

Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA Curso académico 2023/24 Trabajo de Fin de Grado

DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ANHÍDRIDO SUCCÍNICO MEDIANTE HIDROGENACIÓN DE ANHÍDRIDO MALEICO

Adrián de Galdo Dapena



ANEXO*

(*) A rellenar por los alumnos matriculados en los Dobles Grados ofertados por la ESCET

ORIGINALIDAD DEL TRABAJO FIN DE GRADO

El alumno/a Adrián de Galdo Dapena con DNI 50573115W matriculado en el doble grado en Ingeniería Química e Ingeniería Ambiental, que presenta el TRABAJO FIN DE GRADO correspondiente al grado de Ingeniería Química titulado *Diseño y optimización de una planta de producción de anhídrido succínico mediante hidrogenación de anhídrido maleico*.

Declara que al menos el 80% de la memoria del TRABAJO FIN DE GRADO es original y no presenta solapamiento con el otro Trabajo Fin de Grado defendido o por defender.

lunes, 9 de octubre de 2023

Fdo. Adrián de Galdo Dapena

©2023 <Adrián de Galdo Dapena> Algunos derechos reservados Este documento se distribuye bajo la licencia "Atribución 4.0 Internacional" de Creative Commons, disponible en: <u>https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.es</u>

Índice Contenido

1	Resu	imen	1		
2	Intro	ntroducción			
	2.1	Platform molecules	3		
	2.2	Polímeros, combustibles fósiles y su impacto	3		
	2.3	Moléculas de estudio: anhídrido maleico (MA) y anhídrido succínico (AS)	4		
	2.4	Antecedentes: Evolución del proceso de fabricación del anhídrido succínico	5		
3	Obje	tivos	7		
4	Solu	ción técnica/resultados	8		
	4.1	Requisitos de diseño	8		
	4.1.1	Capacidad de producción y condiciones límite de batería	8		
	4.1.2	Reacción química: Cinética y termodinámica	9		
	4.1.3	Catalizador Níquel-Raney	. 13		
	4.1.4	Sobredimensionamiento de los equipos	. 14		
	4.1.5	Servicios auxiliares	. 14		
	4.2	Diagrama de proceso simplificado: Explicación y esquema	. 15		
	4.3	Programa de cálculo: Aspen Plus. Modelo termodinámico	. 19		
	4.4	Diseño de Equipos	. 19		
	4.4.1	Información previa para el cálculo de costes	. 19		
	4.4.2	Bombas (G-101-A/B, G-102-A/B y G-103)	. 20		
	4.4.3	Compresores (K-101 y K-102)	. 21		
	4.4.4	Reactor químico (R-101)	. 24		
	4.4.4.1	Costes asociados a la presurización del hidrógeno	. 25		
	4.4.4.2	Costes asociados al calentamiento de los reactivos	. 26		
	4.4.4.3	Coste asociados a la refrigeración del reactor	. 28		
	4.4.4.4	Optimización del reactor: Caso elegido y descartados	. 28		
	4.4.4.5	Dimensionamiento del equipo	. 30		
	4.4.5	Información previa para los recipientes (M-101, C-101, C-102, D-101)	. 33		
	4.4.6	Mezclador (M-101) y depósito del condensador (D-101)	. 35		
	4.4.7	Separador Líquido-Gas (C-101)	. 35		
	4.4.8	Destilador multietapa (C-102)	. 37		
	4.4.9	Separador de membrana (M-102)	. 41		
	4.4.10	Intercambiadores de calor	. 42		
	4.5	Evaluación económica	. 44		
5	Con	clusiones	. 48		
6	Bibl	iografía	. 49		

7	AN	EXOS	51
	7.1	Anexo I. Asunciones específicas	51
	7.1.1	Puesta en marcha y estado estacionario de la planta	51
	7.1.2	Disolvente utilizado	51
	7.1.3	Material estructural empleado	51
	7.1.4	Cambio de moneda	52
	7.1.5	Tratamiento de datos y notación	52
	7.1.6	Elección del tipo de compresor	52
	7.1.7	Precios de las materias primas y producto	53
	7.2	Anexo II. Coste equipos	54
	7.2.1	Tabla para el coste de los equipos: U.S. Gulf Coast basis, enero 2007	54
	7.2.2	Resumen del coste de los equipos	55
	7.3	Anexo III. Desarrollo servicios auxiliares	57
	7.4	Anexo IV. Resto de equipos. Análogos a anteriores o de cálculo sencillo	60
	7.4.1	Mezclador (M-101)	60
	7.4.2	Depósito pulmón del condensador (D-101)	62
	7.4.3	Bombas	63
	7.4.4	Compresores (puesta en marcha)	67
	7.4.5	Intercambiadores	68
	7.5	Anexo V. Evaluación económica. VAN y TIR	73

Índice Tablas

Tabla 1. Introducción. Moléculas de estudio: Derivados del succínico. Extracto de Kirk-Othmerenciclopedia of Chemical Technology. Página 539-540 (Vol 22) [5]
Tabla 2. Condiciones límite de batería materias primas, el disolvente, producto y subproducto 9
Tabla 3. Cinética química: Datos obtenidos del artículo (tiempo y conversión a una temperatura dada) y de Aspen (concentración del anhídrido maleico (A) y de H ₂ y volumen en líquido) a 25 bar de presión
Tabla 4. Cinética química: Datos para representar las gráficas que linealizan la ecuación de Arrhenius. 11
Tabla 5. Cinética química: Energía de activación y factor pre-exponencial de las cinéticas de reacción 12
Tabla 6. Catalizador Níquel-Raney: Precio y densidad 14
Tabla 7. Servicios auxiliares: Precio por consumo14
Tabla 8. Servicios auxiliares. Costes auxiliares: Coste por kW captado (refrigeración) o cedido (vapor de calefacción)
Tabla 9. Compresores y bombas: Eficiencia del motor eléctrico en función del trabajo isentrópicoreal[11]22
Tabla 10. Compresores K-101 y K-102: Resumen de los compresores seleccionados: Potencia total y costes asociados
Tablas 11. Resultados del diseño del sistema de compresión para alimentar hidrógeno al reactor R- 101 a diferentes presiones (16,84, 22,45, 28,06). (La variable P* hace referencia a la presión a la que llega al siguiente compresor después de las pérdidas de la conducción)
Tabla 12. Acondicionamiento presión de entrada a reactor R-101. Eficiencias para cada etapa en loscompresores
Tabla 13. Acondicionamiento presión de entrada a reactor R-101. Computo de cada tipo de costeasociado a los compresores26
Tabla 14. Optimización reactor R-101. Análisis de sensibilidad a 16,5 bar de presión
Tabla 15. Reactor R-101: Propiedades de la corriente de alimentación al reactor. 16,5 bares a 100ºC. 31
Tabla 16. Reactor R-101: Dimensionamiento. Iteración diámetro de tubo, porosidad, pérdida porrozamiento, número de tubos
Tabla 17. Reactor R-101: Dimensionamiento final del reactor
Tabla 18. Equipos. Recipientes: Tiempos de residencia por equipo en recipientes. Referencia sacadade Chemical Process Equipment design[16]35
Tabla 19. Separador Líquido-Gas C-101: Propiedades de la corriente a separar. Diámetros y alturas que hay que evaluar
Tabla 20. Separador Líquido-Gas C-101: Optimización de la altura y diámetro del recipiente
Tabla 21. Destilador multietapa C-102: Costes en función del número de etapas, reflujo y relacióndestilado / alimento molar

Tabla 22. Destilador multietapa C-102. Propiedades en los platos críticos de la columna: caudales de líquido y de gas
Tabla 23. Destilador multietapa C-102: Determinación del diámetro de columna a partir del 75% de la velocidad de arrastre
Tabla 24. Intercambiador E-106: Propiedades físicas de los fluidos. Vapor de calefacción (caliente) y alimento destilador (frío)
Tabla 25. Intercambiador E-106. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste (Ejemplo E- 106) 44
Tabla 26. Evaluación económica: Método de los porcentajes para obtener el ISBL, el capital de trabajo y el inmovilizado
Tabla 27. Evaluación económica. Costes variables de producción: Materias primas y catalizador, agua de refrigeración y vapor de calefacción, y consumo eléctrico
Tabla 28. Evaluación económica: Ventas
Tabla 29. Evaluación económica: Costes fijos de producción
Tabla 30. Evaluación económica. Resumen de la evaluación inicial: Datos para la obtención del VAN, TIR y PayBack
Tabla 31. Material estructural: Material compatible con el anhídrido acético[16]51
Tabla 32. Parámetros para la ecuación 2. Tabla extraída de Diseño en Ingeniería Química[11] 54
Tabla 33. Evaluación económica: Coste de los equipos 56
Tabla 34. Precio por consumo y año desde el año 2010 hasta el 2022
Tabla 35. Servicios auxiliares: Precio gas natural 58
Tabla 36. Servicios auxiliares. Precio del agua bruta y desmineralizada, y de su impulsión 58
Tabla 37. Servicios auxiliares. Precio del agua de refrigeración y del vapor de calefacción por kWcedido o captado60
Tabla 38. Mezclador M-101: Obtención de diámetros y alturas que hay que evaluar
Tabla 39. Mezclador M-101: Espesor, masa y costes obtenidos (sin el factor de 1,13 de localizacióngeográfica)
Tabla 40. Depósito pulmón D-101. Dimensionamiento inicial que hay que evaluar
Tabla 41. Depósito pulmón D-101. Dimensionamiento con sus costes
Tabla 42. Bombas. Resumen de costes. Al ser parejas de bombas en el conjunto se multiplican por dos. 63
Tabla 43. Compresores. Obtención de la potencia en la puesta en marcha
Tabla 44. Intercambiador E-101. Propiedades físicas de los fluidos. Vapor de calefacción (caliente) y anhídrido acético (frío)
Tabla 45. Intercambiador E-101. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste
Tabla 46. Intercambiador E-102. Propiedades físicas de los fluidos. Vapor de calefacción (caliente) y alimento mezclador(frío)
Tabla 47. Intercambiador E-102. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste

Tabla 48. Intercambiador E-103. Propiedades físicas de los fluidos. Hidrógeno (fluido caliente) y aguade refrigeración (frío)69
Tabla 49. Intercambiador E-103. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste
Tabla 50. Intercambiador E-104. Propiedades físicas de los fluidos. Hidrógeno (fluido caliente) y agua de refrigeración (frío)
Tabla 51. Intercambiador E-104. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste
Tabla 52. Intercambiador E-104. Disminución gasto de agua
Tabla 53. Intercambiador E-105. Propiedades físicas de los fluidos. Anhídridos succínico (caliente), salida del reactor (frío)
Tabla 54. Intercambiador E-105. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste
Tabla 55. Intercambiador E-107. Propiedades físicas de los fluidos. Anhídridos acético (caliente), agua de refrigeración (frío)
Tabla 56. Intercambiador E-107. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste
Tabla 57. Intercambiador E-108. Propiedades físicas de los fluidos. Fondo destilador (frío), vapor de calefacción (caliente)
Tabla 58. Intercambiador E-108. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste
Tabla 59. Intercambiador R-101. Propiedades físicas de los fluidos. Alimento reactor (caliente), agua de refrigeración (frío)
Tabla 60. Reactor/intercambiador R-101. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste 72
Tabla 61 Evaluación económica. Obtención del VAN y TIR. (Unidades en euros, €)

