	0,046
2-propanol	0,06
dodecano	1,31

Tabla 3. Valores de entrada a escala de laboratorio de cada uno de los compuestos

Compuesto	Caudal salida (g/hr)
Butilfenol	0,019
Agua	0,007
Etileno	0,0035
Diisopropilfenol	0,012
Fenol sin reaccionar	0,028
Dodecano	1,31
2-Propanol	0,036

Por último, será necesario realizar unos cálculos para posteriormente poder obtener el tamaño de reactor a nivel industrial. La relación V/W se refiere a la relación entre el volumen total del reactor y la cantidad de material que se está procesando en él. En otras palabras, es la relación entre el volumen del recipiente del reactor y la cantidad de sustancia que se agrega al mismo. Para ello se supondrá que se mantiene la relación V/W, como en el reactor discontinuo:

$$\text{Relación: } \frac{\text{Volumen reacción}}{W} \quad [10]$$

Donde:

- Volumen reacción: Volumen que ocupan los reactivos en el reactor (L)
- W: Masa de catalizador (g)

Por lo tanto:

$$\text{Relación: } \frac{\text{Volumen reacción}}{W} = \frac{0,0074 \text{ L}}{0,185 \text{ g}} = 0,04 \text{ L/g}$$

A continuación, se calcula el caudal volumétrico dividiendo la alimentación de la entrada:

$$F_{\text{entrada}} = C_{\text{entrada}} \cdot Q_o \quad [11]$$

Donde:

- F_{entrada} : Es la corriente de alimentación de entrada de los reactivos (mmol/h)
- C_{entrada} : Concentración total de los reactivos (mmol/mL)
- Q_o : Caudal volumétrico (mL/h)

Para la F_{entrada} :

$$F_{\text{fenol entrada}} = 0,498 \text{ mmol/h}$$

$$F_{2\text{-prop entrada}} = 0,060 \frac{\text{g}}{\text{h}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{60,09 \text{ g}} \cdot \frac{1000 \text{ mmol}}{1 \text{ mol}} = 0,998 \text{ mmol/h}$$

$$F_{\text{dodecano entrada}} = 1,31 \frac{\text{g}}{\text{h}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{170,22 \text{ g}} \cdot \frac{1000 \text{ mmol}}{1 \text{ mol}} = 7,69 \text{ mmol/h}$$

Para la C_{entrada} , como se tiene los mmoles de cada compuesto en la tesis de Alba García Minguellan, se va a dividir entre el volumen del reactor que se ha supuesto que es lo mismo que el volumen de la reacción:

$$C_{\text{fenol}} = \frac{2 \text{ mmol}}{7,4 \text{ mL}} = 0,270 \text{ mmol/mL}$$

$$C_{2\text{-propanol}} = \frac{4 \text{ mmol}}{7,4 \text{ mL}} = 0,540 \text{ mmol/mL}$$

$$C_{\text{dodecano}} = \frac{30,86 \text{ mmol}}{7,4 \text{ mL}} = 4,702 \text{ mmol/mL}$$

Para poder calcular Q_o , se cogerán los datos obtenidos de fenol de alimentación y concentración. Por lo tanto, empleando estos datos y utilizando la ecuación [11]:

$$Q_{fenol} = \frac{0,498 \text{ mmol}/h}{0,270 \text{ mmol}/mL} = 1,844 \text{ mL}/h = 1,844 * 10^{-3} \text{ L}/h$$

Por último, se calcula el tiempo espacial (t_e)

$$t_e = \frac{V_{reactor}}{Q_{fenol}} = \frac{0,0074 \text{ L}}{1,844 * 10^{-3} \text{ L}/h} = 4,02 \text{ h}$$

• ESCALA INDUSTRIAL

Una vez realizados los cálculos de laboratorio, se va a llevar el proceso a nivel industrial. Para ello como se ha mencionado anteriormente, se ha fijado una cantidad de salida de butilfenol del reactor de $400 \text{ kg}/hr$, dato obtenido en un estudio de mercado, en el que fija como un dato de producción en Europa y Asia de 3500 tm/año en el año 2021. Para este valor, se ha sumado cantidades que se generan entre los grandes productores de butilfenol (meter empresas).

Extrapolando la cantidad de butilfenol a escala de laboratorio a escala industrial, se lleva a cabo el cálculo de la $F_{fenol \text{ inic ind}}$:

$$F_{fenol \text{ inic ind}} = \frac{F_{fenol \text{ inic lab}} \cdot Cantidad_{butil \text{ indus}}}{Cantidad_{butil \text{ lab}}} \quad [12]$$

$$F_{fenol \text{ inic ind}} = \frac{0,046 * 10^{-3} \cdot 400}{0,019 * 10^{-3}} = 968,42 \text{ kg}/hr$$

Para calcular este valor, utilizando la ecuación [3] se obtiene la cantidad de fenol al final:

$$Cantidad_{final \text{ fenol}} = 968,42 \text{ kg}/hr - 0,39 \cdot 968,42 \text{ kg}/hr = 590,73 \text{ kg}/hr$$

Calculado este dato, se calcula cantidad de fenol consumido [4]:

$$Cantidad_{reaacionada \text{ fenol}} = 968,42 \text{ kg}/h - 590,73 \text{ kg}/h = 377,69 \text{ kg}/h$$

Para calcular la cantidad de catalizador a emplear a nivel industrial, se calcula la $F_{fenol\ inic\ ind}$ en mol/h:

$$F_{fenol\ inic\ ind} = 968,42 \frac{kg}{h} \cdot \frac{1000g}{1kg} \cdot \frac{1\ mol}{94,11\ g} = 10290,29\ mol/h$$

Con la cantidad de fenol en mol/h, se puede obtener la cantidad de catalizador empleando la ecuación [6]:

$$W = \frac{0,39 \cdot 10290,29\ mol/h}{1,05\ mol/h * kg} = 3822,10\ kg$$

A continuación, se procede a calcular todos los compuestos restantes de entrada y salida de reactor:

Reactivos

- Para el caso del 2-propanol:

$$F_{2-prop\ inic\ ind} = \frac{F_{2-prop\ inic\ lab} \cdot Cantidad_{butil\ indus}}{Cantidad_{butil\ lab}} \quad [13]$$

$$F_{2-prop\ inic\ ind} = \frac{0,06 * 10^{-3} \cdot 400}{0,019 * 10^{-3}} = 1263,15\ kg/h$$

Pasando a moles:

$$F_{2-prop\ entrada} = \frac{1263,15\ kg}{1\ h} \cdot \frac{1000\ g}{1\ kg} \cdot \frac{1\ mol}{60,09\ g} = 21020,96\ mol/h$$

Utilizando la ecuación [7]:

$$Cantidad\ final_{2-prop} = 21020,96\ mol/h - 2 \cdot 10290,29\ mol/h * 0,39$$

$$Cantidad\ final_{2-prop} = 12994,53\ mol/h\ 2 - propanol$$

Pasándolo a kg/h:

$$F_{2-prop\ salida} = 12994,53 \frac{mol}{h} \cdot \frac{60,09\ g}{1\ mol} \cdot \frac{1\ kg}{1000\ g} = 780,84\ kg/h$$

- Para la corriente de dodecano

Para el dodecano, se sabe que la corriente de alimentación en datos bibliográficos corresponde el 93,44 % siendo el fenol y 2-propanol el 6,56 restante. Por lo tanto, el valor de dodecano sería:

$$\text{Cantidad dodecano} = \frac{93,44 \cdot 2230,57}{6,56} = 31772,021 \text{ kg/h}$$

Una vez obtenido las corrientes de alimentación al reactor, se procede a calcular el volumen del reactor:

$$\text{Caudal volumétrico fenol} = 968,42 \frac{\text{kg}}{\text{hr}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{1,07 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1 \cdot 10^3 \text{ L}} = 0,905 \text{ m}^3/\text{h}$$

$$\text{Caudal volumétrico 2propanol} = 1263,15 \frac{\text{kg}}{\text{hr}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{0,785 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1 \cdot 10^3 \text{ L}} = 1,609 \text{ m}^3/\text{hr}$$

$$\text{Caudal volumétrico dodecano} = 31772,021 \frac{\text{kg}}{\text{hr}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{0,75 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1 \cdot 10^3 \text{ L}} = 42,36 \text{ m}^3/\text{h}$$

Por lo tanto, el volumen del reactor es:

$$\begin{aligned} \text{Caudal volumétrico alimentado al reactor reactor} \\ = 0,905 \text{ m}^3/\text{h} + 1,609 \text{ m}^3/\text{h} + 42,36 \text{ m}^3/\text{h} = 44,87 \text{ m}^3/\text{h} \end{aligned}$$

Multiplicando el volumen calculado por el tiempo espacial calculado:

$$\text{Volumen util} = 44,87 \text{ m}^3/\text{h} \cdot 4,02 \text{ h} = 180,37 \text{ m}^3$$

Por condiciones de seguridad, se multiplica el volumen útil del reactor por 2:

$$\text{Volumen real} = 180,37 \text{ m}^3 \cdot 2 = 360,75 \text{ m}^3$$

Productos

Por último, queda obtener las cantidades de productos de interés que se obtienen. Para ello se utiliza las mismas formulas utilizadas que en el caso a escala de laboratorio de selectividad del butilfenol y diisopropilfenol y conversión de fenol:

- Para el caso de diisopropilfenol [9]:

$$\text{Moles}_{\text{Diisopropilfenol}} = 0,35 \cdot 0,39 \cdot 10290,29 \text{ mmol} = 1404,62 \text{ mmol diisopropilfenol}$$

Pasándolo a kg/h:

$$F_{diisoprop} = \frac{1404,62 \text{ mol}}{1 \text{ h}} \cdot \frac{178 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \cdot \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} = 250,37 \text{ kg/h}$$

- Para el butilfenol en mol/h:

$$Moles_{butilfenol} = \frac{400 \text{ kg}}{1 \text{ h}} \cdot \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{150 \text{ g}} = 2666,66 \text{ mol/h butilfenol}$$

- Para el agua y etileno

Para el caso del agua y del etileno, otros productos generados de las reacciones de alquilación de fenol, se obtienen por estequiometria con respecto al butilfenol y diisopropilfenol. Para ello:

Para la reacción 1:

$$Moles_{agua} = 2 \cdot Moles_{butilfenol} = 2 \cdot 2666,66 \text{ mol/h} = 5333,33 \text{ mol/h agua}$$

$$Moles_{etileno} = Moles_{butilfenol} = 2666,66 \text{ mol/h etileno}$$

Para la reacción 2:

$$Moles_{agua} = 2 \cdot Moles_{Diisopropilfenol} = 2 \cdot 1404,62 \text{ mol/h} = 2809,24 \text{ mol/h agua}$$

Por lo tanto, la cantidad de agua generada será la suma de lo obtenido en la reacción 1 y en la reacción 2:

$$F_{agua} = \frac{8142,57 \text{ mol}}{1 \text{ h}} \cdot \frac{18 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \cdot \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} = 146,56 \text{ kg/h}$$

Para el etileno:

$$F_{etileno} = \frac{2666,66 \text{ mol}}{1 \text{ h}} \cdot \frac{28 \text{ g}}{1 \text{ mol}} \cdot \frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} = 74,66 \text{ kg/h}$$

Por lo tanto, la cantidad de entrada y salida del reactor a nivel industrial es el siguiente:

Tabla 4. Valores de entrada a escala industrial de cada uno de los compuestos

Compuesto	Caudal salida (kg/h)
Fenol	968,42
Dodecano	31772,02
2-propanol	1265,15

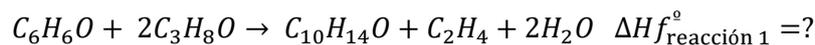
Tabla 5. Valores de salida a escala industrial de cada uno de los compuestos

Compuesto	Caudal salida (kg/h)
Butilfenol	400
Agua	146,56
Etileno	74,66
Diisopropilfenol	250,37
Fenol sin reaccionar	590,74
Dodecano	31772,02
2-propanol sin reaccionar	780,84

- **Cálculo de entalpia de formación de la reacción**

Otro estudio que se va a hacer es calcular el $\Delta^\circ f_{reacción}$. Para ello se tendrán que obtener cada uno de las $\Delta^\circ f$ de los compuestos de la reacción. Debido a que hay presente 2 reacciones en el reactor, se procede a calcular cada una de ellas por separado.

- Para la reacción de alquilación de fenol para la obtención de butilfenol



Para el cálculo de $\Delta^\circ f_{reacción1}$, se utilizará la ley de Hess:

$$\Delta H_{f_{reacción\ 1}}^\circ = \sum n \cdot \Delta H_{f_{productos}}^\circ - \sum m \cdot \Delta H_{f_{reactivos}}^\circ \quad [14]$$

Donde n y m son los coeficientes estequiométricos de los productos y reactivos, respectivamente.

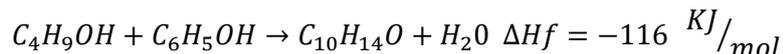
Para aplicar la ley de Hess, primero se tienen que conocer las entalpias de formación de cada una de las sustancias involucradas en la reacción. Por lo tanto:

- $\Delta H_{f_{fenol}}^\circ: -250,1 \text{ KJ/mol}$
- $\Delta H_{f_{isoprop}}^\circ: -173,8 \text{ KJ/mol}$
- $\Delta H_{f_{etileno}}^\circ: 52,3 \text{ KJ/mol}$
- $\Delta H_{f_{agua}}^\circ: -285,8 \text{ KJ/mol}$

En el caso de $\Delta H_{f_{butilfenol}}^\circ$, no se tienen resultados bibliográficos de su calculo, por lo que se tendrá que calcular.

La ley de Hess establece que la variación de entalpía de una reacción química es independiente del camino seguido para llevarla a cabo, siempre que las condiciones iniciales y finales sean las mismas. Para calcular la entalpía de formación de butilfenol utilizando la ley de Hess, necesitamos encontrar la entalpía de la reacción de síntesis de butilfenol. Esto significa que podemos calcular la entalpía de formación de un compuesto como el butilfenol utilizando las entalpías de reacción de otras reacciones químicas conocidas. Para ello se utilizará la ecuación de síntesis de butilfenol:

- Síntesis de butilfenol a partir de butanol y fenol:



Se busco bibliográficamente los datos de las entalpías de formación de compuestos, donde se encontraron todos menos los del butilfenol. Por lo que, con todos estos datos se puede calcular la entalpía de formación del butilfenol.

- $\Delta H_{f_{C_4H_9OH}}^\circ: -305,8 \text{ KJ/mol}$
- $\Delta H_{f_{C_6H_5OH}}^\circ: -167,5 \text{ KJ/mol}$
- $\Delta H_{f_{H_2O}}^\circ: -285,8 \text{ KJ/mol}$

Utilizando la ecuación [14]:

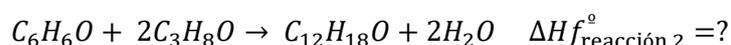
$$-116 = (-285,5 + \Delta H_{f_{butilfenol}}^\circ) - (-305,8 - 167,5)$$

$$\Delta H_{f_{butilfenol}}^\circ = -306,2 \text{ KJ/mol}$$

Con esto calculado, se procede a calcular la $\Delta H_{f_{reacción\ 1}}^\circ$

$$\Delta H_{f_{reacción\ 1}}^\circ = (2 * -285,5 - 306,2 + 52,3) - (-167,5 - 173,8) = -483,6 \text{ KJ/mol}$$

- Para la reacción de alquilación de fenol para la obtención de diisopropilfenol:

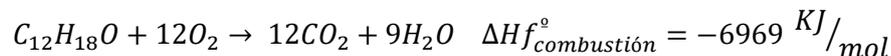


Para el cálculo de $\Delta H_{f_{reacción\ 2}}^\circ$, se utilizará la ley de Hess. Para aplicar la ley de Hess, primero se tienen que conocer las entalpías de formación de cada una de las sustancias involucradas en la reacción. Por lo tanto:

- $\Delta H_{f_{fenol}}^\circ: -250,1 \text{ KJ/mol}$
- $\Delta H_{f_{isoprop}}^\circ: -173,8 \text{ KJ/mol}$
- $\Delta H_{f_{agua}}^\circ: -285,8 \text{ KJ/mol}$

En el caso de $\Delta H_{f_{diisopropilfenol}}^{\circ}$, no se tienen resultados bibliográficos de su cálculo como en el caso del butilfenol, por lo que se tendrá que calcular. Para ello se ha utilizado la reacción de combustión del diisopropilfenol.

- Reacción de combustión del diisopropilfenol:



Se busco bibliográficamente los datos de las entalpias de formación de compuestos, donde se encontraron todos menos los del diisopropilfenol. Por lo que, con todos estos datos se puede calcular la entalpia de formación del diisopropilfenol.

- $\Delta H_{f_{CO_2}}^{\circ}: -394,36 \text{ KJ/mol}$
- $\Delta H_{f_{O_2}}^{\circ}: 0 \text{ KJ/mol}$
- $\Delta H_{f_{H_2O}}^{\circ}: -285,8 \text{ KJ/mol}$

Se sustituyen los datos en la ecuación [14]

$$-6869 = (12 \cdot -394,36 + 9 \cdot -285,8) - (0 + \Delta H_{f_{diisopropilfenol}}^{\circ})$$

$$\Delta H_{f_{diisopropilfenol}}^{\circ} = 435,52 \text{ KJ/mol}$$

Con esto calculado, se procede a calcular la $\Delta H_{f_2}^{\circ}$

$$\Delta H_{f_{reacción 2}}^{\circ} = (2 \cdot -285,5 - 435,52) - (-167,5 - 173,8) = -665,22 \text{ KJ/mol}$$

Se calcula $\Delta H_{f_{reacción global}}^{\circ}$:

$$\Delta H_{f_{reacción global}}^{\circ} = \Delta H_{f_1}^{\circ} + \Delta H_{f_2}^{\circ} = -483,6 \text{ KJ/mol} + -665,22 \text{ KJ/mol} = -1148,82 \text{ KJ/mol}$$

El valor obtenido de realizar la entalpia de reacción global de la reacción es de $-1148,82 \text{ KJ/mol}$, lo que implica que la reacción es exotérmica, es decir, se libera energía en forma de calor hacia el entorno. Esto implica que la energía total de los productos es menor que el total de los reactivos.

ANEXO3. CALCULO Y COSTES DE LOS EQUIPOS

3.1 DIMENSIONAMIENTO DEL REACTOR

Para el cálculo del dimensionamiento del reactor se emplearán las siguientes ecuaciones:

$$e(mm) = \frac{P_D \cdot \left(\frac{D}{2}\right) \cdot 1000}{S_t \cdot E - 0,6 \cdot P_D} + CA \quad [15]$$

Donde:

- D : Diámetro recipiente (m)
- P_D : Presión diseño (bar)
- S_t : 1055 (CS P y T moderada)
- E : 0,85
- CA : Sobreespesor de corrosión (3 mm)

Seguidamente, se calcula el peso del equipo:

$$W (Tm) = 0,0246 \cdot D \cdot [L + 0,8 \cdot D] \cdot [e + x] \quad [16]$$

Donde:

- L : Longitud o altura del recipiente (m)
- D : Diámetro del equipo (m)
- he : Espesor del equipo
- X : Factor de complejidad (2)

Conociendo el espesor y el peso, se halla el coste del equipo:

$$Coste (\text{€})_{2008} = 13014 \cdot W^{0,92} \cdot \left(\frac{L}{D}\right)^{-0,15} \cdot \left(\frac{e}{8}\right)^{-0,21} \quad [17]$$

Para 2023:

$$Coste (\text{€})_{2023} = Coste (\text{€})_{2008} \cdot \frac{IPRI (2023)}{IPRI (2008)} \quad [18]$$

Por otra parte, se calculará el HLL, LLL y NLL. El high liquid level (HLL) representa el nivel alto del líquido en la columna y corresponde a la altura cuando este se encuentra al 80% del nivel máximo. El HLL depende del caudal de residuo que sale de la columna y del tiempo de residencia, el cual se ha establecido en 5 minutos (Valor normal de operación) A esta relación se le denomina volumen del líquido de la columna (VHLL) y se calcula del siguiente modo:

$$VHLL = V \cdot t_R \quad [19]$$

El HLL no es más que la fracción del volumen obtenido entre el área de la columna:

$$HLL = \frac{VHLL}{\frac{\pi}{4} \cdot D^2} \quad [20]$$

El normal liquid level (NLL) corresponde al nivel normal del líquido en la columna y representa a este cuando está al 50% del nivel máximo. Por ello, la relación para el cálculo se obtiene a partir del HLL quedando de la siguiente manera:

$$NLL = HLL \cdot \frac{0,5}{0,8} \quad [21]$$

Por último, se calcula el low liquid level (LLL) representa al nivel bajo del líquido, es decir, cuando está al 20% del nivel. Como ha ocurrido con el NLL, se relaciona con el HLL de la siguiente manera:

$$LLL = HLL \cdot \frac{0,2}{0,8} \quad [22]$$

Se muestra un ejemplo del cálculo realizado para una relación **L/D=1,5**

Lo primero es necesario conocer la longitud y el diámetro del reactor. Para ello, se establece la relación L/D=3 y se calcula el diámetro mediante la siguiente ecuación:

$$D = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_{geometrico}}{1,5 \cdot \pi}} \quad [23]$$

$$D = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 360,75}{1,5 \cdot \pi}} = 6,74 \text{ m}$$

Con la relación $L = D \cdot 1,5$

$$L = 6,74 \cdot 1,5 = 10,11 \text{ m}$$

Con estos datos calculados, se calcula el espesor del equipo [15]:

$$e \text{ (mm)} = \frac{10,97 \cdot \left(\frac{6,74}{2}\right) \cdot 1000}{1055 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 10,97} + 3 = 44,54 \text{ mm}$$

Con el valor de espesor, se calcula el peso del reactor [16]:

$$W(\text{Tm}) = 0,0246 \cdot 5,35 \cdot [16,05 + 0,8 \cdot 5,35] \cdot [35,97 + 2] = 119,67 \text{ tm}$$

Por último, se calcula el coste del equipo mediante la formula mencionada anteriormente [17]:

$$\text{Coste (€)2008} = 13014 \cdot 119,67^{0,92} \cdot (1,5)^{-0,15} \cdot \left(\frac{44,54}{8}\right)^{-0,21} = 696.863,12 \text{ (€)}$$

Para 2023 [18]:

$$\text{Coste (€)2023} = 696863,12 \cdot \frac{154,62}{95,59} = 1.127.199,24 \text{ (€)}$$

Para el cálculo del HLL [20]:

$$HLL = \frac{380,75 \left(\frac{m^3}{hr}\right) \cdot 0,0833 \text{ (h)}}{\frac{\pi}{4} \cdot 6,74^2 \text{ (m}^2\text{)}} = 1,68 \text{ m}$$

El normal liquid level (NLL) será [21]:

$$NLL = 1,68 \cdot \frac{0,5}{0,8} = 1,05 \text{ m}$$

Por último, se calcula el low liquid level (LLL) [22]

$$LLL = 1,68 \cdot \frac{0,2}{0,8} = 0,42 \text{ m}$$

A continuación, se muestran los datos obtenidos para la relación L/D:

Tabla 25. Valores obtenidos para las L/D estudiadas del reactor

L/D	D (m)	L (m)	e (mm)	W TM	Coste 2008	Coste 2023
1,5	6,74	10,11	44,54	119,67	696.863,12 €	1.127.199,24 €
1,6	6,60	10,56	43,65	117,34	680.647,72 €	1.100.970,29 €
1,7	6,47	10,99	42,84	115,30	666.297,73 €	1.077.758,71 €
1,8	6,34	11,42	42,09	113,49	653.504,69 €	1.057.065,55 €
1,9	6,23	11,84	41,39	111,88	642.024,84 €	1.038.496,50 €
2	6,12	12,25	40,74	110,44	631.662,96 €	1.021.735,82 €
2,1	6,03	12,65	40,13	109,15	622.260,87 €	1.006.527,62 €
2,2	5,93	13,05	39,56	107,98	613.689,01 €	992.662,35 €
2,3	5,85	13,45	39,02	106,92	605.840,24 €	979.966,71 €
2,4	5,76	13,83	38,52	105,95	598.625,20 €	968.296,15 €
2,5	5,69	14,21	38,04	105,07	591.968,75 €	957.529,11 €
2,6	5,61	14,59	37,58	104,26	585.807,22 €	947.562,64 €
2,7	5,54	14,96	37,15	103,52	580.086,35 €	938.308,94 €
2,8	5,48	15,33	36,74	102,84	574.759,56 €	929.692,68 €
2,9	5,41	15,69	36,34	102,20	569.786,65 €	921.648,84 €
3	5,35	16,05	35,97	101,62	565.132,77 €	914.121,02 €
3,1	5,29	16,41	35,61	101,07	560.767,50 €	907.060,06 €
3,2	5,24	16,76	35,27	100,57	556.664,23 €	900.422,87 €
3,3	5,18	17,10	34,94	100,09	552.799,51 €	894.171,57 €
3,4	5,13	17,45	34,62	99,66	549.152,66 €	888.272,67 €
3,5	5,08	17,79	34,32	99,24	545.705,34 €	882.696,51 €
3,6	5,04	18,13	34,03	98,86	542.441,20 €	877.416,66 €
3,7	4,99	18,46	33,74	98,50	539.345,69 €	872.409,56 €
3,8	4,95	18,79	33,47	98,16	536.405,73 €	867.654,08 €
3,9	4,90	19,12	33,21	97,84	533.609,60 €	863.131,25 €
4	4,86	19,45	32,95	97,54	530.946,72 €	858.823,96 €
4,1	4,82	19,77	32,71	97,26	528.407,56 €	854.716,78 €
4,2	4,78	20,09	32,47	97,00	525.983,45 €	850.795,71 €
4,3	4,75	20,41	32,24	96,75	523.666,56 €	847.048,05 €
4,4	4,71	20,72	32,02	96,51	521.449,72 €	843.462,24 €
4,5	4,67	21,03	31,80	96,29	519.326,42 €	840.027,74 €
4,6	4,64	21,34	31,59	96,07	517.290,71 €	836.734,90 €
4,7	4,61	21,65	31,39	95,87	515.337,12 €	833.574,91 €
4,8	4,57	21,96	31,19	95,68	513.460,65 €	830.539,65 €
4,9	4,54	22,26	31,00	95,50	511.656,68 €	827.621,68 €
5	4,51	22,56	30,81	95,33	509.920,99 €	824.814,14 €

Tabla 26. Valores obtenidos para las L/D estudiadas del reactor

L/D	D(m)	L(m)	VHLL	HLL	NLL	LLL	
1,5	6,74	10,11	60,10	60,10	1,68	1,05	0,42
1,6	6,60	10,56	60,10	60,10	1,76	1,10	0,44
1,7	6,47	10,99	60,10	60,10	1,83	1,14	0,46
1,8	6,34	11,42	60,10	60,10	1,90	1,19	0,48
1,9	6,23	11,84	60,10	60,10	1,97	1,23	0,49
2	6,12	12,25	60,10	60,10	2,04	1,28	0,51
2,1	6,03	12,65	60,10	60,10	2,11	1,32	0,53
2,2	5,93	13,05	60,10	60,10	2,17	1,36	0,54
2,3	5,85	13,45	60,10	60,10	2,24	1,40	0,56
2,4	5,76	13,83	60,10	60,10	2,30	1,44	0,58
2,5	5,69	14,21	60,10	60,10	2,37	1,48	0,59
2,6	5,61	14,59	60,10	60,10	2,43	1,52	0,61
2,7	5,54	14,96	60,10	60,10	2,49	1,56	0,62
2,8	5,48	15,33	60,10	60,10	2,55	1,60	0,64
2,9	5,41	15,69	60,10	60,10	2,61	1,63	0,65
3	5,35	16,05	60,10	60,10	2,67	1,67	0,67
3,1	5,29	16,41	60,10	60,10	2,73	1,71	0,68
3,2	5,24	16,76	60,10	60,10	2,79	1,74	0,70
3,3	5,18	17,10	60,10	60,10	2,85	1,78	0,71
3,4	5,13	17,45	60,10	60,10	2,91	1,82	0,73
3,5	5,08	17,79	60,10	60,10	2,96	1,85	0,74
3,6	5,04	18,13	60,10	60,10	3,02	1,89	0,75
3,7	4,99	18,46	60,10	60,10	3,08	1,92	0,77
3,8	4,95	18,79	60,10	60,10	3,13	1,96	0,78
3,9	4,90	19,12	60,10	60,10	3,19	1,99	0,80
4	4,86	19,45	60,10	60,10	3,24	2,02	0,81
4,1	4,82	19,77	60,10	60,10	3,29	2,06	0,82
4,2	4,78	20,09	60,10	60,10	3,35	2,09	0,84
4,3	4,75	20,41	60,10	60,10	3,40	2,12	0,85
4,4	4,71	20,72	60,10	60,10	3,45	2,16	0,86
4,5	4,67	21,03	60,10	60,10	3,50	2,19	0,88
4,6	4,64	21,34	60,10	60,10	3,56	2,22	0,89
4,7	4,61	21,65	60,10	60,10	3,61	2,25	0,90
4,8	4,57	21,96	60,10	60,10	3,66	2,29	0,91
4,9	4,54	22,26	60,10	60,10	3,71	2,32	0,93
5	4,51	22,56	60,10	60,10	3,76	2,35	0,94