Índice Figuras

Figura 1. Introducción. Moléculas de estudio: Esquema de derivados del ácido succínico [4]4
Figura 2. Introducción. Antecedentes: Producción de ácido succínico mundial en toneladas por año [6]. 6
Figura 3. Reacción química: MA con H $_2$ para dar SA, y SA con 2H $_2$ para dar γ -BL y H $_2$ O9
Figura 4. Cinética química: Gráfica para la constante cinética de 1er orden de reacción en cada punto de temperatura
Figura 5. Cinética de la reacción: Gráfica para realizar Arrhenius con la cinética de 2º orden
Figura 6. Diagrama del proceso18
Figura 7. Compresores K-101 y K-102: Eficiencia isentrópica en función de la razón de compresión[11] 22
Figura 8. Caudal de calor necesario para el calentamiento de los reactivos que entran al reactor R-101 (casos 1,2 y 3)
Figura 9. Refrigeración reactor R-101. Caudal de calor liberado por porcentaje de conversión
Figura 10. Optimización reactor R-101. Costes totales de la optimización del reactor en función de la conversión requerida a 16,5 bar y a diferentes temperaturas de operación)
Figura 11. Equipos. Recipientes: Tensión máxima permitida por el acero inoxidable 304 vs temperatura
Figura 12. Separador Líquido-Gas C-101: Dimensionamiento típico de un separador L-G[16]
Figura 13. Destilador multietapa C-102: Reflujo y coste en función del número de etapas teóricas 38
Figura 14. Destilador multietapa C-102: Determinación de K1 a partir de FLV. Gráfica sacada de Chemical Engineering Design
Figura 15. Evaluación económica. Payback47
Figura 16. Servicios auxiliares: Precio gas natural57
Figura 17. Bombas. Determinación de la eficiencia de la bomba en función de la capacidad
Figura 18. Hoja de especificaciones de las bombas G-101 A/B64
Figura 19. Hoja de especificaciones de las bombas G-102 A/B65
Figura 20. Hoja de especificaciones de las bombas G-103 A/B66
Figura 21. Intercambiadores, factor de corrección en función de R (Z), y el rendimiento de calefacción 69

Índice Ecuaciones

Ecuación 1. Cinética química: Ecuación de Arrhenius y linealización
Ecuación 2. Equipos. Información previa: Cálculo del coste de los equipos según la US Gulf Coast Basis, 2007
Ecuación 3. Equipos. Información previa: Relación entre el acero inoxidable 304 y el acero al carbono 20
Ecuación 4. Compresores K-101 y K-102: Trabajo isentrópico teórico
Ecuación 5. Compresores K-101 y K-102: Trabajo isentrópico real
Ecuación 6. Compresores K-101 y K-102: Trabajo total (isentrópico real del equipo más motor) 22
Ecuación 7. Compresores K-101 y K-102: Relación entre temperatura y presión con parámetro m 22
Ecuación 8. Compresores K-101 y K-102: Parámetro m que considera eficiencia y coeficiente de dilatación adiabática
Ecuación 9. Acondicionamiento temperatura de entrada a reactor R-101. Casos 1, 2 y 3 respectivamente
Ecuación 10. Reactor R-101. Dimensionamiento: Ecuación de Ergun para lechos fijos
Ecuación 11. Reactor R-101. Dimensionamiento: Modificación de la ecuación de Ergun por Hicks para cuando se cumple: $500 < Rep/(1 - \epsilon) < 60000$
Ecuación 12. Reactor R-101: Porosidad en función del diámetro de tubo y de partícula[13]
Ecuación 13. Equipos. Recipientes: Cálculo del espesor de las paredes y de las tapas del recipiente respectivamente
Ecuación 14. Equipos. Recipientes: Cálculo de las masas de las paredes y tapas del recipiente 35
Ecuación 15. Separador Líquido-Gas C-101: Cálculo del diámetro mínimo
Ecuación 16. Destilador multietapa C-102: Ecuación para determinar el factor del caudal líquido- vapor, F _{LV}
Ecuación 17. Destilador multietapa C-102: Ecuación para determinar la velocidad de arrastre, uf 39
Ecuación 18. Intercambiadores de calor. Temperatura media logarítmica: Ecuación y ejemplo (E-106) 43
Ecuación 19. Intercambiador de calor. Coeficiente global de transmisión de calor: Ecuación y ejemplo (E-106)
Ecuación 20. Intercambiador de calor. Parámetro Z: Ecuación y ejemplo (E-106)
Ecuación 21. Intercambiador de calor. Rendimiento de calefacción: Ecuación y ejemplo (E-106) 44
Ecuación 22. Intercambiador de calor. Cálculo del número de carcasas óptimo: Ecuación y ejemplo (E-106)



1 Resumen.

El anhídrido succínico es considerado una molécula plataforma, lo que implica que es un compuesto importante para la industria química por ser intermediario de múltiples reacciones para alcanzar productos de interés, y que puede conseguirse vía biológica y renovable en vez de a partir de combustibles fósiles.

El anhídrido succínico puede derivar en múltiples productos y terminar siendo útil en diferentes sectores, como en la construcción, en la industria textil, agricultura... Es un compuesto que promete ser un buen sustituto de ciertos combustibles fósiles sin los perjuicios ambientales de estos, puesto que admite diferentes alternativas para su síntesis y rangos amplios de mejora en su fabricación.

En este trabajo se va a partir de anhídrido maleico, el cual puede producirse a partir de furfural, y que puede obtenerse a su vez de materia vegetal. Este maleico reacciona con hidrógeno en presencia de un catalizador de Nickel-Raney u otros para dar el succínico, pudiéndose originar subproductos en ciertas condiciones de presión y temperatura. Se va a evitar la formación de estos subproductos eligiendo adecuadamente las condiciones del reactor para disminuir costes en las operaciones de separación.

El reactor y la reacción química es el punto de partida del estudio. La bibliografía existente indica que la reacción debe ocurrir a menos de 120°C para que no aparezcan subproductos, y para que pudiese darse la reacción por debajo de esta temperatura, se debe emplear un disolvente. Entre los disolventes posibles, se eligió el anhídrido acético, pues es con el que se obtiene una mayor velocidad de reacción. Además, de entre los compuestos de la bibliografía no es más dañino ambientalmente y tampoco más caro. También se decidió intentar llegar a mínimo un 99% de conversión del maleico empleado.

El reactor que mejor cumple las expectativas del proceso es uno multitubular, encerrado en una carcasa para regular su temperatura con agua de refrigeración. La temperatura se acotó como máximo a 100°C, y se procedió a calcular la masa de catalizador, la temperatura y la presión con una optimización, resultando en que el proceso es más económico cuanto menor presión se emplea por los grandes costes operativos de comprimir el hidrógeno. Con respecto a la temperatura y la masa de catalizador, se seleccionó la mayor temperatura (100°C) para necesitar menos masa de catalizador, y por tanto, menos volumen de reactor, el cual opera de forma isoterma.

Se evaluó también el efecto de aumentar el caudal de hidrógeno respecto al estequiométrico. No se apreciaron cambios importantes porque no aumentaba sustancialmente su concentración en la fase líquida (donde ocurre realmente la reacción), por lo que se decidió que simplemente entrase con un cierto exceso para asegurar que hubiese hidrógeno suficiente en el reactor y no limitase la reacción.

Previamente al reactor, es necesario un mezclador donde se disuelve el maleico en el acético, ayudado por su propia fusión a 50°C. Para acondicionar los reactivos, también se consideran bombas e



intercambiadores necesarios para el líquido, y los compresores y refrigeradores inter-etapa por parte del hidrógeno.

Después de la salida del reactor, se lleva a cabo la purificación del producto. Primero, por su gran volatilidad se decidió separar el hidrógeno en exceso de la reacción del resto de compuestos, los cuales son mayormente líquidos en las condiciones de salida del reactor. Sin embargo, como hay cierto arrastre del disolvente por el hidrógeno, se requiere un segundo proceso para separar de nuevo el hidrógeno y el disolvente arrastrado. La otra operación de separación consiste en separar el anhídrido acético del anhídrido succínico, consiguiendo una recuperación del 99%.

La primera separación del hidrógeno con el resto de los compuestos se realiza con un simple separador líquido-gas, el cual opera de forma adiabática. Como hay cierto arrastre de acético, esta separación debía continuar con una segunda etapa, en la cual se decide utilizar un separador de membrana (una permeación de gases), aprovechando que el hidrógeno es la molécula más pequeña, frente al acético que tiene una masa molecular mucho mayor.

Por otro lado, para la separación del bruto del acético y succínico se utilizó un destilador multietapa, el cual se optimizó para que tuviese bajos costes de operación y una altura adecuada. Se diseñó atendiendo a que la velocidad de arrastre del gas no desbordase los pisos superiores, ni que el líquido inundase los pisos inferiores.

Cuando la planta opera en estado estacionario, la recirculación permite no tener que emplear ciertos equipos y ahorrar costes, además de no tener que emplear tantos servicios auxiliares. El acético que se recircula al mezclador tiene la energía suficiente para ayudar a fundir el maleico (funde a 50°C). La temperatura resultante de la mezcla de las corrientes con la recirculación es justo de 100°C, temperatura que coincide con la temperatura de entrada del reactor.

Se realizó el diseño mecánico de cada equipo principal del proceso, se ha asegurado que la presión de diseño de los recipientes sea la de máxima impulsión de las bombas que tienen aguas arriba de estos, para evitar riesgos.

Teniendo todos los datos sobre los equipos, y, por tanto, de sus costes, y teniendo el consumo de los servicios auxiliares, de las materias primas, y la salida del producto, se realizó un balance económico general: cálculo del Valor Actual Neto (VAN), de la Tasa Interna de Retorno (TIR), y la representación del periodo de recuperación de la inversión (Payback)

Estos resultados indican que el proyecto es rentable, puesto que el TIR muestra un valor bastante alto (31%), y el PayBack se da en el primer tercio del periodo de tiempo seleccionado para la operación de la planta (sobre los 5-6 años), con un VAN total final de 23M€.



2 Introducción.

El presente proyecto se enmarca en el contexto de una propuesta técnica y económica para encontrar una solución industrial a la necesidad de producir *platform molecules*, desde una perspectiva energética y de empleo de recursos eficiente.

2.1 Platform molecules

Las *platform molecules* son compuestos que proceden de biomasa vegetal y que pueden actuar como sustitutos de los químicos de origen fósil que se utilizan como materia prima en la producción de otros químicos y/o materiales de interés; más en concreto, se están evaluando en la sustitución de los químicos de origen fósil que se utilizan para producir polímeros (plásticos).

La producción de plásticos consume muchos recursos naturales no renovables. Pero los plásticos están arraigados a la vida diaria, y puede resultar más sencillo cambiar el proceso de producción que cambiar a las personas, ese es el motivo para utilizar estas *platform molecules* en sustitución de los combustibles fósiles.

2.2 Polímeros, combustibles fósiles y su impacto.

Los plásticos (polímeros) son extremadamente necesarios por cómo son sus propiedades (mayormente inertes, baja densidad, resistencia mecánica variable...): son imprescindibles en la industria alimentaria y en la sanitaria por seguridad biológica, en aplicaciones industriales porque añaden resistencia a los materiales sin aumentar mucho su peso, en materiales que necesiten ser aislantes eléctricos o transparentes, etc.