3.2 COLUMNA D101

Para establecer los valores de presión, se ha introducido diferentes valores de presión en la herramienta de Aspen Plus y se ha visto la separación:

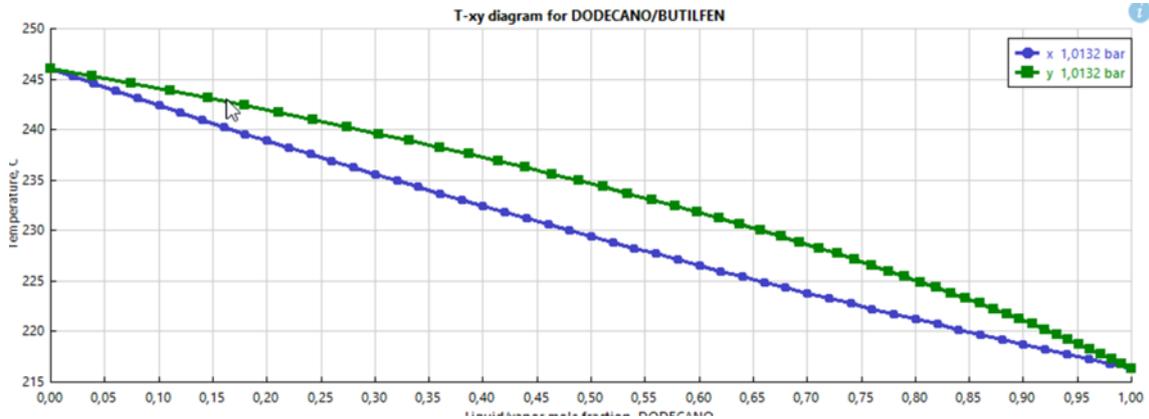


Figura 13. Diagrama T-xy del dodecano y butilfenol a 1 bar

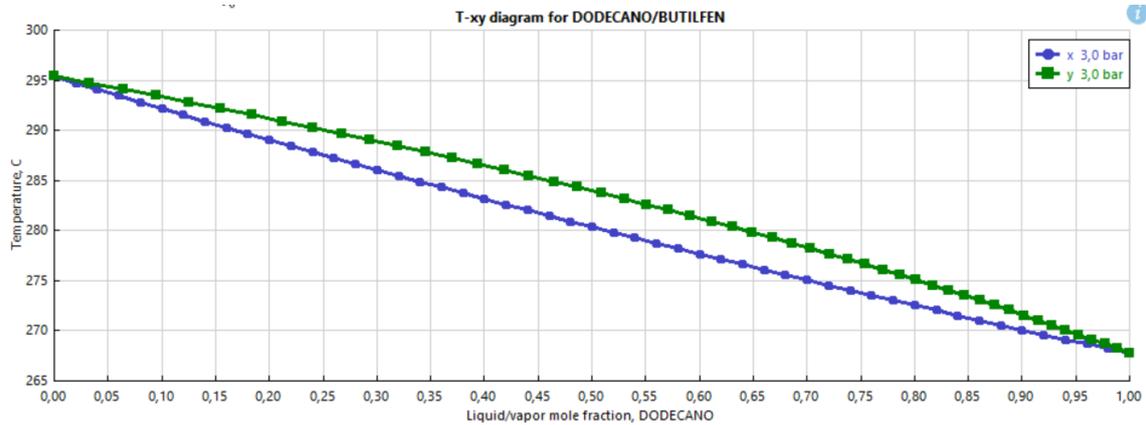


Figura 14. Diagrama T-xy del dodecano y butilfenol a 3 bar

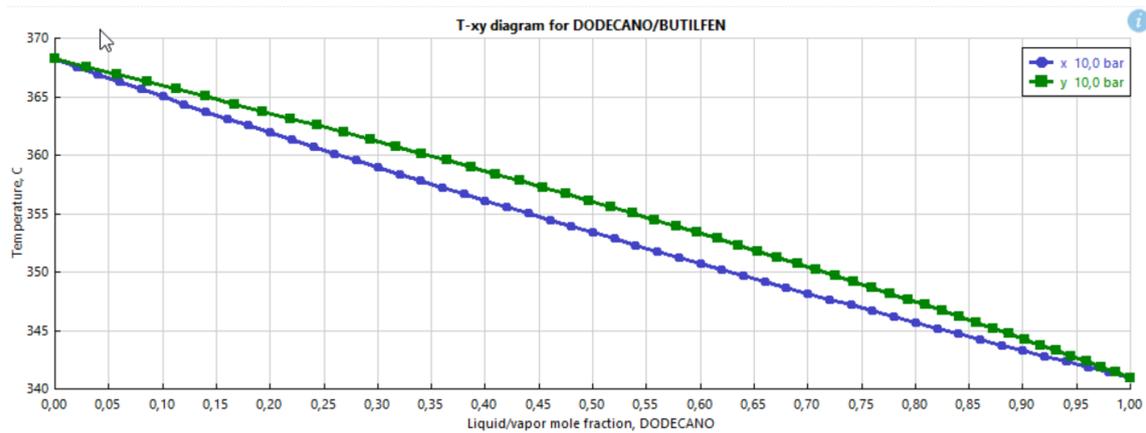


Figura 15. Diagrama T-xy del dodecano y butilfenol a 5 bar

- DIMENSIONAMIENTO DE LA COLUMNA D-101

Para el cálculo del dimensionamiento del reactor, se emplean las mismas ecuaciones que en dimensionamiento del reactor. Se ha fijado una presión de diseño de $3,5 \text{ kg/cm}^2$ para asegurar la seguridad del equipo, aunque se trabaje a una presión de 1 bar, equivalente a $1,097 \text{ kg/cm}^2$

Se ha realizado el cálculo para 28 etapas teóricas, ya que es la columna obtenida más rentable económicamente.

El tiempo de residencia en este caso es de 5 minutos. De este modo se calcula el HLL [20]:

$$HLL = \frac{0,701 \left(\frac{m^3}{hr} \right) \cdot 0,0833 (h)}{\frac{\pi}{4} \cdot 1,33^2 (m^2)} = 0,059 m$$

El normal liquid level (NLL) se calcula mediante la ecuación [21]:

$$NLL = 0,11 \cdot \frac{0,5}{0,8} = 0,036 m$$

Por último, se calcula el low liquid level (LLL) [22]:

$$LLL = 0,11 \cdot \frac{0,2}{0,8} = 0,014 m$$

Con estos datos, se calcula la altura de la columna de destilación:

$$Altura = 0,91 \cdot 3 + 0,46 \cdot (N - 2) + HLL \quad [24]$$

Donde:

- N: Número de etapas teóricas

Con todos los datos obtenidos, se realiza el cálculo de la altura:

$$Altura = 0,91 \cdot 3 + 0,46 \cdot (28 - 2) + 0,059 = 15,66 m$$

Con estos datos calculados, se calcula el espesor del equipo [15]:

$$e \text{ (mm)} = \frac{3,5 \cdot \left(\frac{1,59}{2}\right) \cdot 1000}{1055 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 3,5} + 3 = 6,107 \text{ mm}$$

Con el valor de espesor, se calcula el peso del reactor [16]:

$$W \text{ (Tm)} = 0,0246 \cdot 1,59 \cdot [15,66 + 0,8 \cdot 1,59] \cdot [6,107 + 2] = 5,394 \text{ tm}$$

Por último, se calcula el coste del equipo con la misma fórmula que en caso del reactor [], con la diferencia que se va a tener en cuenta el número de platos, así como el coste de cada plato, fijado en 6000 euros:

$$\text{Coste (€)2008} = 13014 \cdot 5,394^{0,92} \cdot \left(\frac{15,66}{1,33}\right)^{-0,15} \cdot \left(\frac{6,107}{8}\right)^{-0,21} + (28 \cdot 6000) = 214.088 \text{ (€)}$$

Para 2023 [18]:

$$\text{Coste (€)2023} = 214088 \cdot \frac{154,62}{95,59} = 346.475,6 \text{ (€)}$$

Para hallar los costes del condensador y del reboiler de la columna, así como el coste del agua de refrigeración y vapor de agua utilizados, se emplearán las siguientes ecuaciones

- **Para el condensador**

Variación de temperatura media logarítmica

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_1' - T_2'') - (T_2' - T_1'')}{\ln\left(\frac{T_1' - T_2''}{T_2' - T_1''}\right)} \quad [25]$$

Donde:

- T_1' = Temperatura de entrada del fluido caliente. Mezcla de compuestos (°C)
- T_2' = Temperatura de salida del fluido caliente. Mezcla de compuestos (°C)
- T_1'' = Temperatura de entrada de fluido frío. Agua de refrigeración (°C)
- T_2'' = Temperatura de salida de fluido frío. Agua de refrigeración (°C)

Estos datos han sido proporcionados a través de la herramienta de Aspen Plus. Se calcula la ΔT_{ml} :

$$\Delta T_{ml} = \frac{(212,45 - 42) - (201,7 - 26)}{\ln\left(\frac{212,45 - 42}{201,7 - 26}\right)} = 173,06 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Factor de corrección

Para el cálculo de este factor será necesario calcular los parámetros R y P a partir de las siguientes ecuaciones:

$$R = \frac{T'_1 - T'_2}{T''_2 - T''_1} \quad [26]$$

$$P = \frac{T''_2 - T''_1}{T'_1 - T''_1} \quad [27]$$

De esta fórmula y sabiendo las temperaturas de entrada y salida del agua de refrigeración y corriente de los compuestos se obtienen estos parámetros.

$$R = \frac{212,45 - 201,7}{42 - 26} = 0,67$$

$$P = \frac{42 - 26}{212,45 - 26} = 0,085$$

Para el cálculo de Ft, es necesario utilizar una gráfica y los parámetros P y R. A continuación, se muestra la gráfica:

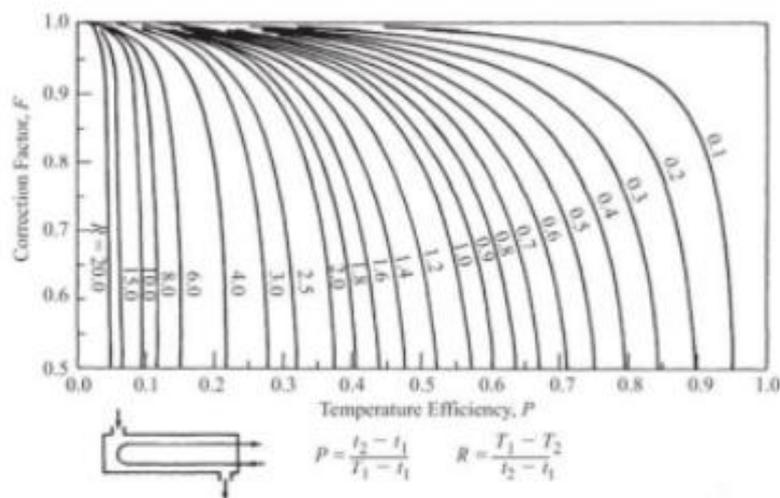


Figura 16. Tabla de valores de R y P para la obtención del factor de corrección

Con estos parámetros y la tabla se obtiene el valor de Ft de 0,98

Para poder calcular el área del condensador, es necesario obtener el coeficiente global de transmisión de calor,

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h'} + \frac{1}{h''} + \frac{e}{k} + R' + R''} \quad [28]$$

Donde:

- h' = Coeficiente individual de transmisión de calor del fluido caliente $\left(\frac{kcal}{h \cdot m^2 \cdot ^\circ C}\right)$
- h'' = Coeficiente individual de transmisión de calor del fluido caliente $\left(\frac{kcal}{h \cdot m^2 \cdot ^\circ C}\right)$
- e = Espesor del acero (m)
- k = Conductividad del acero $\left(\frac{kcal}{h \cdot m \cdot ^\circ C}\right) = 52,02 \frac{kcal}{h \cdot m \cdot ^\circ C}$
- R' = Factor de ensuciamiento del fluido caliente = 0,000352
- R'' = Factor de ensuciamiento del fluido frío = 0,0004

Los datos de espesor del acero, conductividad del acero y ambos ensuciamientos se han buscado bibliográficamente:

- $e = 0,00165$ m
- $k = 52,02 \frac{kcal}{h \cdot m \cdot ^\circ C}$
- $R' = 0,000352$
- $R'' = 0,0004$

Con estos datos, se obtiene el coeficiente global de transmisión de calor :

$$U = \frac{1}{\frac{1}{669767,44} + \frac{1}{8000} + \frac{0,00165}{52,02} + 0,000352 + 0,004} = 1098,64 \frac{kcal}{h \cdot m^2 \cdot ^\circ C}$$

Caudal de calor

El caudal de calor es un dato proporcionado por Aspen (kcal/h)

Finalmente, con todos los parámetros obtenidos se calcula el área del condensador:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ml} \cdot Ft \quad [29]$$

Se despeja el área y se obtiene el valor:

$$A = \frac{7200000 \frac{\text{kcal}}{\text{h}}}{1098,64 \frac{\text{kcal}}{\text{h} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}} \cdot 173,06 ^\circ\text{C} \cdot 0,98} = 38,64 \text{ m}^2$$

Una vez se ha obtenido el are del cambiador, atendiendo a los criterios de diseño, es necesario sobredimensionar el condensador el equipo un 110%

$$A_{\text{Sobredimensionada}} = A \cdot 1,1 = 38,64 \cdot 1,1 = 42,5 \text{ m}^2$$

Costes fijos cambiador

Cuando el área es inferior a 250 m²

$$\text{Costes (2008)} = 8500 + 1560 \cdot A_{\text{Sobredimensionada}}^{0,75} \quad [30]$$

Se calcula:

$$\text{Costes (2008)} = 8500 + 1560 \cdot 42,5^{0,75} = 34.468,98 \text{ €}$$

Se actualiza el valor para el año 2023:

$$\text{Costes (2023)} = 34468,98 \cdot \frac{154,62}{95,59} = 55.754,72 \text{ €}$$