Es por todo esto, que es muy importante encontrar una forma de producirlos de forma sostenible debido a que el consumo excesivo de recursos fósiles (método convencional), y, sobre todo, la incorporación de más dióxido de carbono y metano al ciclo del carbono (carbono que se encontraba principalmente encerrado en gran profundidad en yacimientos en el subsuelo, en forma de compuestos orgánicos), están propiciando cambios adversos en la atmósfera y en los océanos (aumento de temperatura global, la acidificación y contaminación de las aguas, etc).

Además, los polímeros actuales que no se tratan suelen acabar formando islas de basura en los océanos degradándose parcialmente, pero sin terminar de descomponerse, formando microplásticos, los cuales están invadiendo las cadenas tróficas[1]. Por este motivo urge encontrar biopolímeros que funcionen durante su tiempo de vida como producto, pero que una vez desechados puedan descomponerse del todo e integrarse al ciclo del carbono de forma normal, en una especie de economía circular (o bien que sean sus componentes compostables o recuperables).

Como se ha comentado anteriormente, se necesitan moléculas *plataforma* de las que se pueda partir para la fabricación de biopolímeros que puedan además biodegradarse. En este trabajo se ha elegido

Universidad Rey Juan Carlos

Adrián de Galdo Dapena

desarrollar el proceso para la fabricación del **anhídrido succínico** a partir de **anhídrido maleico**, ya que uno de los muchos usos del anhídrido succínico es precisamente la fabricación de biopolímeros.

2.3 Moléculas de estudio: anhídrido maleico (MA) y anhídrido succínico (AS)

Se va a partir del anhídrido maleico para dar anhídrido succínico porque el anhídrido maleico se puede obtener con nuevas tecnologías desde biomasa. Primero, la biomasa se separa en sus componentes principales y se obtiene hemicelulosa, celulosa y la lignina. Del conjunto que forma la hemicelulosa (sobre todo de la xilosa, que es una pentosa) se puede obtener furfural[2], que por medio de una oxidación genera anhídrido maleico, incluso según las condiciones que se impongan a la reacción se puede conseguir ya ahí **ácido succínico**[3].

Si se hidrata el anhídrido succínico con agua se obtiene su forma hidratada, el ácido succínico, al igual que se puede deshidratar a una temperatura muy elevada para devolverlo a su forma anhidro.

El anhídrido y el ácido succínico son, por tanto, *platforms molecules* en cuanto a la parte en la que son de procedencia vegetal, pero, además, son compuestos de interés industrial al poder sustituir a otras moléculas de origen fósil, ya que son capaces de reaccionar de diferentes maneras para dar muchos productos de interés (ver *Figura 1*):



Figura 1. Introducción. Moléculas de estudio: Esquema de derivados del ácido succínico [4].

Cumple de esta forma todos los criterios para poderla calificar como *platform molecule*. Sin embargo, esta facilidad de poder reaccionar de diferentes maneras hace que se tengan que desarrollar procesos muy concretos para cada producto final y para la propia obtención del succínico, siendo muy probable que se den subproductos. En el caso de este trabajo se comprobará que se obtiene además de succínico, el subproducto γ -butirolactona (GBL), lo cual no es del todo un problema porque también tiene utilidad y valor en el mercado. La bibliografía es extensa en cuanto a los usos que se le puede dar al succínico aparte de poder servir como monómero para biopolímeros

La tabla 1 resume los principales usos que se le pueden dar al succínico:



Tabla 1. Introducción. Moléculas de estudio: Derivados del succínico. Extracto de Kirk-Othmer enciclopedia of Chemical

Technology. Página 539-540 (Vol 22) [5]

Use		
	Adhesives and sealants	
hot-melt adhesives		
adhesive primers for aluminized surfaces		
	Agriculture	
plant growth regulators		
herbicide compositions		
fungicides		
pesticidal effervescent granules		
msecucides mosquito attractante		
mosquito attractants	Building and construction	
cement additives and cement compositions	Dimang and tonorminon	
asphalt paving materials		
	Ceramics	
manufacture of porous titanium oxide		
manufacture of sinterable boehmite powder		
manufacture of porous ceramics		
	Coating, pigments, dyes, inks	
coating compositions		
automobile topcoats		
powder coating		
radiations, uv-curable coating compositions		
topore		
quinacridone pigments		
dve intermediates		
uye interinetiates		
	Polymers and resins	
biodegradable polymers		
biodegradable packaging foams		
curing agent for epoxy resins		
epoxy elastomers		
preparation of liquid crystals		
modified polyamides		
water-soluble polymers		
	Textiles and fibers	
finishes for silk or cellulosic fabrics		
dyeing aids for cotton or polyamide fibers		
succinvlation of silk		
wet strengthening agents		
adhesive composition for textile laminates		
textile bleaching agents		
	Water and gas treatment	
bactericide tablets for swimming pools		
algicide compositions		
treatment of water for use in beauty parlor		
liue gas desulturization		
an purnication and disinfection	Miccollowoor	
catalyst manufacture	<i>INIISCEIKANEOUS</i>	
fireproofing aids		
wood treatment		
superconductor manufacture		
electrolyte for lithium batteries		
leather manufacture		
animal feeds		

Se puede observar que los usos del anhídrido succínico y su ácido son muy extensos, es una sustancia muy versátil que puede llegar a tener su aplicación en muchos campos y procesos de fabricación. Se destacó anteriormente los polímeros, pero realmente cualquier campo sería digno de estudio. Es por todo esto que es necesario la realización de memorias científico-técnicas como la presente que evalúen la viabilidad técnica y económica de sus diferentes rutas de producción.

2.4 Antecedentes: Evolución del proceso de fabricación del anhídrido succínico.

Ha habido dos grandes vertientes en el método de fabricación del ácido o anhídrido succínico: vía petroquímica y por medio de biomasa. La vía petroquímica fue la primera, generalmente hidrogenando

el maleico en estado líquido, con catalizadores que poseen níquel, u otros catalizadores más activos como paladio, con soportes variados (alúmina, sílice...), y normalmente temperaturas de 120 a 180°C. El medio es en reactores trifásicos de lecho fijo, y como la reacción es exotérmica se debe ir capturando el calor para mantener condiciones isotermas (*Vol 22, pág 537*[5]).

El ácido o el anhídrido succínico fue calificado por el departamento de energía de Estados Unidos como un compuesto de gran interés ya desde 2004, matizando, de los diez más importantes procedentes de la biomasa. En la primera vía a partir de biomasa, el ácido levulínico hacía de precursor, pero no era rentable económicamente, se analizó en 2006 que esta vía solo sería rentable si subía demasiado el precio del petróleo y bajaban los precios de producir o comprar la biomasa[6].

La producción de succínico desde materias primas de origen renovable se desarrolló más por el pico que se dio en los precios del petróleo en 2007, y la posterior crisis del 2008: la vía petroquímica no era tan rentable. Se puede observar en la Figura 2 esta evolución en las vías de producción:



Figura 2. Introducción. Antecedentes: Producción de ácido succínico mundial en toneladas por año [6].

Se observa que para el año 2015 ya se asumía una producción anual de 180000 t/a. El crecimiento se podría considerar exponencial en el caso de la vía fermentativa, mientras que la petroquímica ha sido lineal y con una pendiente muy baja en comparación. Es digno de mención que en España haya construida una planta que produce por medio de la vía fermentativa 10000 t/a[7].

La vía fermentativa presenta como problema principal las cantidades tan diluidas de producto que se obtienen, encareciendo las operaciones de separación y de purificación del producto. Esto se debe a que los fermentadores, como reactores biológicos que son, funcionan mejor con sustrato muy diluido para la biomasa, además de necesitar niveles de pH concretos (neutro o levemente ácido para la formación del succínico). Por ejemplo, algunas de las bacterias que producen ácido succínico de forma natural vía fermentativa son algunas cepas de *Anaerobiospirillum succiniproducens, Actinobacillus succinogenes, Mannheimia succiniproducens*, o cepas modificadas de *Escherichica coli*[4].

Actualmente, como el anhídrido y ácido maleico se puede producir más fácilmente a partir de biomasa por vías químico-catalíticas como se explicó en el apartado anterior, hay una oportunidad nueva de mercado que consiste en volver al proceso de producción en el que se sigue utilizando maleico como sustrato, pero siendo este maleico de origen no fósil. Este es el proceso elegido en el presente proyecto.



3 Objetivos.

El propósito de este TFG es diseñar una solución técnica al proceso industrial para producción de anhídrido succínico a partir de anhídrido maleico e hidrógeno. El desarrollo viene sucedido de la consecución de los siguientes objetivos:

- Definir la capacidad de producción de la planta y los límites de batería para conocer las entradas y salidas de las materias primas, disolvente y producto.
- Analizar el comportamiento de la reacción química que tiene lugar, puesto que el reactor es el corazón de la planta química, y la optimización de sus condiciones de operación será crítica para el resto de los equipos y el proyecto en sí mismo.
- Representar el diagrama de proceso de la planta cuando opera en estado estacionario asegurando que se cumple el balance de materia y energía.
- Optimizar económicamente el acondicionamiento de las corrientes y las operaciones de separación teniendo muy en cuenta los costes variables, puesto que en toda la vida de la planta suelen impactar más que los propios equipos.
- Diseñar mecánicamente los equipos del proceso, además de calcular su coste.
- Evaluar la rentabilidad económica del proyecto a través del cálculo del Valor Actual Neto (VAN), de la Tasa Interna de Retorno (TIR), y la representación del periodo de recuperación de la inversión (Payback).

4 Solución técnica/resultados.

4.1 Requisitos de diseño

Para poder diseñar con criterio, además de darle cohesión y coherencia a la solución técnica, se deben exponer unas consideraciones iniciales, las cuales comprenden desde la capacidad de producción objetivo hasta describir el sistema de unidades o la notación empleada, entre otros.

4.1.1 Capacidad de producción y condiciones límite de batería

La **capacidad** de la planta escogida va a ser de **16.667 toneladas por año** de producción de anhídrido succínico con **pureza** mínima al **99%**. También tendrá un **99%** de **recuperación** su operación de separación. Se ha escogido esa capacidad de producción atendiendo a tres razones:

- En Estados Unidos la capacidad mínima rentable es de 10000 t/a, y la máxima de 30000 t/a, por lo menos para la vía fermentativa. Esto ofrece un rango orientativo de cuánto debería ser la capacidad[8].
- En España ya existe una fábrica de 10000 t/a como se expuso en la introducción, por lo que no es descabellado una de igual tamaño o superior[7].
- Normalmente en la industria se toma un valor mínimo con el que pueden operar los equipos que corresponde al 60% de caudal de normal de diseño, si se tomase el mínimo valor de 10000 t/a (60%), el 100% sería:

$$F = \frac{10000 \ ton/a}{60} \cdot 100 = 16667 \ ton/a$$

Como este resultado se queda por debajo del máximo de 30.000 t/a, se considera razonable. Además, queda cerca del valor medio en Estados Unidos (que serían las 20000t/a).

Esto sería atendiendo a que el rendimiento de la reacción del anhídrido maleico e hidrógeno para dar succínico fuese del 100%, la producción final atenderá a criterios económicos que se verán en el estudio del reactor (4.4.4) y del destilador (4.4.8), pero aun así el proceso garantizará una producción de 10000 t/a que suponen el criterio mínimo fijado.