Coste agua refrigeración

Una vez conocidas las temperaturas, para calcular la cantidad de agua de refrigeración usada y el coste que supone el uso de este servicio auxiliar:

$$Q = m' \cdot Cp' \cdot \Delta T' = m'' \cdot Cp'' \cdot \Delta T'' \quad [31]$$

El primer término de la igualdad hace referencia al calor necesario en el sistema para que se el intercambio de calor entre ambas corrientes. El segundo termino hace referencia al fluido frio y el tercer termino hacer referencia al fluido caliente. En este caso el fluido frio corresponde al agua de refrigeración, por lo que la ecuación quedaría de la siguiente forma:

$$m'' = \frac{m' \cdot Cp' \cdot \Delta T'}{Cp'' \cdot \Delta T''} \quad [32]$$

En cuanto a las Cp , en el caso del fluido frío se ha buscado bibliográficamente el valor del agua. En el caso del fluido caliente, se ha hecho una media entre las capacidades caloríficas de los compuestos que forman la corriente. Estos datos también han sido obtenidos bibliográficamente, por lo tanto:

$$m'' = \frac{33075,5 \frac{kg}{h} \cdot 1,915 \frac{J}{g \cdot ^\circ C} \cdot (42 - 26) ^\circ C}{4,18 \frac{J}{g \cdot ^\circ C} \cdot (212,45 - 201,7) ^\circ C} = 16730,22 \frac{kg}{h}$$

Para hallar el coste del agua de refrigeración utilizado en la columna D-101:

$$Coste = 16730,22 \frac{kg}{h} \cdot 8000 h \cdot \frac{1 m^3}{1000 kg} \cdot 0,03 \frac{\text{€}}{m^3} = 4015,25 \text{ €}$$

Estos se realizarán para todos los servicios auxiliares del proceso

- **Caldera**

En el caso de la caldera, la manera de obtener el área y su coste es parecido que el condensador. Sera necesario su estudio con el fin de conocer los valores óptimos

Para ΔT_{ml} [25]:

$$\Delta T_{ml} = \frac{(290 - 280,92) - (286,5 - 280,22)}{\ln\left(\frac{290 - 280,92}{286,5 - 280,22}\right)} = 7,59 ^\circ C$$

Para el cálculo de este factor será necesario calcular los parámetros R y P [26] [27]:

$$R = \frac{290 - 286,5}{280,92 - 280,22} = 5$$

$$P = \frac{280,92 - 280,22}{290 - 280,22} = 0,071$$

Para el cálculo de F_t , es necesario utilizar una gráfica y los parámetros P y R (gráfica 14). El valor de F_t es igual a 0,98

Para poder calcular el área del condensador, es necesario obtener el coeficiente global de transmisión de calor [28]

$$U = 801,38 \frac{kcal}{h \cdot m^2 \cdot ^\circ C}$$

Finalmente, con todos los parámetros obtenidos se calcula el área del condensador [29]:

$$A = \frac{720000 \frac{kcal}{h}}{801,38 \frac{kcal}{h \cdot m^2 \cdot ^\circ C} \cdot 7,59 ^\circ C \cdot 0,98} = 116,40 m^2$$

Una vez se ha obtenido el área del cambiador, atendiendo a los criterios de diseño, es necesario sobredimensionar el condensador el equipo un 110%

$$A_{Sobredimensionada} = A \cdot 1,1 = 128,04 m^2$$

Costes fijos caldera

Cuando el área es inferior a $250 m^2$ [30]:

$$Costes (2008) = 8500 + 1560 \cdot 128,04^{0,75} = 67.882 \text{ €}$$

Se actualiza el valor para el año 2023:

$$Costes (2023) = 58107,69 \cdot \frac{154,62}{95,59} = 109.801,4 \text{ €}$$

Coste vapor de agua

Al igual que en el cálculo de cantidad de agua de refrigeración, se utilizan las mismas ecuaciones para obtener dicha cantidad:

$$Q = m' \cdot Cp' \cdot \Delta T' = m'' \cdot Cp'' \cdot \Delta T'' \quad [31]$$

El primer término de la igualdad hace referencia al calor necesario en el sistema para que se el intercambio de calor entre ambas corrientes. El segundo termino hace referencia al fluido frío, que en este caso es la corriente que sale por el fondo de la columna y el tercer termino hacer referencia al fluido caliente, siendo este el vapor de agua. En este caso el fluido frío corresponde al agua de refrigeración, por lo que la ecuación quedaría de la siguiente forma:

$$m' = \frac{m'' \cdot Cp'' \cdot \Delta T''}{Cp' \cdot \Delta T'} \quad [32]$$

En cuanto a las Cp , en el caso del fluido frío se ha buscado bibliográficamente el valor de los Cp de cada uno de los compuestos y se ha establecido una media entre el valor del Cp y su composición. En el caso del fluido caliente, se ha fijado al vapor de agua con un valor de $1,996 \frac{J}{g \cdot ^\circ C}$, por lo tanto:

$$m' = \frac{649,19 \frac{kg}{h} \cdot 2,875 \frac{J}{g \cdot ^\circ C} \cdot (280,92 - 280,22) ^\circ C}{1,996 \frac{J}{g \cdot ^\circ C} \cdot (290 - 286,5) ^\circ C} = 925,29 \frac{kg}{h}$$

Para hallar el coste del agua de refrigeración utilizado en la columna D-101 se fija el vapor de media presión:

$$Coste = 925,29 \frac{kg}{h} \cdot 8000 h \cdot \frac{1 m^3}{730 kg} \cdot 6,5 \frac{\text{€}}{m^3} = 65.932,96 \text{ €}$$

3.3 DEPOSITO

Para poder calcular el dimensionamiento del depósito regulador de condensado, hay que establecer el tiempo de residencia del mismo. En este caso, se va a utilizar un depósito con forma cilíndrica horizontal. Estos depósitos trabajan bajo las siguientes condiciones:

- El volumen útil corresponde el 50% del volumen geométrico
- Tiempos de residencia de entre 10-20 minutos
- Relación longitud diámetro (L/D) entre 2-5

Para este depósito, se va a establecer un tiempo de residencia de 10 minutos. En cuanto a la relación L/D, se tendrá que estudiar los diferentes valores para determinar cuál es el de menor coste

En primer lugar, para cada número de etapas teóricas, se conoce el caudal de destilado que sale por cabeza de columna y que, tras pasar por el condensador, es el que se lleva en el depósito. De este modo, se puede calcular el volumen útil del depósito y el volumen geométrico como el doble del volumen útil.

A continuación, se muestran las fórmulas de desarrollo.

$$V_{\text{útil}} = Q_{\text{condensado}} \cdot t_{\text{residencia}} \quad [33]$$

$$V_{\text{geométrico}} = 2 \cdot V_{\text{útil}} \quad [34]$$

Se realizan los cálculos para 28 etapas teóricas y con un tiempo de residencia de 10 minutos:

$$V_{\text{útil}} = 38,34 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \cdot \frac{1 \text{ h}}{60 \text{ min}} \cdot 10 \text{ min} = 6,39 \text{ m}^3$$

$$V_{\text{geométrico}} = 2 \cdot 6,39 \text{ m}^3 = 12,78 \text{ m}^3$$

A continuación, con el volumen geométrico es necesario obtener la longitud y el diámetro del depósito. Para ello se emplearán la ecuación [23] y se realiza con $L/D=5$

$$D = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 12,78}{5 \cdot \pi}} = 1,48 \text{ m}$$

Con la relación $L = D \cdot 5$

$$L = 1,48 \cdot 5 = 7,41 \text{ m}$$

Tras calcular esto, es necesario calcular el espesor a partir de la ecuación [15], pero antes es necesario obtener la presión de diseño con la que va a trabajar el depósito. Para ello, hay que seleccionar que es más restrictivo, sumarle a la presión de operación 1,8 o multiplicarlo por el 120%

$$P_{\text{diseño (A)}} = 1,07 + 1,8 = 2,87 \text{ kg/cm}^2 \cdot g$$

$$P_{\text{diseño (B)}} = 1,07 * 1,2 = 1,28 \text{ kg/cm}^2 \cdot g$$

Por lo tanto, para una presión de operación de $1,07 \text{ kg/cm}^2 \text{ g}$, se tiene una presión de diseño de $2,87 \text{ kg/cm}^2 \text{ g}$, ya que este valor es más restrictivo. Debido a motivos de seguridad, ya que se tiene un valor por debajo de $3,5 \text{ kg/cm}^2 \cdot g$, se fijará este como el valor de presión de operación .

Obtenido la presión de diseño, se procede a calcular el valor del espesor, teniendo en cuenta el sobreespesor por corrosión de 3 mm:

$$e \text{ (mm)} = \frac{3,5 \cdot \left(\frac{1,48}{2}\right) \cdot 1000}{1055 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 3,5} + 3 = 5,9 \text{ mm}$$

Con el valor de espesor, se calcula el peso del reactor [16]:

$$W(Tm) = 0,0246 \cdot 1,48 \cdot [7,41 + 0,8 \cdot 1,48] \cdot [5,9 + 2] = 2,48 \text{ tm}$$

Por último, se calcula el coste del equipo mediante la formula [17]:

$$\text{Coste } (\text{€})_{2008} = 13014 \cdot 2,31^{0,92} \cdot (5)^{-0,15} \cdot \left(\frac{5,9}{8}\right)^{-0,21} = 25.097,27 \text{ (€)}$$

Para 2023 [18]:

$$\text{Coste } (\text{€})_{2023} = 25097,27 \cdot \frac{154,62}{95,59} = 40.595,97 \text{ (€)}$$

Tabla 27. Valores obtenidos para las L/D estudiadas del depósito

L/D	VOLUMEN UTIL	V GEOMETRICO	FORMULA D	Diametro	Longitud	P diseño A (kg/cm2)	e (mm)	W [™]	Coste 2008	COSTE 2022
2	6,391	12,782	8,141	2,012	4,023	3,5	6,94	2,49	27982,83	45263,16
2,1	6,391	12,782	7,753	1,979	4,156	3,5	6,87	2,48	27715,83	44831,27
2,2	6,391	12,782	7,401	1,949	4,287	3,5	6,81	2,47	27476,00	44443,34
2,3	6,391	12,782	7,079	1,920	4,416	3,5	6,76	2,46	27259,75	44093,55
2,4	6,391	12,782	6,784	1,893	4,543	3,5	6,70	2,46	27064,10	43777,08
2,5	6,391	12,782	6,513	1,867	4,669	3,5	6,65	2,45	26886,53	43489,85
2,6	6,391	12,782	6,262	1,843	4,792	3,5	6,61	2,45	26724,91	43228,43
2,7	6,391	12,782	6,030	1,820	4,915	3,5	6,56	2,44	26577,44	42989,89
2,8	6,391	12,782	5,815	1,798	5,035	3,5	6,52	2,44	26442,56	42771,71
2,9	6,391	12,782	5,615	1,777	5,154	3,5	6,48	2,44	26318,93	42571,75
3	6,391	12,782	5,427	1,757	5,272	3,5	6,44	2,44	26205,41	42388,12
3,1	6,391	12,782	5,252	1,738	5,389	3,5	6,40	2,44	26100,98	42219,20
3,2	6,391	12,782	5,088	1,720	5,504	3,5	6,36	2,43	26004,76	42063,56
3,3	6,391	12,782	4,934	1,702	5,618	3,5	6,33	2,44	25915,98	41919,95
3,4	6,391	12,782	4,789	1,686	5,731	3,5	6,30	2,44	25833,95	41787,27
3,5	6,391	12,782	4,652	1,669	5,843	3,5	6,27	2,44	25758,07	41664,54
3,6	6,391	12,782	4,523	1,654	5,954	3,5	6,23	2,44	25687,82	41550,90
3,7	6,391	12,782	4,401	1,639	6,063	3,5	6,21	2,44	25622,70	41445,57
3,8	6,391	12,782	4,285	1,624	6,172	3,5	6,18	2,44	25562,30	41347,87
3,9	6,391	12,782	4,175	1,610	6,280	3,5	6,15	2,44	25506,23	41257,17
4	6,391	12,782	4,071	1,597	6,387	3,5	6,12	2,45	25454,15	41172,94
4,1	6,391	12,782	3,971	1,584	6,493	3,5	6,10	2,45	25405,75	41094,65
4,2	6,391	12,782	3,877	1,571	6,598	3,5	6,07	2,45	25360,76	41021,87
4,3	6,391	12,782	3,787	1,559	6,702	3,5	6,05	2,45	25318,91	40954,18
4,4	6,391	12,782	3,701	1,547	6,806	3,5	6,03	2,46	25279,99	40891,22
4,5	6,391	12,782	3,618	1,535	6,908	3,5	6,00	2,46	25243,77	40832,64
4,6	6,391	12,782	3,540	1,524	7,010	3,5	5,98	2,46	25210,08	40778,14
4,7	6,391	12,782	3,464	1,513	7,112	3,5	5,96	2,47	25178,73	40727,44
4,8	6,391	12,782	3,392	1,503	7,212	3,5	5,94	2,47	25149,58	40680,28
4,9	6,391	12,782	3,323	1,492	7,312	3,5	5,92	2,47	25122,47	40636,43
5	6,391	12,782	3,256	1,482	7,411	3,5	5,90	2,48	25097,27	40595,67

La relación óptima es 5, siendo la opción más rentable desde el punto de vista económico por lo que se escoge ese valor para el cálculo del coste de los equipos.

3.4 MEZCLADOR

En el caso del mezclador, se produce una mezcla entre la corriente que sale de la cabeza de la columna D-101 y la corriente de alimentación del proceso. En este caso, el caudal de alimento será aquel que se introduce al reactor. Se utilizan las mismas ecuaciones utilizadas que en el depósito de la columna D101. Se calcula primero el volumen geométrico, en el que se fija un tiempo de residencia de 10 minutos [33]:

$$V_{\text{útil}} = 39,266 \frac{m^3}{h} \cdot \frac{1 h}{60 \text{ min}} \cdot 10 \text{ min} = 6,54 m^3$$

Con el volumen útil, se calcula el volumen geométrico [34]:

$$V_{\text{geométrico}} = 2 \cdot 6,54 m^3 = 13,08 m^3$$

Una vez conocido el volumen geométrico del equipo, se procede al cálculo del dimensionamiento del equipo. Para ello se establece una relación L/D de 2 a 5. Conocida dicha relación y el volumen del equipo, se puede calcular el diámetro y la longitud del equipo para cada una de las relaciones.