Las materias primas son anhídrido maleico e hidrógeno, y el producto de salida es anhídrido succínico. Se van a considerar parte del ISBL (Límite interior de batería) las líneas de tuberías, pero no los propios tanques de almacenamiento de materias primas y productos de la unidad, los cuales van a pertenecer al OSBL (Límite exterior de batería). Se utilizará también como disolvente no reactivo anhídrido acético, este deberá aportarse fresco en una pequeña cantidad cuando la instalación opera con recirculación (puesto que la mayor parte se recircula). La *Tabla 2* muestra las condiciones límite de batería:

Tabla 2. Condiciones límite de batería materias primas, el disolvente, producto y subproducto.

	P (Kg/cm ² g)	T (ºC)
Anhídrido maleico	0	25
Anhídrido acético	0	25
Hidrógeno	0	25
Anhídrido succínico	0	139,8

El anhídrido maleico se recibe en estado sólido en forma de pellets, en bolsas de 25 kg en paquetes grandes de 1136 kg. Las bolsas son de polietileno, y se puede almacenar sin problemas en un entorno seco y fresco[5].

Para disolverlo es necesario meterlo en un mezclador con el anhídrido acético caliente y llegar a una proporción de 2kg de acético por cada 1kg de maleico. Se van a tomar como condiciones iniciales las atmosféricas: 1 atm de presión y 25°C de temperatura, y se sabe que por encima de aproximadamente 50°C el maleico pasa a fase líquida, lo que facilitará la disolución y justifica calentar previamente el anhídrido acético y utilizar un mezclador.

En cuanto al gas, inicialmente se va a partir de hidrógeno en condiciones atmosféricas (25 °C y 1 atm) para poder tener en cuenta los costes que conllevarían su compresión. Después del reactor el hidrógeno se separa de los demás compuestos y se recircula (se trabaja con exceso de hidrógeno), y se debe seguir incorporando la parte que se consume en el reactor (aproximadamente un 30% de lo que entra).

Se destaca que los tanques que deberían existir en la planta de almacenamiento de hidrógeno (como esfera), y del anhídrido acético (como cilindro), también van a considerarse parte del OSBL, del primero porque parte de lo que conllevaría el coste de tener hidrógeno comprimido se traduce en los compresores del proceso (K-101 y K-102), y porque del acético fresco se necesita muy poca cantidad cuando se opera en estacionario y podrían considerarse opciones como un camión cisterna para la puesta en marcha y un recipiente pequeño para la producción habitual.

4.1.2 Reacción química: Cinética y termodinámica

• Cinética:

Las reacciones químicas que se van a llevar a cabo en el reactor se esquematizan en la Figura 3:



$$C_2H_2(CO)_2O+H_2\rightarrow (CH_2CO)_2O+2H_2\rightarrow C_3H_6(CO)O+H_2O$$

Figura 3. Reacción química: MA con H_2 para dar SA, y SA con $2H_2$ para dar γ -BL y H_2O

Se observa que si se sigue hidrogenando el succínico obtenido se puede obtener γ -BL. Para este trabajo se han elegido unas condiciones que eviten la formación de γ -BL: temperatura igual o inferior a 100°C en presencia de disolvente (anhídrido acético) y catalizador Níquel Raney.

La cinética se ha calculado con los datos extraídos del siguiente estudio: *Selective hydrogenation of maleic anhydride catalyzed by metallic nickel catalyst*[9], donde se dispone de gráficas que relacionan la conversión con el tiempo. Como se especifican datos de concentración inicial del maleico, y la presión controlada del sistema, con Aspen se ha podido calcular la concentración en líquido del hidrógeno y del maleico para cada experimento. Los datos empleados para el ajuste cinético se muestran en la *Tabla 3*

Tabla 3. Cinética química: Datos obtenidos del artículo (tiempo y conversión a una temperatura dada) y de Aspen (concentración del anhídrido maleico (A) y de H_2 y volumen en líquido) a 25 bar de presión.

Temperatura (Cº)	Tiempo (s)	X _{MA}	C _{MA} (mol/L)	C _{H2} (mol/L)	Volumen (L)	-Ln (1-X)	
	1800	0,03	3,62			0,03	
	3600	0,07	3,49	2.005.00		0,07	
60	7200	0,21	2,97		0.425	0,24	
60	10800	0,24	2,87	2,082-00	0,155	0,28	
	14400	0,27	2,76			0,32	
	21600	0,29	2,71			-	
	1800	0,10	3,35			0,10	
	3600	0,26	2,78			0,30	
70	7200	0,54	1,77	2 765 06	0 1 2 2	0,78	
70	10800	0,73	1,07	2,702-00	0,133	1,29	
	14400	0,81	0,76			1,65	
	21600	0,83	0,67			-	
	1800	0,23	2,86		0.122	0,26	
	3600	0,55	1,72	- 3,55E-06		0,79	
80	7200	0,70	1,14			1,22	
80	10800	0,84	0,64		0,132	1,81	
	14400	0,93	0,26			2,71	
	21600	0,96	0,15			3,30	
	1800	0,67	1,27		-06 0,131	1,10	
	3600	0,84	0,63			-	
90	7200	0,92	0,32	4 51E-06		2,51	
50	10800	0,96	0,14	4,512-00		3,30	
	14400	0,99	0,03			4,91	
	21600	1,00	0,00			-	
	1800	0,81	0,71			1,69	
	3600	0,93	0,29				2,60
100	7200	0,97	0,11	5 595-06	0 132	3,52	
100	10800	0,98	0,09	3,392-00	19 5,552-00 0,152	0,132	-
	14400	1,00	0,00			-	
	21600	1,00	0,00			-	

Nota 1. Se toman las concentraciones en la fase líquida porque la reacción ocurre en esta fase. Eso limita la velocidad de reacción a la solubilidad del hidrógeno en la disolución,

La cinética de una reacción siempre aumenta con la temperatura, en este experimento además la concentración de hidrógeno en la fase líquida aumenta también, comportamiento anómalo para los gases, pero que ayuda a una mayor velocidad de reacción.

A partir de los datos de la *Tabla 3* se representar la función $-\ln(1-X)$ frente al tiempo (modelo pseudohomogéneo de orden 1), obteniéndose las constantes para cada temperatura (en s⁻¹) (ver *Figura 4*).



Figura 4. Cinética química: Gráfica para la constante cinética de 1er orden de reacción en cada punto de temperatura.

Se observa que se obtienen buenos ajustes ($R^2 > 0.95$ en todos los casos). Se han evitado escoger los puntos correspondientes a muy altas conversiones para las diferentes temperaturas.

Se pueden extraer con estos datos de pendientes las constantes cinéticas en función de la masa de catalizador para cada temperatura de la siguiente forma (ejemplo para 60°C):

$$K_{1,60^{\circ}C} = \frac{2,47 \cdot 10^{-5} \frac{1}{s}}{\frac{2,5g}{0.135L}} = 1,33 \cdot 10^{-6} \frac{L}{g \cdot s}$$

Donde 2,5 g es la cantidad de catalizador empleado en este experimento, según la referencia [9],

Por otro lado, se puede pasar a segundo orden considerando la concentración de hidrógeno disuelto en el líquido (que depende de la temperatura y presión). Así, en vez de tener que operar el reactor irremediablemente a 25 bares (exceso suficiente de hidrógeno que permita asumir una cinética de primer orden), se puede estudiar económicamente tener el reactor en condiciones menos severas.

$$K_{2,60^{\circ}} = 1,33 \cdot 10^{-6} \frac{L}{g \cdot s} \cdot \frac{1 L}{2,08 \cdot 10^{-6} \ mol \ H_2} = 0,64 \frac{L^2}{g \cdot mol \cdot s}$$

La tabla 4 muestra los datos obtenidos.

Tabla 4. Cinética química: Datos para representar las gráficas que linealizan la ecuación de Arrhenius.

Temperatura (Cº)	K (L/(g·s))	k (L ² /(g ·mol· s))	Ln K (orden 1)	Ln k (orden 2)	1/T (K)
60	1,33E-06	0,64	-13,53	-0,45	-3,00E-03
70	6,03E-06	2,18	-12,02	0,78	-2,91E-03
80	8,73E-06	2,46	-11,65	0,90	-2,83E-03
90	1,75E-05	3,87	-10,95	1,35	-2,75E-03
100	2,93E-05	5,24	-10,44	1,66	-2,68E-03



Con estos datos, y utilizando la ecuación de Arrhenius se calcula el factor pre-exponencial (representación en *Figura 5*)



Figura 5. Cinética de la reacción: Gráfica para realizar Arrhenius con la cinética de 2º orden

Se observan buena linealidad en la gráfica, con un $R^2 > 0,98$. El factor pre-exponencial corresponde al punto de ordenadas en ambos casos (solo hay que deshacer el logaritmo natural), mientras que para la energía de activación hay que hacer el siguiente cálculo (ejemplo para orden 2, *Ecuación 1*):

$$K = A \cdot e^{-\frac{Ea}{R \cdot T}} \qquad \qquad Ln \, K = Ln \, A - \frac{Ea}{R \cdot T}$$

Ecuación 1. Cinética química: Ecuación de Arrhenius y linealización

$$\frac{Ea}{R} = m \quad \rightarrow \quad Ea = R \cdot m = 8,314 \cdot \frac{10^{-3}}{10^{-3}} \cdot 6,67 \cdot \frac{10^{3}}{mol} = 55,45 \frac{kJ}{mol}$$

Los resultados obtenidos se resumen en la siguiente Tabla 5:

Tabla 5. Cinética química: Energía de activación y factor pre-exponencial de las cinéticas de reacción

Reacción	Ln A	Α	Ea (KJ/mol)
Orden 2	19,65	3,42E+08	55,45

Para poder medir el efecto que tiene la presión sobre la concentración del hidrógeno disuelto y la velocidad de reacción, se escogerá trabajar con la reacción de segundo orden, porque de escoger la cinética de primer orden, solo se podría trabajar a 25 bar, y conviene realizar un estudio económico a diferentes presiones.

Se destaca la importancia de este parámetro (la presión) sobre la reacción porque al ser una reacción que sucede en la fase líquida, el hidrógeno debe encontrarse disuelto para poder reaccionar con el anhídrido maleico. Esta es una de las razones también por las que la selección del disolvente puede ayudar a la conversión del succínico: este no interviene directamente en la reacción, pero ayuda que el hidrógeno pueda estar presente en mayor proporción en la fase líquida.

Como apreciación, cuando se decide no tener disolvente y que la fase líquida la aporte el propio maleico fundido a una temperatura superior a 120°C (temperatura a la que el succínico se funde), se puede

conseguir que ocurra la reacción, pero esta opción no se ha escogido porque las condiciones son más severas (mayor temperatura) y porque se puede tener γ -BL como subproducto, y eso disminuiría la selectividad hacia el succínico, el cual es el compuesto objetivo, por lo que a priori sería peor opción.

• Termodinámica

La termodinámica de la reacción de anhídrido maleico a anhídrido succínico es descrita por la siguiente entalpía de reacción:

$$H_r = -133,89 KJ/mol$$

Se aprecia con esta entalpía de reacción que es una reacción exotérmica. Esto es algo a tener en cuenta para el diseño del reactor, puesto que significa que se deberá refrigerar ya que se quiere mantener a una temperatura constante para que la reacción suceda en condiciones isotermas.