Se realizan los cálculos para 28 etapas teóricas. Con el volumen geométrico es necesario obtener la longitud y el diámetro del depósito. Para ello se emplearán la ecuación [23] y se realiza el ejemplo con L/D=5

$$D = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 13,08 m^3}{5 \cdot \pi}} = 1,494 m$$

Por lo tanto, la longitud será:

$$\text{Longitud} = 5 \cdot 1,494 m = 7,468 m$$

En este caso, la presión de diseño se ha fijado con un valor de $3,5 \text{ kg/cm}^2$. Una vez fijado este valor, se calcula el espesor mediante la ecuación [15]:

$$e (mm) = \frac{3,5 \cdot \left(\frac{1,494}{2}\right) \cdot 1000}{1055 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 3,5} + 3 = 5,922 mm$$

Con el valor de espesor, se calcula el peso del reactor [16]:

$$W (Tm) = 0,0246 \cdot 1,494 \cdot [7,468 + 0,8 \cdot 1,494] \cdot [5,992 + 2] = 2,522 tm$$

Por último, se calcula el coste del equipo con la misma fórmula que en caso del reactor [17]:

$$\text{Coste (€)2008} = 13014 \cdot 2,522^{0,92} \cdot \left(\frac{7,468}{1,494}\right)^{-0,15} \cdot \left(\frac{5,922}{8}\right)^{-0,21} = 25.501,15(\text{€})$$

Para 2023 [18]:

$$\text{Coste (€)2023} = 25501,15 \cdot \frac{154,62}{95,59} = 41.248,96 (\text{€})$$

A continuación, se muestran los valores para los diferentes valores de L/D:

Tabla 28. Valores obtenidos para las L/D estudiadas del mezclador

L/D	VOLUMEN UTIL	V GEOMETRICO	Diametro	Longitud	P diseño A (kg/cm2)	e (mm)	W TM	Coste 2008	COSTE 2022
2	6,540	13,080	2,027	4,054	3,5	6,965	2,538	28444,44	46009,83
2,1	6,540	13,080	1,995	4,189	3,5	6,901	2,526	28172,42	45569,82
2,2	6,540	13,080	1,964	4,320	3,5	6,841	2,516	27928,05	45174,55
2,3	6,540	13,080	1,935	4,450	3,5	6,785	2,508	27707,70	44818,12
2,4	6,540	13,080	1,908	4,578	3,5	6,732	2,501	27508,31	44495,60
2,5	6,540	13,080	1,882	4,705	3,5	6,681	2,496	27327,33	44202,86
2,6	6,540	13,080	1,857	4,829	3,5	6,633	2,491	27162,59	43936,39
2,7	6,540	13,080	1,834	4,952	3,5	6,588	2,488	27012,25	43693,22
2,8	6,540	13,080	1,812	5,074	3,5	6,545	2,485	26874,74	43470,78
2,9	6,540	13,080	1,791	5,194	3,5	6,503	2,483	26748,69	43266,89
3	6,540	13,080	1,771	5,313	3,5	6,464	2,481	26632,91	43079,62
3,1	6,540	13,080	1,752	5,430	3,5	6,426	2,481	26526,40	42907,33
3,2	6,540	13,080	1,733	5,546	3,5	6,390	2,480	26428,25	42748,57
3,3	6,540	13,080	1,716	5,661	3,5	6,356	2,480	26337,67	42602,05
3,4	6,540	13,080	1,699	5,775	3,5	6,323	2,481	26253,97	42466,66
3,5	6,540	13,080	1,682	5,888	3,5	6,291	2,482	26176,53	42341,41
3,6	6,540	13,080	1,667	5,999	3,5	6,260	2,483	26104,82	42225,41
3,7	6,540	13,080	1,651	6,110	3,5	6,230	2,485	26038,34	42117,88
3,8	6,540	13,080	1,637	6,220	3,5	6,202	2,486	25976,66	42018,11
3,9	6,540	13,080	1,623	6,328	3,5	6,174	2,488	25919,40	41925,48
4	6,540	13,080	1,609	6,436	3,5	6,147	2,491	25866,20	41839,43
4,1	6,540	13,080	1,596	6,543	3,5	6,122	2,493	25816,75	41759,44
4,2	6,540	13,080	1,583	6,649	3,5	6,097	2,496	25770,76	41685,06
4,3	6,540	13,080	1,571	6,754	3,5	6,072	2,499	25727,98	41615,86
4,4	6,540	13,080	1,559	6,858	3,5	6,049	2,501	25688,18	41551,48
4,5	6,540	13,080	1,547	6,962	3,5	6,026	2,505	25651,14	41491,57
4,6	6,540	13,080	1,536	7,065	3,5	6,004	2,508	25616,66	41435,81
4,7	6,540	13,080	1,525	7,167	3,5	5,983	2,511	25584,59	41383,92
4,8	6,540	13,080	1,514	7,268	3,5	5,962	2,515	25554,74	41335,63
4,9	6,540	13,080	1,504	7,368	3,5	5,941	2,518	25526,97	41290,72
5	6,540	13,080	1,494	7,468	3,5	5,922	2,522	25501,15	41248,96

3.5 DIMENSIONAMIENTO DE LA COLUMNA D-102

Para el cálculo de la columna se utilizarán las mismas fórmulas que en el caso de la columna D-101. Se muestra un ejemplo para el caso de 42 etapas teóricas, ya que es el resulta la opción más económica. En el caso del dimensionamiento, se han obtenido valores de diámetro menor a 0,9 m, lo que implicaría una inundación de la columna en el caso de establecer ese diámetro. Para poder solventar ese problema, se ha establecido un diámetro de 1 metro, ya que es un diámetro lo suficientemente grande para evitar la inundación de la columna y lo suficientemente pequeño para evitar el goteo de líquido por orificios del plato. Por motivos de seguridad, se sobredimensiona el diámetro, el cual se multiplica por 1,2, teniendo un diámetro de 1,2 m:

A continuación, se muestran los cálculos. Para el cálculo de la columna se utilizarán las mismas fórmulas que en el caso de la columna D-101, empleando un tiempo de residencia de 10 minutos. Se muestra un ejemplo para el caso de 42 etapas teóricas, ya que es el resulta la opción más económica

Para el HLL [20]:

$$HLL = \frac{0,381 \left(\frac{m^3}{hr} \right) \cdot 0,166 (h)}{\frac{\pi}{4} \cdot 1,2^2 (m^2)} = 0,046 m$$

Se calcula normal liquid level (NLL) [21]:

$$NLL = 0,046 \cdot \frac{0,5}{0,8} = 0,029 m$$

Por último, se calcula el low liquid level (LLL) [22]:

$$LLL = 0,046 \cdot \frac{0,2}{0,8} = 0,011 m$$

Con estos datos, se calcula la altura de la columna de destilación:

$$Altura = 0,91 \cdot 3 + 0,46 \cdot (42 - 2) + 0,046 = 23,47 m$$

Para poder obtener el espesor del equipo, es necesario obtener la presión de diseño, para ello, se ha de seleccionar si es más restrictivo sumarle a la presión de operación $1,8 \text{ kg/cm}^2$ o multiplicarlo por el 120%:

$$P_{\text{diseño (A)}} = 5,485 + 1,8 = 7,28 \text{ kg/cm}^2$$

$$P_{\text{diseño (B)}} = 5,485 \cdot 1,2 = 6,58 \text{ kg/cm}^2$$

Por lo que, para la presión de operación de $5,485 \text{ kg/cm}^2$, se tiene una presión de diseño de $7,28 \text{ kg/cm}^2$, ya que este valor es más restrictivo.

Con estos datos calculados, se calcula el espesor del equipo:

$$e \text{ (mm)} = \frac{7,28 \cdot \left(\frac{1,2}{2}\right) \cdot 1000}{1055 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 7,28} + 3 = 7,85 \text{ mm}$$

Con el valor de espesor, se calcula el peso del reactor:

$$W \text{ (Tm)} = 0,0246 \cdot 1,2 \cdot [23,47 + 0,8 \cdot 1,2] \cdot [7,85 + 2] = 7,10 \text{ tm}$$

Por último, se calcula el coste del equipo con la misma fórmula que en caso del reactor [17], con la diferencia que se va a tener en cuenta el número de platos, así como el coste de cada plato, fijado en 6000 euros:

$$\text{Coste (€)2008} = 13014 \cdot 7,10^{0,92} \cdot \left(\frac{23,47}{1,33}\right)^{-0,15} \cdot \left(\frac{7,85}{8}\right)^{-0,21} + (42 \cdot 6000) = 320.805,17 \text{ (€)}$$

Para 2023:

$$\text{Coste (€)2023} = 320805,17 \cdot \frac{154,62}{95,59} = 518.913,01 \text{ (€)}$$

Para hallar los costes del condensador y del reboiler de la columna, así como el coste del agua de refrigeración y vapor de agua utilizados, se emplearán las mismas ecuaciones empleadas que en el caso de la columna D-101. Se muestran los cálculos a continuación

Condensador

Para ΔT_{ml} [25]:

$$\Delta T_{ml} = \frac{(327,61 - 42) - (321,42 - 26)}{\ln\left(\frac{327,61 - 42}{321,42 - 26}\right)} = 290,48 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Para el cálculo de este factor será necesario calcular los parámetros R y P [26] [27]:

$$R = \frac{327,61 - 321,42}{327,61 - 26} = 0,38$$

$$P = \frac{42 - 26}{327,61 - 26} = 0,053$$

Para el cálculo de Ft, es necesario utilizar una gráfica y los parámetros P y R (gráfica 14). El valor de Ft es igual a 0,99

Para poder calcular el área del condensador, es necesario obtener el coeficiente global de transmisión de calor [28]

$$U = 1079,59 \frac{\text{kcal}}{\text{h} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}}$$

Finalmente, con todos los parámetros obtenidos se calcula el área del condensador:

$$A = \frac{352681,2 \frac{\text{kcal}}{\text{h}}}{1079,59 \frac{\text{kcal}}{\text{h} \cdot \text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}} \cdot 290,48 \text{ } ^\circ\text{C} \cdot 0,99} = 1,13 \text{ m}^2$$

Una vez se ha obtenido el área del cambiador, atendiendo a los criterios de diseño, es necesario sobredimensionar el condensador el equipo un 110%

$$A_{\text{Sobredimensionada}} = A \cdot 1,1 = 1,24 \text{ m}^2$$

Costes fijos condensador

Cuando el área es inferior a 250 m^2 [30]:

$$\text{Costes (2008)} = 8500 + 1560 \cdot 1,24^{0,75} = 10.343,68, \text{ €}$$

Se actualiza el valor para el año 2023:

$$\text{Costes (2023)} = 10.343,68 \cdot \frac{154,62}{95,59} = 16.731,25 \text{ €}$$

Coste agua de refrigeración

Al igual que en el caso de la columna D101, se calcula la cantidad de agua de refrigeración necesario para conseguir disminuir la temperatura de la corriente dentro de los valores establecidos.

En cuanto a las C_p , en el caso del fluido caliente se ha buscado bibliográficamente el valor de los C_p de cada uno de los compuestos y se ha establecido una media entre el valor del C_p y su composición. En el caso del fluido frío, se ha fijado al agua de refrigeración con un valor de $4,18 \frac{J}{g \cdot ^\circ C}$, por lo tanto [32]:

$$m'' = \frac{399,47 \frac{kg}{h} \cdot 3,083 \frac{J}{g \cdot ^\circ C} \cdot (327,61 - 321,61) ^\circ C}{4,18 \frac{J}{g \cdot ^\circ C} \cdot (42 - 26) ^\circ C} = 320,07 \frac{kg}{h}$$

Para hallar el coste del agua de refrigeración utilizado en la columna D-101:

$$\text{Coste} = 320,07 \frac{kg}{h} \cdot 8000 h \cdot \frac{1 m^3}{1000 kg} \cdot 0,03 \frac{€}{m^3} = 97,36 \text{ €}$$

Caldera

En el caso de la caldera, la manera de obtener el área y su coste es parecido que el condensador. Será necesario su estudio con el fin de conocer los valores óptimos.

Para ΔT_{ml} :

$$\Delta T_{ml} = \frac{(370 - 350) - (360 - 344,50)}{\ln\left(\frac{370 - 350}{360 - 344,50}\right)} = 17,6 \text{ } ^\circ C$$

Para el cálculo de este factor será necesario calcular los parámetros R y P [26] [27]:

$$R = \frac{370 - 360}{350 - 344,59} = 1,84$$

$$P = \frac{350 - 344,59}{370 - 344,59} = 0,21$$

Para el cálculo de Ft, es necesario utilizar una gráfica y los parámetros P y R (grafica 14). El valor de Ft es igual a 0,98

Para poder calcular el área del condensador, es necesario obtener el coeficiente global de transmisión de calor [28]:

$$U = 812,99 \frac{kcal}{h \cdot m^2 \cdot ^\circ C}$$

Finalmente, con todos los parámetros obtenidos se calcula el área del condensador:

$$A = \frac{316123,02 \frac{kcal}{h}}{812,99 \frac{kcal}{h \cdot m^2 \cdot ^\circ C} \cdot 17,6 ^\circ C \cdot 0,98} = 22,53 m^2$$

Una vez se ha obtenido el are del cambiador, atendiendo a los criterios de diseño, es necesario sobredimensionar el condensador el equipo un 110%

$$A_{Sobredimensionada} = A \cdot 1,1 = 24,79 m^2$$

Costes fijos caldera

Cuando el área es inferior a 250 m² [30]:

$$Costes (2008) = 8500 + 1560 \cdot 24,59^{0,75} = 25.831,70 \text{ €}$$

Se actualiza el valor para el año 2023:

$$Costes (2023) = 25831,70 \cdot \frac{154,62}{95,59} = 41.783,64 \text{ €}$$

Coste vapor de agua

Al igual que en el cálculo de cantidad de agua de refrigeración, se utilizan las mismas ecuaciones para obtener dicha cantidad. En cuanto a las C_p , en el caso del fluido frío se ha buscado bibliográficamente el valor de los C_p de cada uno de los compuestos y se ha establecido una media entre el valor del C_p y su composición. En el caso del fluido caliente, se ha fijado al vapor de agua con un valor de $1,996 \frac{J}{g \cdot ^\circ C}$, por lo tanto:

$$m' = \frac{249,73 \frac{kg}{h} \cdot 3,16 \frac{J}{g \cdot ^\circ C} \cdot (350 - 344,59) ^\circ C}{1,996 \frac{J}{g \cdot ^\circ C} \cdot (370 - 360) ^\circ C} = 213,89 \frac{kg}{h}$$

Para hallar el coste del agua de refrigeración utilizado en la columna D-101:

$$Coste = 929,29 \frac{kg}{h} \cdot 8000 h \cdot \frac{1 m^3}{756,4 kg} \cdot 9,3 \frac{€}{m^3} = 40.857,87 €$$

3.6 DIMENSIONAMIENTO Y COSTE DE BOMBAS

3.6.1 BOMBA B101

Para hallar el coste de las bombas, es necesario halla el coste de la bomba y el coste del motor. Par poder obtener el dato de los costes fijos, primero hay que hallas valor del factor ρ a través de la siguiente ecuación:

$$\rho = \frac{Q_{diseño} \cdot (P_{imp} - P_{asp})}{1000} \quad [33]$$

Donde:

- $Q_{diseño}$ es el caudal que se va a tratar la bomba multiplicada por el factor de sobrediseño (m^3/h)
- P_{imp} , es la presión de impulsión (kg/cm^2)
- P_{asp} , es la presión de aspiración (kg/cm^2)

En el caso de la aspiración, la presión es de 1 bar ya que la corriente llega a esa presión a la entrada de la bomba. En el caso de la presión de impulsión, se tendrá que calcular teniendo en cuenta las diferentes pérdidas en el proceso ya que, en este caso, la presión de la columna es de 1 bar también. Se va a considerar las pérdidas de presión de 0,7 bar para los cambiadores de calor y de 0,3 de las pérdidas por las conducciones.

$$P_{imp} = P_{destino} + \Delta P_{cambiator} + \Delta P_{conducción} \quad [34]$$

$$P_{imp} = 10 + 0,7 + 0,3 = 11 \text{ bar}$$

Sabiendo que 1 bar equivale a $1,097 \text{ kg/cm}^2$:

$$P_{imp} = 11 \cdot 1,097 = 12,067 \text{ kg/cm}^2$$

Por otra parte, la P_{asp} pasada a kg/cm^2 es de $1,097 \text{ kg/cm}^2$.