Para trabajar en continuo, el reactor típico idóneo suele ser un reactor trifásico de lecho fijo tubular o bien dos o tres reactores en serie de tanque agitado con el catalizador suspendido[5]. Se elegirá trabajar con un lecho fijo multitubular porque suponen en general menos masa de catalizador y de volumen necesario total para alcanzar la misma conversión que un tanque agitado.

4.1.3 Catalizador Níquel-Raney

El coste del catalizador ha sido calculado a partir de los costes individuales de los metales que componen la aleación: aluminio y níquel, en proporción 53:47 en peso respectivamente. Para calcular la densidad resultante de la aleación se ha calculado el volumen específico de la aleación y se ha pasado a densidad. Los cálculos son los siguientes:

$$C_{aleación} = \frac{\left(C_{aluminio} \cdot 53 + C_{niquel} \cdot 47\right)}{100} = \frac{2,501 \frac{\notin}{kg} \cdot 53 + 27,325 \frac{\notin}{kg} \cdot 47}{100} = 14,168 \frac{\notin}{kg}$$

$$V'_{aleación} = V'_{aluminio} \cdot 0,53 + V'_{niquel} \cdot 0,47 = \frac{1}{\rho_{aluminio}} \cdot 0,53 + \frac{1}{\rho_{niquel}} \cdot 0,47$$

$$V'_{aleación} = \left(\frac{1}{2698} \cdot 0,53 + \frac{1}{8908} \cdot 0,47\right) \frac{m^3}{kg} = 2,49 \cdot 10^{-4} \frac{m^3}{kg}$$

$$\rho_{aleación} = \frac{1}{V'_{aleación}} = \frac{1}{2,49 \cdot 10^{-4} \frac{m^3}{kg}} = 4012,79 \frac{kg}{m^3}$$

- Donde C representa el coste, V' el volumen específico, y ρ es la densidad.

Para conocer el coste de los metales se tuvo en cuenta el precio que marcaba la *Bolsa de metales de Londres*[10]. Se escogieron los precios que marcaban para agosto de 2023, el precio parecía sobreestimado sobre todo para el níquel, el cual se encuentra a un precio bastante más bajo actualmente.

Por lo que se considera no tener en cuenta los costes de fabricar la aleación, al ya estar sobreestimado el precio de las materias primas. Los resultados obtenidos se resumen en la *Tabla* 6:

Tabla 6. Catalizador Níquel-Raney: Precio y densidad

	Metale	s puros				
	Coste (\$/kg)	Densidad (kg/m ³)	Ratio másico (Ni/Al)	Precio (\$/kg)	Volumen específico (m^3/kg)	Densidad (kg/m ³)
Aluminio	2,50	2698	47.52	14 17	2 405 04	4010 70
Niquel	27,33	8908	47.55	14,17	2,492-04	4012,79

4.1.4 Sobredimensionamiento de los equipos

Se va a diseñar con un determinado margen sobre la capacidad normal de cada equipo, en concreto:

- Las bombas podrán impulsar un 10% o un 20% más de caudal dependiendo de si son para impulsar carga y productos o son las de reflujo del destilador multietapa respectivamente.
- El separador de membrana y los intercambiadores de calor tendrán un 10% más de superficie de la necesaria.
- Los recipientes tendrán un volumen de líquido calculado con un caudal un 10% mayor y el tiempo de residencia típico que le corresponda.
- Los recipientes contarán con un 15% más de masa de lo estipulado que la utilizada por el espesor mínimo necesario que se calcule.
- El destilador multietapa tendrá un diámetro acomodado a un porcentaje de la velocidad de arrastre en caso normal (75%) y de diseño (82,5%).

Como particularidad, los compresores de por sí ya están sobredimensionados (el hidrógeno se impulsa con una relación ya superior a la estequiométrica), y por lo tanto no hace falta diferenciar un caudal de diseño diferente al normal como es en el caso de las bombas.

4.1.5 Servicios auxiliares

Los servicios auxiliares consisten en el agua de refrigeración y el agua para obtener vapor de calefacción, gas natural utilizado como combustible en la caldera, y la electricidad que se consume. El coste económico de estos servicios auxiliares se tendrá en cuenta y ha sido detallado en el *anexo III*. El resumen de los costes de cada servicio auxiliar se presenta en la *Tabla 7*:

Tabla	7	Sorvicios	auviliaroc	Dracia	nor	concumo
rubiu	7.	SELVICIOS	uuxiiiures.	PIECIO	ροι	consumo

Electricided (6/MM/h)			Agua	
Electricidad (€/IVIVVN)	Gas (€/GJ)	Sin tratar (€/kg)	Desmineralizada (€/kg)	Refrigeración (MWh/kg)
71,52	4,38	1,97E-03	3,94E-03	3,95E-07

La electricidad se va a utilizar para todas las máquinas que funcionan con energía eléctrica (bombas, compresores, etc). El gas se empleará como combustible para la caldera, produce vapor de calefacción con agua desmineralizada para acondicionar las corrientes que deben calentarse.

Por otro lado, el agua de refrigeración lleva asociado un consumo eléctrico de las bombas que la impulsarían (estas no se diseñan al tratarse de servicios auxiliares y ser parte del OSBL, junto a la caldera), pero se atiende al valor de consumo de la bibliografía.

Para facilitar los cálculos posteriores, se ha detallado también en el mismo anexo (*III*) además del coste de utilizar vapor de calefacción (a alta, media y baja presión), el de agua de refrigeración por unidad de energía calorífica[11]. Se presenta un resumen de estos costes en la *Tabla 8*.

Tabla 8. Servicios auxiliares. Costes auxiliares: Coste por kW captado (refrigeración) o cedido (vapor de calefacción)

Agua		Vapor	
Refrigeración (€/año·kW)	A baja presión (€/año·kW)	A media presión (€/año·kW)	A alta presión (€/año·kW)
35,42	175,42	175,67	176,28

4.2 Diagrama de proceso simplificado: Explicación y esquema

El proceso industrial (*Figura 6*) contiene dos entradas de materias primas (anhídrido maleico e hidrógeno puro), una entrada de disolvente fresco (anhídrido acético), y una salida de producto (anhídrido succínico). Se va a describir el funcionamiento de la planta cuando esta opera con la recirculación de anhídrido acético e hidrógeno, pues esto será la mayor parte del tiempo de operación de esta (99% del tiempo), pese a que pueden cambiar ligeramente los caudales y composiciones a cuando es la puesta en marcha. Se ha desarrollado más detenidamente en el punto 7.1.1. la descripción de la puesta en marcha.

El balance de materia y energía se ha comprobado con *Aspen Plus*, por lo que, poniendo los datos iniciales de las corrientes, el mezclador (M-101), la conversión del reactor (R-101), los caudales de calor intercambiados (los E-10X), las características del separador L-G (C-101), del destilador (C-102), y del separador de membrana (M-102), deberían poderse replicar los mismos resultados que en la *figura 6*.

Los datos que aparecen de presión en las corrientes se refieren a la presión de entrada al equipo al que apunta la flecha, o en el caso en el que se unan varias líneas será a la presión a la que llegan antes de juntarse las corrientes.

La corriente número (n°) 0 es una entrada de 2032 kg/h de anhídrido maleico sólido a 25°C que entra directo al mezclador M-101. Este fundiría a los 50°C, facilitando su disolución en el disolvente. Por lo que la mezcla de las corrientes del caudal de acético fresco (15kg/h) (n°1) junto a las del acético recirculado (66 kg/h) del separador de membrana M-102 (n° 31), y del acético (4038 kg/h) proveniente del destilador C-102 (n° 32), deben resultar en una corriente superior a esa temperatura.

De hecho, la temperatura resultante del mezclador M-101 es de unos 71°C. La presión a la que se debe llegar en el mezclador es 1 atm por lo que se deberán utilizar bombas para salvar la distancia y el rozamiento de la línea. Se considera que el equipo está presurizado con un gas inerte a una atmósfera de presión.

La corriente n°32 que viene del destilador C-102 es de 8 kg/h de maleico, 20 kg/h de succínico, y el resto (4010 kg/h) es de acético. A este acético se le suman los 66 kg/h de la salida del separador de membrana para resultar junto a los 15 kg/h de la corriente n° 3 en una composición de salida de una parte en masa de maleico por cada dos de acético (6151 kg/h en total), esta se impulsa con una de las bombas G-102A/B (una es de repuesto), y se eleva la corriente 2°C por la fricción mecánica de la bomba.

La presión a la que debe llegar al reactor R-101 es de 16,5 bares, porque inicialmente el equipo se diseñó para que pudiese perder hasta 1,5 bares como holgura (10% de pérdida). Por motivos económicos tratados en la optimización del reactor (4.4.4.) solo se pierden unos 0,7 bares de presión.

El reactor R-101 alcanza una conversión superior al 99. La salida son prácticamente dos fases, por lo que se utiliza el separador Líquido-Gas C-101 para separar prácticamente todo el hidrógeno que queda después de la reacción (105 kg/h) con arrastre de 66 kg/h de acético en fase gas. Por otro lado, salen como líquido por fondo del recipiente el escaso maleico que ha quedado sin reaccionar, más el succínico y el acético.

Este caudal de fondo es de 6127 kg/h, presenta una composición del 65,7% de acético, del 34% para el succínico, y un 0,3% de maleico. Esta corriente (n°18) se precalienta en el intercambiador E-105 con la corriente de fondo del destilador C-102 para aprovechar su energía. Al ser casi un 66% acético se ponderó con ese valor la presión del fondo y cabeza, además de calcular el piso de alimentación y temperatura de entrada óptima, para respetar el equilibrio térmico, mecánico y de composición.

El intercambiador E-106 debe aumentar la temperatura de la corriente alimento del destilador hasta 200°C, y por pérdida de presión entre el intercambiador y la elevación hasta el piso del plato, parte del anhídrido cambia de fase y disminuye la temperatura del alimento hasta los 189°C.

Del condensador total (D-101) del destilador (C-102) sale la corriente (n°23) que pasa por la bomba G-103A/B que impulsa el reflujo a columna (n°25) y la parte que se recircula (n°32), que conecta con la salida del separador de membrana (M-102, n°31) para formar el recirculado total (n°33) que se dirige al mezclador (M-101) y que ayuda a elevar la temperatura y a fundir al maleico. Por fondo sale el producto que va al intercambiador E-105 que se ha mencionado anteriormente que sirve como precalentador del alimento del destilador.

Por otro lado, el hidrógeno y acético que salieron del separador L-V como gas se separan en un separador de membrana, el M-102. El acético al separarse del hidrógeno se condensa y pasa a fase líquida y se recircula al mezclador M-101. El hidrógeno por su parte se recircula a los compresores K-101 y K-102, aunque previamente se refrigera en el E-103, y después del primer compresor también se refrigeran en el E-104 el conjunto de hidrógeno fresco e hidrógeno recirculado.

El cambio respecto a cuando se opera en la puesta en marcha es que se necesita calentar todo el disolvente en el E-101 hasta 113°C para que al mezclarse con el maleico esto resulte en 50°C de

temperatura. También se emplea el E-102 para calentar esta mezcla antes de juntarlo con el hidrógeno previo al reactor para que resulte en los 100°C necesarios. Estos intercambiadores se pueden emplear para realizar pequeños ajustes de control de temperatura si ocurren fluctuaciones operativas, pero en principio por el diseño que contempla la integración energética del proceso dejan de necesitarse en estado estacionario.

Por otro lado, no puede emplearse durante la puesta en marcha el E-105 porque aún no ha salido el fondo del destilador, por lo que el E-106 debe dimensionarse de tal forma que pueda cubrir la puesta en marcha.

Las composiciones en sí son muy parecidas para la puesta en marcha y la operación en continuo, con la salvedad de que en estado estacionario se tiene succínico en las corrientes de recirculado y una menor cantidad de maleico. A cambio, sale más producto al mantener el 99% de pureza y 99% de recuperación en el C-102 en estado estacionario.

En total, se producen 2087,44 kg/h de succínico al 99% molar (98,99% másico), que equivalen a prácticamente 16700 toneladas por año. Por lo que queda cumplido el objetivo de acercarse al valor estimado inicial de 16667 toneladas por año.

Figura 6. Diagrama del proceso



18

4.3 Programa de cálculo: Aspen Plus. Modelo termodinámico.

• Aspen Plus.

Es un programa de cálculo que facilita en gran medida la resolución de los balances de materia y energía, por lo que se va a utilizar como ayuda en el diseño y la simulación de los equipos y procesos. Es importante mencionar que los resultados siempre serán matemáticamente correctos, pero no quiere decir que tengan sentido físico, por lo que hay que tener cierto criterio y saber discernir si los resultados obtenidos con *Aspen* son válidos.

El punto de partida del programa es añadir los compuestos involucrados en el proceso, y además conocer en qué condiciones se va a operar con ellos. El conjunto de ambas cosas determinará el modelo termodinámico idóneo con el que *Aspen* predecirá los datos de forma más fiable y acorde a la realidad.

• Modelo termodinámico.

Se ha utilizado al asistente informático de *Aspen* para elegir el mejor modelo. Se ha decidido utilizar el modelo termodinámico *NRTL* (el cual es apropiado para las reacciones químicas, basado en coeficientes de actividad). El método *NRTL* además permite tener compuestos polares y no polares, aunque se den en situaciones muy poco ideales, lo cual es el caso de la mezcla que se tiene.

Para los ácidos carboxílicos *Aspen* recomienda modificar el *NRTL* con los modelos *Hayden-O'Connel* o el *Nothnagel*, pero estos se ven también limitados a requerir una presión menor a 15 bar. Sin embargo, se quiere evaluar que el reactor opere entre los 15 y los 25 bares de presión. Por lo tanto, se ha decidido implementar el *NRTL-RK* de Aspen (*NRTL* modificado con *Soave-Redlich Kwong*), el cual ayuda a predecir mejor el comportamiento a presiones más intermedias.

Para el resto de los equipos, si poseen una presión inferior a los 15 bar, se utilizará indistintamente el modelo de *Hayden-O'Connel* o el *Nothnagel*, pues ambos podrían representar fielmente la realidad.

4.4 Diseño de Equipos

4.4.1 Información previa para el cálculo de costes

El diseño de los equipos ha sido optimizado a partir de minimizar sus costes, los cuales determinan sus dimensiones y características.

Los costes de los equipos han sido calculados de forma aproximada basándose en los costes recogidos por la *US Gulf Coast Basis* de enero de 2007 (*Chemical Engineering index* CEPCI=509,7). Según se indica en la bibliografía [11] para trabajos fin de grado son buenas aproximaciones si no se dispone de catálogos reales de empresas. Esa bibliografía [11] utiliza la *Ecuación 2*.

$$C_e = a + b \cdot S^n$$



Ecuación 2. Equipos. Información previa: Cálculo del coste de los equipos según la US Gulf Coast Basis, 2007

Donde:

 $-C_e$: Es el coste del equipo en 2007 según el índice de precios en Estados Unidos (\$).

-a y b: Son constantes de costes

-S: Es el parámetro del tamaño (unidades que dependen del equipo)

-n: Exponente para cada tipo de equipo

La consulta de los datos de los parámetros a, b, S y n para cada equipo se detalla en el *anexo II*. Se toma como ejemplo de cálculo el coste de los compresores de tipo pistón:

Para tomar un ejemplo de cálculo, se adelantan datos que se desarrollarán más adelante en el apartado de los compresores (4.4.3 y 4.4.4.1), se tiene una primera etapa de un compresor que necesita una potencia de 124,70kW, por lo tanto:

$$C_{e,acero\ al\ carbono} = 220000 + 2300 \cdot (124,70)^{0,75} = 305827,33$$
 (acero al carbono)

En los casos en los que se disponga de los parámetros directos para los costes de un equipo diseñado con acero inoxidable 304 se aplicarán esos. En los casos en los que no, se empleará la relación mostrada en la *ecuación 3* entre el coste del acero inoxidable y el coste de acero al carbono.

 $C_{e,acero\ inoxidable\ 304} = C_{e,acero\ al\ carbono} \cdot 1,30$

Ecuación 3. Equipos. Información previa: Relación entre el acero inoxidable 304 y el acero al carbono

También se puede utilizar una relación para aproximar el precio a la localización geográfica. De España no se dispone un factor, por lo que se empleará el de Francia (localización más próxima). La relación corresponde a incrementar al coste anterior un 13%. Finalmente se tendrá que pasar al curso monetario de España, el euro.

$$C_{e,acero\ inoxidable\ 304, \text{España}} = 305827, 33\$ \cdot 1, 30 \cdot 1, 13 \cdot \frac{0, 92 \notin}{\$} = 413319, 52 \notin$$

4.4.2 Bombas (G-101-A/B, G-102-A/B y G-103)

Las bombas han sido calculadas atendiendo una carga neta positiva de aspiración de 3,5*m*. Por lo que se han situado los recipientes anteriores a las bombas a unas alturas determinadas para que las bombas no sufran de cavitación. Dado que la gravedad relativa de la disolución alimento respecto al agua es cercana a 1, y la viscosidad es menor a la del agua se va a interpretar que se puede trabajar con curvas de bombas características para el agua. Realmente el único cálculo es el de cuantificar la altura a la que debe ir la bomba además de calcular sus costes, por lo que se dejan en anexos las fichas básicas de las bombas y su explicación al ser equipos sencillos (*anexo IV*).

4.4.3 Compresores (K-101 y K-102)

Los compresores K-101 y K-102 acondicionan la presión de la corriente alimento de hidrógeno y contribuyen en gran medida los costes variables de la instalación. Se ha seguido la guía sugerida por Ray Sinnot y Gavin Toweler [11], quienes recomiendan el documento *Select the right compressor*[12].

En este apartado se disponen los cálculos de los trabajos y los costes asociados de operación y del equipo. Por otro lado, en el *anexo I* se explica la decisión de por qué un compresor de tipo pistón.

• Ecuaciones de diseño y resultados

Una vez reflejada la elección de un compresor que funciona de forma isentrópica, se utilizan las ecuaciones del cálculo de trabajo isentrópico teórico ($W_{i,t}$). Se ha estimado una pérdida de presión del 2% de la presión de entrada para cada tramo entre compresores teniendo en cuenta que la corriente de hidrógeno se refrigera en cada etapa en un intercambiador de calor. La *Ecuación 4* muestra el trabajo isentrópico teórico realizado.

$$W_{i,t} = Z \cdot \frac{R \cdot T_1}{M} \cdot \frac{\gamma}{\gamma - 1} \cdot \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma - 1}{\gamma}} - 1 \right]$$

Ecuación 4. Compresores K-101 y K-102: Trabajo isentrópico teórico

-Z y M: Factor de compresibilidad del compuesto y masa molar del compuesto respectivamente, el hidrógeno en las condiciones de operación se puede considerar un gas ideal con Z = 1, dado que está muy por encima de su temperatura crítica ($T_c = 33,19^{\circ}C$). Los cambios con la presión no afectan en gran medida a los cálculos por lo que se desprecian.

- γ : Es el coeficiente de dilatación adiabática, este parámetro resulta del cociente entre la capacidad calorífica a presión constante (Cp), y a volumen constante (Cv). Los cambios de este valor no afectan mucho a los cálculos por lo que se desprecian, resultando en aproximadamente un valor de $\gamma = 1,4$.

-P₁, T₁, P₂: Presión y temperatura de entrada, y presión de salida respectivamente

-R: Constante de los gases ideales.

Para tener en cuenta la eficiencia isentrópica se utilizan los datos de la *Figura 7*, donde se relaciona la eficiencia isentrópica con la razón de compresión, resultando que a mayor razón de compresión mayor eficiencia isentrópica, se observa que por encima de la relación $P_2/P_1=3,5$ la eficiencia resulta asintótica aproximadamente en el 85%.



Figura 7. Compresores K-101 y K-102: Eficiencia isentrópica en función de la razón de compresión[11]

El trabajo isentrópico real se calcula de acuerdo con la Ecuación 5.

$$W_{i,r} = \frac{W_{i,t}}{\eta_i}$$

Ecuación 5. Compresores K-101 y K-102: Trabajo isentrópico real

A su vez, el motor eléctrico va a tener una eficiencia relacionada con la potencia consumida (el trabajo isentrópico real). En la *Tabla 9* se muestra esta relación.

Tabla 9. Compresore:	s y bombas: Eficie.	ncia del motor elé	ctrico en función d	el trabajo isentr	ópico real[11]
			······	- · · · , · · · ·	

Potencia (kW)	Eficiencia
5	80
15	85
75	90
200	92
750	95
>4000	97

Una vez obtenida la eficiencia del motor se puede calcular el trabajo real del conjunto del equipo:

$$W_R = \frac{W_{i,r}}{\eta_m}$$

Ecuación 6. Compresores K-101 y K-102: Trabajo total (isentrópico real del equipo más motor)

Para saber a qué temperatura se llega realmente en cada etapa se emplean las *ecuaciones* 7 y 8 que relacionan la presión, la temperatura, la eficiencia isentrópica, y el coeficiente de dilatación adiabática:

$$\frac{T_2}{T_1} = (\frac{P_2}{P_1})^m$$

Ecuación 7. Compresores K-101 y K-102: Relación entre temperatura y presión con parámetro m.

$$m = \frac{\gamma - 1}{\gamma \cdot \eta_i}$$



Ecuación 8. Compresores K-101 y K-102: Parámetro m que considera eficiencia y coeficiente de dilatación adiabática

El proceso del cálculo de las etapas del compresor ha sido iterativo. Primero fijaba la presión que quería llegarse (en este caso va a ser una P final alrededor de 16,84 bar) y en cuantas etapas de compresión se podría hacer (se ha probado con dos etapas en este ejemplo), teniendo en cuenta que el trabajo es mínimo cuando en cada etapa se realiza el mismo trabajo. Además, después de cada etapa se ha asumido un 2% debido al paso por un intercambiador de calor y la circulación hasta el siguiente compresor.

Se va probando con diferentes presiones de salida que aseguran un mismo trabajo consumido, y que a la vez no eleven la temperatura por encima del límite impuesto por la selección de un compresor tipo pistón (260°C).