A continuación, se calcula el caudal de diseño $Q_{diseño}$ sobredimensionado:

$$Q_{diseño} = 39,266 \text{ m}^3/\text{h} \cdot 1,1 = 43,192 \text{ m}^3/\text{h}$$

Con estos datos calculados se obtiene el valor del factor ρ

$$\rho = \frac{43,192 \cdot (12,067 - 1,097)}{1000} = 0,473$$

Con el valor del factor ρ , se puede obtener la constante C^* de dos maneras:

$$0,04 < \rho < 0,1 \rightarrow \ln \ln C^* = 1,871 + 1,082 \cdot \ln + 0,18 \cdot (\ln \ln \rho)^2 \quad [35]$$

$$0,1 < \rho < 12 \rightarrow \ln \ln C^* = 0,89 + 0,386 \cdot \ln \ln \rho + 0,066 \cdot (\ln \ln \rho)^2 \quad [36]$$

En este caso se escoge la ecuación [36]:

$$\ln \ln C^* = 0,89 + 0,386 \cdot \ln \ln 0,473 + 0,18 \cdot (\ln \ln 0,473)^2$$

$$C^* = 0,701$$

Por último, se hallan los costes de la boba para el año 2008 con esa constante C^* :

$$\text{Coste bomba 2008} = 30000 \cdot C^* \quad [37]$$

Por lo tanto:

$$\text{Coste bomba 2008} = 30000 \cdot 0,701 = 21.057,17 \text{ euros}$$

Para el coste de la bomba en 2023, se hará su pertinente ajuste [18]:

$$\text{Coste bomba 2023} = 21057,17 \cdot \frac{154,62}{95,44} = 34.114,20 \text{ euros}$$

Por último, se calcula el coste del motor a través de la potencia consumida de la bomba (W_c):

$$W_a = \frac{Q_{diseño} \left(\frac{\text{m}^3}{\text{h}} \right) \cdot \Delta P \left(\frac{\text{kg}}{\text{cm}^2} \right)}{27,5} \quad [38]$$

Teniendo los datos calculados:

$$W_a = \frac{43,192 \cdot (12,067 - 1,097)}{27,5} = 17,22 \text{ cv}$$

Con la potencia consumida calculada, se calcula la potencia hidráulica consumida por la bomba W_C , considerada como el 80% de W_a :

$$\text{Coste motor} = 360 \cdot (W_C)^{0,85} \quad [39]$$

$$\text{Coste motor} = 360 \cdot (17,22 \cdot 0,8)^{0,85} = 3.346,24 \text{ euros}$$

Por lo tanto, el coste total de la bomba es el siguiente:

$$\text{Coste totales fijos 2023} = \text{Coste bomba 2023} + \text{Coste motor} \quad [40]$$

$$\text{Coste totales fijos 2023} = 34114,20 + 3346,24 = 37.460,44 \text{ euros}$$

Todo esto se empleará de igual manera para las diferentes bombas utilizadas en el diagrama:

3.6.2 BOMBA G102

En el caso de la aspiración, la presión es de 1 bar ya que la corriente llega a esa presión a la entrada de la bomba. En el caso de la presión de impulsión, se tendrá que calcular teniendo en cuenta las diferentes pérdidas en el proceso ya que, en este caso, la presión de la columna es de 1 bar también. Se va a considerar las pérdidas de presión de 0,7 bar para los cambiadores de calor y de 0,3 de las pérdidas por las conducciones.

$$P_{imp} = P_{destino} + \Delta P_{cambiador} + \Delta P_{conducción}$$

$$P_{imp} = 1 + 0,7 + 0,3 = 2 \text{ bar}$$

Sabiendo que 1 bar equivale a $1,097 \text{ kg/cm}^2$:

$$P_{imp} = 2 \cdot 1,097 = 2,194 \text{ kg/cm}^2$$

Por otra parte, la P_{asp} pasada a kg/cm^2 es de $10,97 \text{ kg/cm}^2$.

A continuación, se calcula el caudal de diseño $Q_{diseño}$ sobredimensionado:

$$Q_{diseño} = 39,266 \text{ m}^3/\text{h} \cdot 1,1 = 43,192 \text{ m}^3/\text{h}$$

Con estos datos calculados se obtiene el valor del factor ρ [33]:

$$|\rho| = \frac{43,192 \cdot (2,194 - 10,97)}{1000} = 0,379$$

Con el valor del factor ρ , se puede obtener la constante C^* . En este caso se escoge la ecuación [36]:

$$\ln \ln C^* = 0,89 + 0,386 \cdot \ln \ln 0,379 + 0,18 \cdot (\ln \ln 0,379)^2$$

$$C^* = 1,020$$

Por último, se hallan los costes de la boba para el año 2008 con esa constante C^* [37]:

$$\text{Coste bomba 2008} = 30000 \cdot 1,020 = 30.624,19 \text{ euros}$$

Para el coste de la bomba en 2022, se hará su pertinente ajuste [18]:

$$\text{Coste bomba 2023} = 30624,19 \cdot \frac{154,62}{95,44} = 49.613,50 \text{ euros}$$

Por último, se calcula el coste del motor a través de la potencia consumida de la bomba (W_a) [38]:

$$W_a = \frac{43,192 \cdot (2,194 - 10,97)}{27,5} = 13,78 \text{ cv}$$

Con la potencia consumida calculada, se calcula la potencia hidráulica consumida por la bomba W_c , considerada como el 80% de W_a [39]:

$$\text{Coste motor} = 360 \cdot (13,78 \cdot 0,8)^{0,85} = 2.768,79 \text{ euros}$$

Por lo tanto, el coste total de la bomba es el siguiente [40]:

$$\text{Coste totales fijos 2023} = 49613,50 + 2768,79 = 52.382,29 \text{ euros}$$

3.6.3 BOMBA G103

En el caso de la aspiración, la presión es de 1 bar ya que la corriente llega a esa presión a la entrada de la bomba. En el caso de la presión de impulsión, se tendrá que calcular teniendo en cuenta las diferentes pérdidas en el proceso ya que, en este caso, la presión de la columna es de 1 bar también. Se va a considerar las pérdidas de presión de 0,7 bar para los cambiadores de calor y de 0,3 de las pérdidas por las conducciones.

$$P_{imp} = P_{destino} + \Delta P_{cambiador} + \Delta P_{conducción}$$

$$P_{imp} = 1 + 0,7 + 0,3 = 2 \text{ bar}$$

Sabiendo que 1 bar equivale a $1,097 \text{ kg/cm}^2$:

$$P_{imp} = 2 \cdot 1,097 = 2,194 \text{ kg/cm}^2$$

Por otra parte, la P_{asp} pasada a kg/cm^2 es de $1,097 \text{ kg/cm}^2$.

A continuación, se calcula el caudal de diseño $Q_{diseño}$ sobredimensionado:

$$Q_{diseño} = 39,03 \text{ m}^3/\text{h} \cdot 1,1 = 42,93 \text{ m}^3/\text{h}$$

Con estos datos calculados se obtiene el valor del factor ρ [33]

$$\rho = \frac{42,93 \cdot (2,194 - 1,097)}{1000} = 0,047$$

Con el valor del factor ρ , se puede obtener la constante C^* . En este caso se escoge la ecuación [35]:

$$\ln \ln C^* = 0,89 + 0,386 \cdot \ln 0,047 + 0,18 \cdot (\ln 0,047)^2$$

$$C^* = 1,39$$

Por último, se hallan los costes de la boba para el año 2008 con esa constante C^* [37]:

$$\text{Coste bomba 2008} = 30000 \cdot 1,39 = 41.777,31 \text{ euros}$$

Para el coste de la bomba en 2023, se hará su pertinente ajuste [18]:

$$\text{Coste bomba 2023} = 41777,31 \cdot \frac{154,62}{95,44} = 67.682,39 \text{ euros}$$

Por último, se calcula el coste del motor a través de la potencia consumida de la bomba (W_a) [38]:

$$W_a = \frac{42,93 \cdot (2,194 - 1,097)}{27,5} = 1,71 \text{ cv}$$

Con la potencia consumida calculada, se calcula la potencia hidráulica consumida por la bomba W_c , considerada como el 80% de W_a [39]:

$$\text{Coste motor} = 360 \cdot (1,71 \cdot 0,8)^{0,85} = 469,86 \text{ euros}$$

Por lo tanto, el coste total de la bomba es el siguiente [40]:

$$\text{Coste totales fijos 2023} = 67682,39 + 469,86 = 68.152,25 \text{ euros}$$

3.6.4 BOMBA G104

En el caso de la aspiración, la presión es de 1 bar ya que la corriente llega a esa presión a la entrada de la bomba. En el caso de la presión de impulsión, se tendrá que calcular teniendo en cuenta las diferentes pérdidas en el proceso ya que, en este caso, la presión de la columna es de 1 bar también. Se va a considerar las pérdidas de presión de 0,7 bar para los cambiadores de calor y de 0,3 de las pérdidas por las conducciones.

$$P_{imp} = P_{destino} + \Delta P_{cambiator} + \Delta P_{conducción}$$

$$P_{imp} = 5 + 0,7 + 0,3 = 6 \text{ bar}$$

Sabiendo que 1 bar equivale a $1,097 \text{ kg/cm}^2$:

$$P_{imp} = 6 * 1,097 = 6,58 \text{ kg/cm}^2$$

Por otra parte, la P_{asp} pasada a kg/cm^2 es de $1,097 \text{ kg/cm}^2$.

A continuación, se calcula el caudal de diseño $Q_{diseño}$ sobredimensionado:

$$Q_{diseño} = 0,711 \text{ m}^3/\text{h} \cdot 1,1 = 0,78 \text{ m}^3/\text{h}$$

Con estos datos calculados se obtiene el valor del factor ρ [33]:

$$\rho = \frac{0,78 \cdot (6,58 - 1,64)}{1000} = 0,0038$$

En este caso no se puede utilizar las ecuaciones empleadas para el cálculo de los costes de las bombas ya que el factor ρ es menor a 0,04. Para realizar una estimación de los costes de dicha bomba, se emplea el catálogo de la bibliografía para los distintos tipos de bombas HASA [18], donde aparecen los distintos precios para el año 2023. En función l caudal impulsado y de la potencia consumida (W_c) se selecciona el tipo de bomba y se mira el coste de dicha bomba. Para ello, se calcula directamente la potencia consumida [38]:

$$W_a = \frac{0,78 \cdot (6,58 - 1,64)}{27,5} = 0,14 \text{ cv}$$

Con la potencia consumida calculada, se calcula la potencia hidráulica consumida por la bomba W_c , considerada como el 85% de W_a :

$$W_c = 0,14 \text{ cv} \cdot 0,85 = 0,12 \text{ cv}$$

Se observa bibliográficamente el coste de la bomba. Se ha escogido la MAG-13 que tiene un coste de 608 euros [18]

A continuación, se calcula el coste del motor [39]:

$$\text{Coste motor} = 360 \cdot (0,12 \cdot 0,8)^{0,85} = 49,11 \text{ euros}$$

Por lo tanto, el coste total de la bomba es el siguiente [40]:

$$\text{Coste totales fijos 2023} = 608 + 49,11 = 657,11 \text{ euros}$$

3.7 COLUMNAS FLASH

Para el cálculo de las columnas flash, se puede conocer su coste empleando el método de Williams, comparando el equipo con otro de igual naturaleza, pero diferente capacidad.

Tabla 29. Valor de un equipo buscado bibliográficamente siguiendo el método de Williams

Equipment	Size	Unit	Approximate cost, \$000	Size range	Exponent
Piping, typical straight run, C/S, FOB, \$/ft Installed: \$/ft \times 6 to 7	6 (152)	Nominal diameter in (mm)	0.0093	1-24 (25-610)	1.33
Complex network: FOB \$/ft \times 2 Installed: \$/ft \times 13					
Pressure vessel horizontal drum (150 psig), C/S	1000 (3.8)	U.S. gal (m^3)	6.3	100-80000 (0.4-302)	0.62
Jacketed reactors, including mixer, FOB	100 (0.38)	U.S. gal (m^3)	9.3	10-4000 (0.04-15.1)	0.53

Por lo tanto, empleando el método de Williams:

$$I_2 = I_1 \cdot \left(\frac{Q_2}{Q_1}\right)^b \quad [41]$$

Donde:

- I_2 es la inserción para el equipo con una capacidad (Q_2)
- I_1 es la inserción para el equipo con una capacidad (Q_1)
- B es el exponente propio de cada tipo de equipo para el método de Williams

Por lo tanto:

$$I_2 = 6300 \cdot \left(\frac{39,26 \text{ m}^3}{3,8 \text{ m}^3}\right)^{0,62} = 193325,11 \text{ euros}$$

Para el flash 2 se hace lo mismo:

$$I_2 = 6300 \cdot \left(\frac{0,322 \text{ m}^3}{3,8 \text{ m}^3}\right)^{0,62} = 1365,59 \text{ euros}$$

3.8 CAMBIADORES DE CALOR

En este apartado se calculan las diferentes intercambiadores de calor utilizados entre los equipos para aumentar o disminuir sus corrientes de alimentación. Para el cálculo de estos equipos se siguen los mismos cálculos que en el caso del condensador de la columna D101. En estos cambiadores:

3.8.1 CAMBIADOR E101

El cambiador E101 es el encargado de elevar la temperatura de los 80°C a una temperatura de 140°C, temperatura a la que se encuentra el reactor para realizar la alquilación de fenol. Para ello se emplea una corriente de vapor de agua a media presión, el cual se encuentra 190°C y 10 bar.