Se toma como ejemplo de cálculo la primera etapa, de la cual se parte de un caudal de 146,89 kg/h de hidrógeno que se encuentra a 49,30°C y tiene una presión de 1,013bar, el cálculo del primer trabajo isentrópico teórico resulta: 96,04kW.

$$w_{i,t,1} = 1 \cdot \frac{8,314 \frac{J}{\text{mol } k} \cdot (322,54 \, K)}{2,016 \frac{g}{\text{mol}}} \cdot \frac{1,4}{1,4-1} \cdot \left[\left(\frac{4,24}{1,013} \right)^{\frac{1,4-1}{1,4}} - 1 \right] \cdot \frac{1000g}{1kg} = 2353771,94 \frac{J}{kg}$$
$$W_{i,t,1} = 2271207 \frac{J}{kg} \cdot 146,89 \frac{kg}{h} \cdot \frac{1h}{3600s} \cdot \frac{1kW}{\frac{1000J}{s}} = 96,04kW$$

Se calcula con ello el trabajo isentrópico real y el del conjunto con el motor, la eficiencia isentrópica es del 85% al ser una relación superior a 3,5 la presión de salida entre la de entrada:

$$W_{i,r} = \frac{W_{i,t}}{\eta_i} = \frac{92,67kW}{0,85} = 112,99 \, kW$$

Con la tabla que relaciona el trabajo con la eficiencia del motor se extrae que por interpolación es del 90,51%:

$$W_R = \frac{112,99 \, kW}{0,9061} = 124,70 \, kW$$

La temperatura de esta primera etapa se calcularía:

$$m = \frac{\gamma - 1}{\gamma \cdot \eta_i} = \frac{1.4 - 1}{1.4 \cdot 0.85} = 0.336$$

$$T_2 = T_1 \cdot (\frac{P_2}{P_1})^m = (322,54K) \cdot (\frac{4,24}{1,01})^{0,336} = 521,95K = 248,8^{\circ}C$$

Por lo que se comprueba que se cumple una $T_2 = 217^{\circ}C < 260^{\circ}C$. La segunda etapa se haría tras refrigerar la corriente de hidrógeno hasta los 59°C. Es por este motivo que los gradientes de temperatura son



diferentes, al igual que la relación P₂/P₁, pero se ha buscado que el conjunto de los trabajos sea el mismo: 2355 kJ/kg.ww

$$w_{i,t,2} = 1 \cdot \frac{8,314 \frac{J}{\text{mol } k} \cdot (332,15K)}{2,016 \frac{g}{\text{mol}}} \cdot \frac{1,4}{1,4-1} \cdot \left[\left(\frac{16,84}{4,24-4,24*0,02} \right)^{\frac{1,4-1}{1,4}} - 1 \right] \cdot \frac{1000g}{1kg}$$
$$w_{i,t,2} = 2355,91 \frac{\text{kJ}}{\text{Kg}} \approx 2353,77 \frac{\text{kJ}}{\text{Kg}}$$

Se observa que se obtiene el mismo trabajo, aunque en este caso la relación P_2/P_1 sea diferente, por lo mencionado sobre lo de que se parte de una temperatura diferente. Para calcular P_1 se ha tenido en cuenta una pérdida de presión del 2% respecto a la presión de salida de la primera etapa.

$$T_2 = T_1 \cdot (\frac{P_2}{P_1})^m = (332,15K) \cdot (\frac{16,85}{4,24 - 4,24 * 0,02})^{0,336} = 531,55K = 258,4^{\circ}C$$

Se obtiene que en esta segunda etapa la $T_2 = 258,4^{\circ}C < 260^{\circ}C$. Por lo que cumple los criterios. Como se ha mencionado anteriormente, el proceso ha sido iterativo para saber qué presiones se requerían a cada etapa, y luego se comprobaba si la temperatura excedía el límite de los 260°C, de esta forma se acababa obteniendo un trabajo igual en cada etapa.

Esto además de hacer que los costes variables sean los mínimos, asegura tener equipos de dimensiones equivalentes, ayuda a que no haga falta tener un gran número de repuestos pues valdrían todos para cada equipo. Por otro lado, el cálculo del coste de los equipos puede extraerse con las tablas del *anexo II*. El resumen de los datos es el siguiente:

	Co	ste variable	Cost	Costo total (E /año)		
	Potencia (KW)	Coste electricidad (\$/año)	Compresores (\$)	Compresores (\$/año)	Coste total (€/ano)	
124,70	240 51	142769.60	305827,33	122242 41	242002 12	
124,81	249,51	142768,60	305884,70	122342,41	243902,13	

Se observa que el coste variable es ligeramente superior al coste fijo por año, es una cifra creíble porque la compresión de un gas es muy energéticamente exigente, mucho más que para un líquido. En el *apartado 4.4.4.1.* se evaluó la optimización a diferentes presiones para así utilizar la mejor combinación para el reactor, ahí están las tablas de datos más completas.

4.4.4 Reactor químico (R-101)

En la industria normalmente lo que más hay que optimizar son los costes variables de la instalación, es por esto por lo que el reactor se va a diseñar acorde a la minimización de estos costes, en concreto, se va a tener en cuenta la masa de catalizador, el coste de acondicionar la presión, y el coste de acondicionar la temperatura de entrada y de la refrigeración del reactor.

En este caso para el coste de acondicionar la presión de la corriente de hidrógeno se va a considerar el coste fijo de los equipos también, por ser los compresores equipos tan caros.

Con respecto al caudal de hidrógeno que se debe acondicionar (presurizar y calentar), se va a mantener un exceso molar de 3,5 con respecto al maleico, un valor habitual para este tipo de procesos de hidrogenación.

4.4.4.1 Costes asociados a la presurización del hidrógeno

Se ha contemplado que la reacción pueda ocurrir entre los 15 y los 25 bares de presión, se va a sacar una linealización de tres puntos: a 28,06 bar como máximo, 22,45 bar como punto medio, y 16,84 bar como punto mínimo. Esto se debe a que hay que tener en cuenta que el reactor tendrá en su longitud una pérdida de presión del 10% por diseño. También se tiene en cuenta un 2% más de presión extra para la pérdida de presión en la conducción desde el compresor hasta el reactor. A continuación, se muestra como ejemplo de cálculo del punto mínimo de presión:

$$P_{requerida} = \frac{15 \cdot 1,10}{0,98} = 16,84 \text{ bar}$$

Por lo tanto, como se tienen las presiones objetivo, y siguiendo el proceso de cálculo desarrollado en el apartado anterior de diseño de compresores (4.4.3) se obtienen los resultados mostrados en la *Tabla 11*.

Tablas 11. Resultados del diseño del sistema de compresión para alimentar hidrógeno al reactor R-101 a diferentes presiones (16,84, 22,45, 28,06). (La variable P* hace referencia a la presión a la que llega al siguiente compresor después de las pérdidas de la conducción).

	Objetivo 16,84 bar									
	T1	T2	P1	m	P2	P*	Wi,t (kJ/kg)	Wi,t (kW)	Wi,r (kW)	WR (kW)
Etapa 1	49,39	248,8	1,01	0.226	4,24	4,16	2353,77	96,04	112,99	124,70
Etapa 2	59,00	258,4	4,16	0,550	16,84	-	2355,91	96,13	113,09	124,81

•		Objetivo 22,45 bar									
	T1	T2	P1	m	P2	P*	Wi,t (kJ/kg)	Wi,t (kW)	Wi,r (kW)	WR (kW)	
Etapa 1	49,39	192,2	1,01		2,94	2,88	1655,72	68,99	83,12	91,39	
Etapa 2	59,00	201,5	2,88	0,344	8,12	7,96	1653,62	68,90	83,52	91,83	
Etapa 3	59,00	201,5	7,96		22,46	-	1653,62	68,90	83,52	91,83	

	Objetivo 28,06 bar									
	T1	T2	P1	m	P2	P *	Wi,t (kJ/kg)	Wi,t (kW)	Wi,r (kW)	WR (kW)
Etapa 1	49,39	203,17	1,01	0,342	3,17	3,10	1791,53	74,65	89,40	98,23
Etapa 2	59,00	213,76	3,10	0,344	9,43	9,24	1791,57	74,65	89,94	98,82
Etapa 3	59 <i>,</i> 00	213,76	9,24	0,344	28,06	-	1791,57	74,65	89,94	98,82

Lo más destacable es que para presiones superiores se hace necesario incorporar un tercer compresor. Se ha comprobado que podría llegarse como mucho a 17,1 bar si se quiere evitar pasar de los 260°C en la segunda etapa, y respetando que en la primera se itere hasta conseguir la misma potencia que en la segunda etapa.



La eficiencia isentrópica se ha calculado atendiendo la relación de P_2/P_1 (*figura 7*), y la eficiencia del motor teniendo en cuenta el $W_{i,r}$ (*tabla 10*). Los datos obtenidos se muestran en la *Tabla 12*.

Tabla 12. Acondicionamiento presión de entrada a reactor R-101. Eficiencias para cada etapa en los compresores

	Objetivo :	16,84 bar	Objetivo 2	22,45 bar	Objetivo 28,06 bar		
	Eficiencia isentrópica (%)	Eficiencia del motor (%)	Eficiencia isentrópica (%)	Eficiencia del motor (%)	Eficiencia isentrópica (%)	Eficiencia del motor (%)	
Etapa 1	85,00	90,61	83,00	90,95	83,50	91,01	
Etapa 2	85,00	90,61	83,00	90,95	83,00	91,01	
Etapa 3	-	-	83,00	90,95	83,00	91,01	

Se tiene en cuenta además que los compresores tengan una vida útil de 5 años, por lo que se va a obtener el coste total por año de los costes variables junto al coste de los equipos asociado a los valores de presión evaluado (ver *Tabla 13*).

Tabla 13. Acondicionamiento	presión de entrada a reactor R-101.	Computo de cada tipo de co	oste asociado a los compresores
		computo ac cada tipo ac ci	

Presión objetivo (bar)	Coste variable		Coste fijo		
	Potencia (KW)	Coste electricidad (\$/año)	Compresores (\$)	Compresores (\$/año)	Coste total (€/ano)
16,84	249,51	142768,60	305827,33	122342,41	243902,13
			305884,70		
22,45	275,05	157381,38	287985,22	172887,81	303847,65
			288226,91		
			288226,91		
28,06	295,87	169293,23	292375,58	175396,10	317114,18
			292261,00		
			292343,91		

Se obtienen por tanto esos tres resultados de costes totales. El coste de un tercer compresor es disruptivo, porque el coste del trabajo dado para cada presión requerida sí crece linealmente, pero adquirir un tercer compresor parece que a simple vista compense menos. Se evaluará con el reactor y los otros costes qué compensa más. No se va a tener en cuenta el coste de refrigerar las corrientes entre etapas porque se considera un coste mucho menor al trabajo consumido de la propia compresión.

4.4.4.2 Costes asociados al calentamiento de los reactivos

La temperatura de entrada del reactor va a resultar de aprovechar la temperatura alta del hidrógeno que sale de los compresores, y de un calentamiento de la disolución del anhídrido maleico que se encontraría que sale del mezclador M-101. Se evalúan por tanto tres casos (el balance de energía se ha hecho con *Aspen*):

- Caso 1: Temperatura del hidrógeno cuando se comprime hasta 16,84 bar: 258,4°C. La combinación del hidrógeno con el anhídrido maleico a 50°C ya resultaría en una corriente de 83,97°C.
- Caso 2: Temperatura del hidrógeno cuando se comprime hasta 22,45 bar: 201,5°C. La combinación de esta corriente de hidrógeno con el anhídrido maleico ya resultaría en una corriente de 74,98°C.