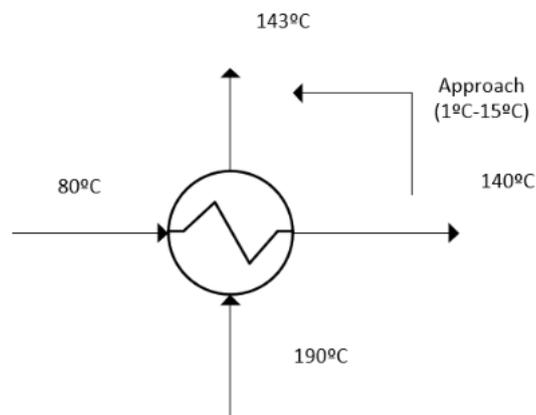


Figura 17. Fijación de las temperaturas para los cambiadores de calor (Approach)

Hay que tener en cuenta que la corriente de vapor no puede salir a menos de 140° ya que habría cruce de temperaturas. Al mismo tiempo, la diferencia de temperatura entre la corriente de salida del fluido caliente y fluido frío tiene que ser de máximo 15°C, lo que se conoce como approach.

Una vez que se conocen las temperaturas de entrada y salida para ambas reacciones se calcula el valor de calefacción necesario a través de la ecuación [32]. Como ya se ha calculado anteriormente, se muestran los resultados en la siguiente tabla:

Tabla 30. Dimensionamiento intercambiador E101

T entrada (°c)	T entrada (°c)	T salida (°c)	T salida (°c)	Caudales masicos (kg/h)		Area (m2)
T. Frío	T. Caliente	T. Frío	T. Caliente	Frío	Caliente	
80	190	140	143	34005,59	46086,54	44,05

Los costes se calculan a través de las ecuaciones [30] y [18], cuyos resultados son los siguientes:

Tabla 31. Costes variables y fijos del intercambiador E101

Costes	Euros €
Costes cambiador	56.988,56 €
Costes servicios auxiliares	2.396.500,08 €

3.8.2 CAMBIADOR E102

El cambiador E102 es el encargado de enfriar la corriente de salida de reactor antes de entrar en la columna flash F101. Para ello se usa agua de refrigeración de 26°C y los resultados obtenidos son los siguientes:

Tabla 32. Dimensionamiento intercambiador E102

T entrada (°c)	T entrada (°c)	T salida (°c)	T salida (°c)	Caudales masicos (kg/h)		Area (m2)
T. Frío	T. Caliente	T. Frío	T. Caliente	Frío	Caliente	
26	140	95	108	7995,7	34005,59	15,78

Tabla 33. Costes variables y fijos del intercambiador E102

Costes	Euros €
Costes cambiador	33.783,67 €
Costes servicios	1.918,97 €

3.8.3 CAMBIADOR E103

El cambiador de calor E103 es el encargado de aumentar la temperatura de la corriente de la salida del fondo de la columna flash F101 hasta la entrada de la columna D101. Para ello se aumenta la temperatura hasta los 230 °C. Los resultados obtenidos son los siguientes:

Tabla 34. Dimensionamiento intercambiador E103

T entrada (°c)	T entrada (°c)	T salida (°c)	T salida (°c)	Caudales masicos (kg/h)		Area (m2)
T. Frío	T. Caliente	T. Frío	T. Caliente	Frío	Caliente	
108	300	225	235	33724,68	79417,35	51,57

Tabla 35. Costes variables y fijos del intercambiador E103

Costes	Euros €
Costes cambiador	62.413,44 €
Costes servicios	4.129.702,20 €

3.8.4 CAMBIADOR E104

El cambiador de calor E104 es el encargado de aumentar la temperatura de la corriente de la salida del fondo de la columna flash D101 hasta la entrada de la columna D102. Para ello se aumenta la temperatura hasta los 230 °C. Los resultados obtenidos son los siguientes:

Tabla 36. Dimensionamiento intercambiador E104

T entrada (°c)	T entrada (°c)	T salida (°c)	T salida (°c)	Caudales masicos (kg/h)		Area (m2)
T. Frío	T. Caliente	T. Frío	T. Caliente	Frío	Caliente	
267,7	380	335	345	631,23	1914,4	6,35

Tabla 37. Costes variables y fijos del intercambiador E104

Costes	Euros €
Costes cambiad	14.782,14 €
Costes servicios	133.310,47 €

3.8.5 CAMBIADOR E105

El cambiador de calor E105 es el encargado de bajar la temperatura de la corriente de la salida de la cabeza de la columna flash F101 hasta la entrada de la columna flash F102. Para ello se disminuye la temperatura hasta los 30 °C con agua de refrigeración. Los resultados obtenidos son los siguientes:

Tabla 38. Dimensionamiento intercambiador E105

T entrada (°c)	T entrada (°c)	T salida (°c)	T salida (°c)	Caudales masicos (kg/h)		Area (m2)
T. Frío	T. Caliente	T. Frío	T. Caliente	Frío	Caliente	
26	108	28	30	8427,04	290,42	8,91

Tabla 39. Costes variables y fijos del intercambiador E105

Costes	Euros €
Costes cambiad	26.806,67 €
Costes servicios	2.022,49 €

3.8.6 CAMBIADOR E106

El cambiador de calor E106 es el encargado de bajar la temperatura de la corriente de la salida de la cabeza de la columna D101 hasta la entrada del mezclador M102. Para ello se disminuye la temperatura hasta los 80 °C con agua de refrigeración. Los resultados obtenidos son los siguientes:

Tabla 40. Dimensionamiento intercambiador E106

T entrada (°c)	T entrada (°c)	T salida (°c)	T salida (°c)	Caudales masicos (kg/h)		Area (m2)
T. Frío	T. Caliente	T. Frío	T. Caliente	Frío	Caliente	
26	201,7	62	80	82923,93	33075,5	9,61

Tabla 41. Costes variables y fijos del intercambiador E106

Costes	Euros €
Costes cambiad	27.437,81 €
Costes servicios	19.901,74 €

ANEXO 4. RESULTADOS VAN.RENTABILIDAD DEL PROYECTO.

CASO A

Año	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Inversion	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €													
Ventas				1.898.625.984,00 €	1.936.598.503,68 €	1.975.330.473,75 €	2.014.837.083,23 €	2.055.133.824,89 €	2.096.236.501,39 €	2.138.161.231,42 €	2.180.924.456,05 €	2.224.542.945,17 €	2.269.033.804,07 €	2.314.414.480,15 €	2.360.702.769,76 €	2.407.916.825,15 €
Costes				1.992.176.905,28 €	2.030.316.747,64 €	2.070.923.082,59 €	2.112.341.544,24 €	2.154.588.375,13 €	2.197.680.142,63 €	2.241.633.745,48 €	2.286.466.420,39 €	2.332.195.748,80 €	2.378.839.663,78 €	2.426.416.457,05 €	2.474.944.786,19 €	2.524.443.681,92 €
Materias primas				1.982.536.518,94 €	2.022.187.249,32 €	2.062.630.994,31 €	2.103.883.614,19 €	2.145.961.286,48 €	2.188.880.512,20 €	2.232.658.122,45 €	2.277.311.284,90 €	2.322.857.510,60 €	2.369.314.660,81 €	2.416.700.954,02 €	2.465.034.973,10 €	2.514.335.672,57 €
Servicios auxiliares				6.800.893,43 €	6.936.911,30 €	7.075.649,52 €	7.217.162,51 €	7.361.505,76 €	7.508.735,88 €	7.658.910,60 €	7.812.088,81 €	7.968.330,58 €	8.127.697,20 €	8.290.251,14 €	8.456.056,16 €	8.625.177,29 €
personal				835.144,98 €	851.847,87 €	868.884,83 €	886.262,53 €	903.987,78 €	922.067,53 €	940.508,89 €	959.319,06 €	978.505,44 €	998.075,55 €	1.018.037,06 €	1.038.397,81 €	1.059.165,76 €
Mantenimiento y seguro				334.057,99 €	340.739,15 €	347.553,93 €	354.505,01 €	361.595,11 €	368.827,01 €	376.203,55 €	383.727,63 €	391.402,18 €	399.230,22 €	407.214,83 €	415.359,12 €	423.666,30 €
Amortizacion				1.670.289,95 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €	1.045.494,42 €
BAI				- 95.221.211,23 €	- 94.763.738,38 €	- 96.638.103,26 €	- 98.549.955,44 €	- 100.500.044,66 €	- 102.489.135,66 €	- 104.518.008,49 €	- 106.587.458,77 €	- 108.698.298,06 €	- 110.851.354,13 €	- 113.047.471,32 €	- 114.242.016,44 €	- 116.526.856,77 €
Impuestos				- 28.566.363,37 €	- 28.429.121,51 €	- 28.991.430,98 €	- 29.564.986,63 €	- 30.150.013,40 €	- 30.746.740,70 €	- 31.355.402,55 €	- 31.976.237,63 €	- 32.609.489,42 €	- 33.255.406,24 €	- 33.914.241,40 €	- 34.272.604,93 €	- 34.958.057,03 €
Flujo neto de caja	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	- 66.654.847,86 €	- 66.334.616,87 €	- 67.646.672,28 €	- 68.984.968,81 €	- 70.350.031,26 €	- 71.742.394,96 €	- 73.162.605,94 €	- 74.611.221,14 €	- 76.088.808,64 €	- 77.595.947,89 €	- 79.133.229,93 €	- 79.969.411,51 €	- 81.568.799,74 €
Factir de actualizacion	1	0,943396226	0,88999644	0,839619283	0,792093663	0,747258173	0,70496054	0,665057114	0,627412371	0,591898464	0,558394777	0,526787525	0,496969364	0,468839022	0,442300964	0,417265061
Flujo neto de caja actualiz-	- 5.567.633,17 €	- 5.252.484,12 €	- 4.955.173,70 €	- 55.964.695,57 €	- 52.543.229,67 €	- 50.549.528,73 €	- 48.631.680,89 €	- 46.786.788,73 €	- 45.012.066,15 €	- 43.304.834,04 €	- 41.662.516,18 €	- 40.082.635,21 €	- 38.562.808,84 €	- 37.100.746,15 €	- 35.370.547,83 €	- 34.035.810,18 €
VAN	- 5.567.633,17 €	- 10.820.117,29 €	- 15.775.290,99 €	- 71.739.986,56 €	- 124.283.216,23 €	- 174.832.744,97 €	- 223.464.425,86 €	- 270.251.214,59 €	- 315.263.280,74 €	- 358.568.114,79 €	- 400.230.630,97 €	- 440.313.266,18 €	- 478.876.075,02 €	- 515.976.821,17 €	- 551.347.369,00 €	- 585.383.179,18 €

Tabla 42.VAN Caso A

CASO B

Año	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Inversion	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €													
Ventas				1.930.537.184,00 €	1.969.147.927,68 €	2.008.530.886,23 €	2.048.701.503,96 €	2.089.675.534,04 €	2.131.469.044,72 €	2.174.098.425,61 €	2.217.580.394,12 €	2.261.932.002,01 €	2.307.170.642,05 €	2.353.314.054,89 €	2.400.380.335,99 €	2.448.387.942,71 €
Costes				1.990.439.274,07 €	2.030.248.059,55 €	2.070.853.020,74 €	2.112.270.081,16 €	2.154.515.482,78 €	2.197.605.792,44 €	2.241.557.908,29 €	2.286.389.066,45 €	2.332.116.847,78 €	2.378.759.184,74 €	2.426.334.368,43 €	2.474.861.055,80 €	2.524.358.276,92 €
Materias primas				1.982.536.518,94 €	2.022.187.249,32 €	2.062.630.994,31 €	2.103.883.614,19 €	2.145.961.286,48 €	2.188.880.512,20 €	2.232.658.122,45 €	2.277.311.284,90 €	2.322.857.510,60 €	2.369.314.660,81 €	2.416.700.954,02 €	2.465.034.973,10 €	2.514.335.672,57 €
Servicios auxiliares				6.800.893,43 €	6.936.911,30 €	7.075.649,52 €	7.217.162,51 €	7.361.505,76 €	7.508.735,88 €	7.658.910,60 €	7.812.088,81 €	7.968.330,58 €	8.127.697,20 €	8.290.251,14 €	8.456.056,16 €	8.625.177,29 €
personal				787.044,07 €	802.784,96 €	818.840,66 €	835.217,47 €	851.921,82 €	868.960,25 €	886.339,46 €	904.066,25 €	922.147,57 €	940.590,52 €	959.402,34 €	978.590,38 €	998.162,19 €
Mantenimiento y seguro				314.817,63 €	321.113,98 €	327.536,26 €	334.086,99 €	340.768,73 €	347.584,10 €	354.535,78 €	361.626,50 €	368.859,03 €	376.236,21 €	383.760,93 €	391.436,15 €	399.264,88 €
Amortizacion				1.670.289,95 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €
BAI				- 61.572.380,02 €	- 62.505.540,60 €	- 63.727.543,23 €	- 64.973.985,92 €	- 66.245.357,47 €	- 67.542.156,44 €	- 68.864.891,40 €	- 70.214.081,05 €	- 71.590.254,50 €	- 72.993.951,41 €	- 74.425.722,27 €	- 74.480.719,82 €	- 75.970.334,21 €
Impuestos				- 18.471.714,01 €	- 18.751.662,18 €	- 19.118.262,97 €	- 19.492.195,78 €	- 19.873.607,24 €	- 20.262.646,93 €	- 20.659.467,42 €	- 21.064.224,32 €	- 21.477.076,35 €	- 21.898.185,42 €	- 22.327.716,68 €	- 22.344.215,94 €	- 22.791.100,26 €
Flujo neto de caja	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	- 43.100.666,02 €	- 43.753.878,42 €	- 44.609.280,26 €	- 45.481.790,15 €	- 46.371.750,23 €	- 47.279.509,51 €	- 48.205.423,98 €	- 49.149.856,74 €	- 50.113.178,15 €	- 51.095.765,99 €	- 52.098.005,59 €	- 52.136.503,87 €	- 53.179.233,95 €
Factir de actualizacion	1	0,943396226	0,88999644	0,839619283	0,792093663	0,747258173	0,70496054	0,665057114	0,627412371	0,591898464	0,558394777	0,526787525	0,496969364	0,468839022	0,442300964	0,417265061
Flujo neto de caja actualiz-	- 5.567.633,17 €	- 5.252.484,12 €	- 4.955.173,70 €	- 36.188.150,30 €	- 34.657.169,84 €	- 33.334.649,26 €	- 32.062.867,36 €	- 30.839.862,36 €	- 29.663.749,18 €	- 28.532.716,39 €	- 27.445.023,29 €	- 26.398.997,11 €	- 25.393.030,30 €	- 24.425.578,00 €	- 23.060.025,94 €	- 22.189.836,28 €
VAN	- 5.567.633,17 €	- 10.820.117,29 €	- 15.775.290,99 €	- 51.963.441,28 €	- 86.620.611,12 €	- 119.955.260,38 €	- 152.018.127,75 €	- 182.857.990,10 €	- 212.521.739,28 €	- 241.054.455,67 €	- 268.499.478,96 €	- 294.898.476,06 €	- 320.291.506,37 €	- 344.717.084,37 €	- 367.777.110,31 €	- 389.966.946,59 €

Tabla 43.VAN Caso B

CASO C

Año	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Inversion	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €													
Ventas				1.962.448.384,00 €	2.001.697.351,68 €	2.041.731.298,71 €	2.082.565.924,69 €	2.124.217.243,18 €	2.166.701.588,05 €	2.210.035.619,81 €	2.254.236.332,20 €	2.299.321.058,85 €	2.345.307.480,02 €	2.392.213.629,62 €	2.440.057.902,22 €	2.488.859.060,26 €
Costes				1.990.439.274,07 €	2.030.248.059,55 €	2.070.853.020,74 €	2.112.270.081,16 €	2.154.515.482,78 €	2.197.605.792,44 €	2.241.557.908,29 €	2.286.389.066,45 €	2.332.116.847,78 €	2.378.759.184,74 €	2.426.334.368,43 €	2.474.861.055,80 €	2.524.358.276,92 €
Materias primas				1.982.536.518,94 €	2.022.187.249,32 €	2.062.630.994,31 €	2.103.883.614,19 €	2.145.961.286,48 €	2.188.880.512,20 €	2.232.658.122,45 €	2.277.311.284,90 €	2.322.857.510,60 €	2.369.314.660,81 €	2.416.700.954,02 €	2.465.034.973,10 €	2.514.335.672,57 €
Servicios auxiliares				6.800.893,43 €	6.936.911,30 €	7.075.649,52 €	7.217.162,51 €	7.361.505,76 €	7.508.735,88 €	7.658.910,60 €	7.812.088,81 €	7.968.330,58 €	8.127.697,20 €	8.290.251,14 €	8.456.056,16 €	8.625.177,29 €
personal				787.044,07 €	802.784,96 €	818.840,66 €	835.217,47 €	851.921,82 €	868.960,25 €	886.339,46 €	904.066,25 €	922.147,57 €	940.590,52 €	959.402,34 €	978.590,38 €	998.162,19 €
Mantenimiento y seguro				314.817,63 €	321.113,98 €	327.536,26 €	334.086,99 €	340.768,73 €	347.584,10 €	354.535,78 €	361.626,50 €	368.859,03 €	376.236,21 €	383.760,93 €	391.436,15 €	399.264,88 €
Amortizacion				1.670.289,95 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	
BAI				- 29.661.180,02 €	- 29.956.116,60 €	- 30.527.130,75 €	- 31.109.565,19 €	- 31.703.648,32 €	- 32.309.613,12 €	- 32.927.697,20 €	- 33.558.142,97 €	- 34.201.197,66 €	- 34.857.113,44 €	- 35.526.147,53 €	- 36.241.153,58 €	- 36.920.209,66 €
Impuestos				- 8.898.354,01 €	- 8.986.834,98 €	- 9.158.139,23 €	- 9.332.869,56 €	- 9.511.094,50 €	- 9.692.883,93 €	- 9.878.309,16 €	- 10.067.442,89 €	- 10.260.359,30 €	- 10.457.134,03 €	- 10.657.844,26 €	- 10.859.046,08 €	- 11.066.269,96 €
Flujo neto de caja	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	- 20.762.826,02 €	- 20.969.281,62 €	- 21.368.991,53 €	- 21.776.695,64 €	- 22.192.553,83 €	- 22.616.729,18 €	- 23.049.388,04 €	- 23.490.700,08 €	- 23.940.838,36 €	- 24.399.979,41 €	- 24.868.303,27 €	- 25.357.607,51 €	- 25.845.451,66 €
Factir de actualizacion	1	0,943396226	0,88999644	0,839619283	0,792093663	0,747258173	0,70496054	0,665057114	0,627412371	0,591898464	0,558394777	0,526787525	0,496969364	0,468839022	0,442300964	0,417265061
Flujo neto de caja actualiz-	- 5.567.633,17 €	- 5.252.484,12 €	- 4.955.173,70 €	- 17.432.869,09 €	- 16.609.635,09 €	- 15.968.153,56 €	- 15.351.711,12 €	- 14.759.315,79 €	- 14.190.015,69 €	- 13.642.897,37 €	- 13.117.084,23 €	- 12.611.735,00 €	- 12.126.042,24 €	- 11.659.230,99 €	- 11.247.427,88 €	- 10.868.807,96 €
VAN	- 5.567.633,17 €	- 10.820.117,29 €	- 15.775.290,99 €	- 33.208.160,08 €	- 49.817.795,17 €	- 65.785.948,74 €	- 81.137.659,86 €	- 95.896.975,65 €	- 110.086.991,34 €	- 123.729.888,71 €	- 136.846.972,94 €	- 149.458.707,93 €	- 161.584.750,17 €	- 173.243.981,16 €	- 184.019.409,04 €	- 194.388.216,99 €

Tabla 44.VAN Caso C

CASO D

Año	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Inversion	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €													
Ventas				1.994.359.584,00 €	2.034.246.775,68 €	2.074.931.711,19 €	2.116.430.345,42 €	2.158.758.952,33 €	2.201.934.131,37 €	2.245.972.814,00 €	2.290.892.270,28 €	2.336.710.115,69 €	2.383.444.318,00 €	2.431.113.204,36 €	2.479.735.468,45 €	2.529.330.177,82 €
Costes				1.990.439.274,07 €	2.030.248.059,55 €	2.070.853.020,74 €	2.112.270.081,16 €	2.154.515.482,78 €	2.197.605.792,44 €	2.241.557.908,29 €	2.286.389.066,45 €	2.332.116.847,78 €	2.378.759.184,74 €	2.426.334.368,43 €	2.474.861.055,80 €	2.524.358.276,92 €
Materias primas				1.982.536.518,94 €	2.022.187.249,32 €	2.062.630.994,31 €	2.103.883.614,19 €	2.145.961.286,48 €	2.188.880.512,20 €	2.232.658.122,45 €	2.277.311.284,90 €	2.322.857.510,60 €	2.369.314.660,81 €	2.416.700.954,02 €	2.465.034.973,10 €	2.514.335.672,57 €
Servicios auxiliares				6.800.893,43 €	6.936.911,30 €	7.075.649,52 €	7.217.162,51 €	7.361.505,76 €	7.508.735,88 €	7.658.910,60 €	7.812.088,81 €	7.968.330,58 €	8.127.697,20 €	8.290.251,14 €	8.456.056,16 €	8.625.177,29 €
personal				787.044,07 €	802.784,96 €	818.840,66 €	835.217,47 €	851.921,82 €	868.960,25 €	886.339,46 €	904.066,25 €	922.147,57 €	940.590,52 €	959.402,34 €	978.590,38 €	998.162,19 €
Mantenimiento y seguro				314.817,63 €	321.113,98 €	327.536,26 €	334.086,99 €	340.768,73 €	347.584,10 €	354.535,78 €	361.626,50 €	368.859,03 €	376.236,21 €	383.760,93 €	391.436,15 €	399.264,88 €
Amortizacion				1.670.289,95 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	
BAI				2.250.019,98 €	2.593.307,40 €	2.673.281,73 €	2.754.855,54 €	2.838.060,82 €	2.922.930,21 €	3.009.496,99 €	3.097.795,10 €	3.187.859,18 €	3.279.724,54 €	3.373.427,20 €	3.474.412,65 €	3.579.900,90 €
Impuestos				675.005,99 €	777.992,22 €	801.984,52 €	826.456,66 €	851.418,25 €	876.879,06 €	902.849,10 €	929.338,53 €	956.357,75 €	983.917,36 €	1.012.028,16 €	1.042.323,79 €	1.073.199,27 €
Flujo neto de caja	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	1.575.013,98 €	1.815.315,18 €	1.871.297,21 €	1.928.398,88 €	1.986.642,57 €	2.046.051,15 €	2.106.647,89 €	2.168.456,57 €	2.231.501,43 €	2.295.807,18 €	2.361.399,04 €	2.429.088,85 €	2.498.330,63 €
Factir de actualizacion	1	0,943396226	0,88999644	0,839619283	0,792093663	0,747258173	0,70496054	0,665057114	0,627412371	0,591898464	0,558394777	0,526787525	0,496969364	0,468839022	0,442300964	0,417265061
Flujo neto de caja actualiz-	- 5.567.633,17 €	- 5.252.484,12 €	- 4.955.173,70 €	1.322.412,11 €	1.437.899,65 €	1.398.342,13 €	1.359.445,11 €	1.321.230,78 €	1.283.717,80 €	1.246.921,65 €	1.210.854,82 €	1.175.527,11 €	1.140.945,83 €	1.107.116,02 €	1.073.199,27 €	1.042.220,37 €
VAN	- 5.567.633,17 €	- 10.820.117,29 €	- 15.775.290,99 €	- 14.452.878,87 €	- 13.014.979,22 €	- 11.616.637,09 €	- 10.257.191,97 €	- 8.935.961,20 €	- 7.652.243,40 €	- 6.405.321,74 €	- 5.194.466,92 €	- 4.018.939,80 €	- 2.877.993,97 €	- 1.770.877,95 €	- 61.707,76 €	1.190.512,61 €

Tabla 45.VAN Caso D

CASO E

Año	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Inversion	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €	5.567.633,17 €													
Ventas				2.026.270.784,00 €	2.066.796.199,68 €	2.108.132.123,67 €	2.150.294.766,15 €	2.193.300.661,47 €	2.237.166.674,70 €	2.281.910.008,19 €	2.327.548.208,36 €	2.374.099.172,52 €	2.421.581.155,97 €	2.470.012.779,09 €	2.519.413.034,68 €	2.569.801.295,37 €
Costes				1.990.439.274,07 €	2.030.248.059,55 €	2.070.853.020,74 €	2.112.270.081,16 €	2.154.515.482,78 €	2.197.605.792,44 €	2.241.557.908,29 €	2.286.389.066,45 €	2.332.116.847,78 €	2.378.759.184,74 €	2.426.334.368,43 €	2.474.861.055,80 €	2.524.358.276,92 €
Materias primas				1.982.536.518,94 €	2.022.187.249,32 €	2.062.630.994,31 €	2.103.883.614,19 €	2.145.961.286,48 €	2.188.880.512,20 €	2.232.658.122,45 €	2.277.311.284,90 €	2.322.857.510,60 €	2.369.314.660,81 €	2.416.700.954,02 €	2.465.034.973,10 €	2.514.335.672,57 €
Servicios auxiliares personal				6.800.893,43 €	6.936.911,30 €	7.075.649,52 €	7.217.162,51 €	7.361.505,76 €	7.508.735,88 €	7.658.910,60 €	7.812.088,81 €	7.968.330,58 €	8.127.697,20 €	8.290.251,14 €	8.456.056,16 €	8.625.177,29 €
Mantenimiento y seguro				787.044,07 €	802.784,96 €	818.840,66 €	835.217,47 €	851.921,82 €	868.960,25 €	886.339,46 €	904.066,25 €	922.147,57 €	940.590,52 €	959.402,34 €	978.590,38 €	998.162,19 €
Amortizacion				314.817,63 €	321.113,98 €	327.536,26 €	334.086,99 €	340.768,73 €	347.584,10 €	354.535,78 €	361.626,50 €	368.859,03 €	376.236,21 €	383.760,93 €	391.436,15 €	399.264,88 €
BAI				1.670.289,95 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €	1.405.408,72 €
Impuestos				34.161.219,98 €	35.142.731,40 €	35.873.694,21 €	36.619.276,27 €	37.379.769,97 €	38.155.473,54 €	38.946.691,18 €	39.753.733,18 €	40.576.916,02 €	41.416.562,52 €	42.273.001,94 €	44.551.978,88 €	45.443.018,45 €
Flujo neto de caja	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	- 5.567.633,17 €	23.912.853,98 €	24.599.911,98 €	25.111.585,94 €	25.633.493,39 €	26.165.838,98 €	26.708.831,48 €	27.262.683,83 €	27.827.613,23 €	28.403.841,21 €	28.991.593,76 €	29.591.101,36 €	31.186.385,21 €	31.810.112,92 €
Factir de actualizacion	1	0,943396226	0,88999644	0,839619283	0,792093663	0,747258173	0,70496054	0,665057114	0,627412371	0,591898464	0,558394777	0,526787525	0,496969364	0,468839022	0,442300964	0,417265061
Flujo neto de caja actualiz-	- 5.567.633,17 €	- 5.252.484,12 €	- 4.955.173,70 €	20.077.693,32 €	19.485.434,40 €	18.764.837,83 €	18.070.601,35 €	17.401.777,34 €	16.757.451,29 €	16.136.740,67 €	15.538.793,88 €	14.962.789,22 €	14.407.933,90 €	13.873.463,03 €	13.793.768,26 €	13.273.248,70 €
VAN	- 5.567.633,17 €	- 10.820.117,29 €	- 15.775.290,99 €	4.302.402,33 €	23.787.836,73 €	42.552.674,56 €	60.623.275,91 €	78.025.053,26 €	94.782.504,55 €	110.919.245,22 €	126.458.039,10 €	141.420.828,32 €	155.828.762,22 €	169.702.225,25 €	183.495.993,51 €	196.769.242,20 €

Tabla 46.VAN Caso E