Caso 3: Temperatura del hidrógeno cuando se comprime hasta 28,061 bar: 213,76°C. La combinación de esta corriente de hidrógeno con el anhídrido maleico ya resultaría en una corriente de 76,98°C.

Los casos se evalúan hasta alcanzar los 100°C en el reactor. Los resultados de la *Figura 8* muestran la linealidad entre temperatura que se quiere y calor aportado en cada caso:



Figura 8. Caudal de calor necesario para el calentamiento de los reactivos que entran al reactor R-101 (casos 1,2 y 3)

Se observa que las pendientes son muy parecidas, se debe a que el calor sensible producto de la mezcla de los anhídridos y el hidrógeno es muy poco variable con la presión. El punto de ordenada diferente se debe a la distinta temperatura inicial con la que se inicia la recta. Se van a utilizar las tres ecuaciones para relacionar el calor suministrado con la temperatura de entrada del reactor:

 $Q_1 = 3,89 * T_1 - 329,83 \ [kW], \quad Q_2 = 3,76 * T_2 - 286,99 \ [kW], \quad Q_3 = 3,73 * T_3 - 293,70 \ [kW]$

Ecuación 9. Acondicionamiento temperatura de entrada a reactor R-101. Casos 1, 2 y 3 respectivamente

Después, simplemente tendría que operarse con lo extraído del *anexo III* sobre los costes asociados al calentamiento con vapor a baja presión (al calentar como máximo a 100°C es mejor opción frente a la de alta presión). Por ejemplo, para calentar a 95°C la corriente de entrada al reactor en el caso 1:

Coste =
$$[3,89 * (95) - 329,83]kW \cdot 175,42 \frac{€}{año \cdot kW} = 6967,68€/año$$



4.4.4.3 Coste asociados a la refrigeración del reactor

La refrigeración del reactor depende directamente de la conversión del maleico en succínico: a mayor conversión, mayor refrigeración se necesita y tiene mayores gastos asociados. Esto se debe a la termodinámica de la reacción, la cual se explicó que es exotérmica.

Los resultados obtenidos sobre el caudal de calor liberado en función de la conversión se muestran en la *Figura 9*.



Figura 9. Refrigeración reactor R-101. Caudal de calor liberado por porcentaje de conversión

Por ejemplo, si se quisiera una conversión del 80%, el coste asociado a su refrigeración sería el calor que hay que refrigerar por el consumo calculado por unidad de calor refrigerada del *anexo III*:

$$Coste = -[-8,1 \cdot (80) + 0,29]kW \cdot 35,42 \frac{\epsilon}{ano \cdot kW} = 23006,66 \frac{\epsilon}{ano}$$

4.4.4.4 Optimización del reactor: Caso elegido y descartados.

• Caso elegido: Reactor a 16,5 bar en la entrada.

Se realizó un análisis de sensibilidad a distintas temperaturas y a distintas cantidades de catalizador utilizado. Se pueden calcular los costes asociados para conseguir la temperatura y presión de acondicionamiento de la corriente de entrada, además del coste asociado a la refrigeración del reactor y de la cantidad de catalizador empleada. Todos estos resultados se muestran en la *Tabla 14*.



Tabla 14. Optimización reactor R-101. Análisis de sensibilidad a 16.5 bar de p	resión
--	--------

P (bar)	Catalizador (kg)	T (≌C)	Conversión (%)	Acondicionar hidrógeno (€/año)	Acondiconar temp. (€/año)	Refrigerar reactor (€/año)	Catalizador (€/año)	Coste total (€/año)
16,5	504	84,8	90,15	243.902	0	25.865	6.570	276.908
16,5	605	84,8	93,97	243.902	0	26.961	7.886	279.435
16,5	706	84,8	96,32	243.902	0	27.636	9.203	281.541
16,5	807	84,8	97,76	243.902	0	28.049	10.519	283.385
16,5	908	84,8	98,63	243.902	0	28.301	11.836	285.068
16,5	1009	84,8	99,15	243.902	0	28.450	13.152	286.648
16,5	335	92,4	93,13	243.902	5.135	26.720	4.367	280.504
16,5	385	92,4	95,49	243.902	5.135	27.398	5.018	281.890
16,5	435	92,4	97,04	243.902	5.135	27.844	5.670	283.045
16,5	485	92,4	98,07	243.902	5.135	28.138	6.322	284.047
16,5	535	92,4	98,73	243.902	5.135	28.329	6.974	284.947
16,5	585	92,4	99,16	243.902	5.135	28.451	7.625	285.777
16,5	198	100	93,06	243.902	10.317	26.702	2.581	283.727
16,5	228	100	95,47	243.902	10.317	27.393	2.972	284.842
16,5	258	100	97,05	243.902	10.317	27.845	3.363	285.719
16,5	288	100	98,08	243.902	10.317	28.141	3.754	286.440
16,5	318	100	98,75	243.902	10.317	28.333	4.145	287.058
16,5	348	100	99,17	243.902	10.317	28.455	4.536	287.604

Todo el proceso de cálculo de cada coste se ha ido enseñando en este mismo apartado o en los oportunos anexos. Se puede observar que mantener isotermo el reactor supone mayor gasto que el propio coste anual del catalizador, y que elevar la temperatura de la corriente de entrada. Se han destacado tres casos en los que se consigue una conversión de $X \ge 99,15\%$, pero se necesita toda la tendencia para ver qué podría compensar más según la conversión que se quisiese obtener. En la *Figura 10* se representa el coste total anual del reactor en función de la conversión a diferentes temperaturas de operación.



Figura 10. Optimización reactor R-101. Costes totales de la optimización del reactor en función de la conversión requerida a 16,5 bar y a diferentes temperaturas de operación)

Fijándose únicamente en el criterio económico, se observa que a bajas conversiones interesa una temperatura menor de operación, pero que según se aumenta la conversión los costes totales se igualan.

Sin embargo, hay que fijarse también en la cantidad de catalizador empleado. La cantidad empleada de catalizador determinará el volumen necesario del reactor, y puesto que la porosidad del lecho suele rondar la fracción de $\epsilon = 0,5$ (se va a calcular después), el volumen total será aproximadamente el doble del volumen ocupado por el catalizador.

En los costes variables a la conversión elegida (>99%) la diferencia en coste es pequeña, pero la cantidad de catalizador necesario pasa de 1009 a 348kg en el caso de menor temperatura al de máxima temperatura. Ha sido elegido el caso de menor catalizador necesario: 347kg a $100^{\circ}C$, por conllevar un reactor más pequeño.

• Casos descartados: Reactor a 22 y 27,5 bares en la entrada.

Se realizaron análisis de sensibilidad a los otros casos de presiones, pero estos resultados resultan irrelevantes pues el caso más económico a presiones superiores resulta irremediablemente más caro que el de menor presión. Esto se debe al coste de acondicionamiento de la presión que es de mínimo de por sí de 303847€/año para el caso de 22 bares de entrada en el reactor, y de 317114€/año en el caso de 27,5 bares de entrada de presión. Eso sin tener en cuenta las bombas para el acondicionamiento del líquido, que superarían al del caso del menor presión también.

4.4.4.5 Dimensionamiento del equipo.

En cuanto al diseño del equipo, como se mencionó en la descripción de la termodinámica de la reacción, el reactor idóneo para esta operación se trata de un reactor de lecho fijo multitubular, que puede refrigerarse dentro de una carcasa como si se tratase de un intercambiador de carcasas y tubos.

Se ha empleado la ecuación semiempírica de Ergun (*Ecuación 10*) para predecir la pérdida de carga por unidad de longitud de tubo de un lecho fijo. Esta ecuación está muy documentada, es útil para tener en cuenta tanto el régimen laminar como el turbulento de un fluido que pasa por tuberías o columnas empacadas[11]. Sin embargo, se ha modificado el parámetro 150 por recomendación de Hicks[13] puesto que la ecuación de Ergun no predice correctamente escenarios donde $Re_p/(1-\epsilon) < 500$ (*Ecuación 11*).

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \cdot \left[\frac{(1-\epsilon)^2}{\epsilon^3}\right] \cdot \frac{\mu \cdot u}{d_p^2} + 1,75 \cdot \left[\frac{1-\epsilon}{\epsilon^3}\right] \cdot \frac{\rho \cdot u^2}{d_p}$$

Ecuación 10. Reactor R-101. Dimensionamiento: Ecuación de Ergun para lechos fijos

$$\frac{\Delta P}{L} = 4.2 \cdot Re_p^{5/6} \cdot \left[\frac{(1-\epsilon)^2}{\epsilon^3}\right] \cdot \frac{\mu \cdot u}{d_p^2} + 1.75 \cdot \left[\frac{1-\epsilon}{\epsilon^3}\right] \cdot \frac{\rho \cdot u^2}{d_p}$$



Ecuación 11. Reactor R-101. Dimensionamiento: Modificación de la ecuación de Ergun por Hicks para cuando se cumple:

 $500 < Re_p/(1 - \epsilon) < 60000$

Estas ecuaciones, 10 y 11, pueden descomponerse en dos sumandos, se hará la distinción entre la parte izquierda (lo que multiplica el 150) y derecha (lo que multiplica el 1,75) de la suma en los resultados..

Donde:

- $\Delta P/L$ es la pérdida de carga por unidad de longitud (Pa/m)
- ε es la porosidad del lecho
- μ es la viscosidad dinámica del fluido (Pa·s)
- ρ es la densidad del fluido (kg/m³)
- u es le velocidad superficial del fluido si el tubo estuviese hueco (m/s)
- d_p es el diámetro de partícula (se va a escoger un valor dentro del rango típico: 5mm[14]

Es importante destacar que la corriente de entrada es peculiar en cuanto a que es una mezcla de líquidogas. La bibliografía no es escueta en formas de calcular la viscosidad de compuestos diferentes para una misma fase, pero la viscosidad dinámica de una mezcla de compuestos que se encuentran en fases diferentes puede ser difícil de predecir. La densidad de la mezcla sí la ha dado *Aspen Plus*, pero la viscosidad dinámica ha sido necesaria ponderarla con las viscosidades cinemáticas.

Se ha considerado ponderar primero la viscosidad cinemática de la mezcla con las viscosidades cinemáticas de cada fase y sus respectivas fracciones másicas. Y una vez obtenida la viscosidad cinemática ponderada multiplicarla por la densidad para extraer la viscosidad dinámica:

$$v_k = 0.962 \cdot 5.08 \cdot 10^{-7} + 0.038 \cdot 6.71 \cdot 10^{-6} = 7.44 \cdot 10^{-6} m^2/s$$

$$v_d = \rho \cdot v_k = 43,07 \frac{kg}{m^3} \cdot 7,44 \cdot 10^{-6} \frac{m^2}{s} = 32,05 \cdot 10^{-5} Pa \cdot s$$

El resumen de los datos de las propiedades de las corrientes es el siguiente:

Tabla 15. Reactor R-101: Propiedades de la corriente de alimentación al reactor. 16,5 bares a 100ºC.

	Fracción másica	Viscosidad cinemática (m ² /s)	Densidad (kg/m ³)	Viscosidad dinámica (Pa s)
Gas	0,038	6,71E-06	1,71	1,14E-05
Líquido	0,962	5,08E-07	1047,18	5,32E-04
Mezcla	1	7,44E-07	43,07	3,20E-05

Se sabe por bibliografía que la ecuación recomendada por Hicks (*Ecuación 11*) solo puede emplearse cuando el diámetro de tubo es, al menos, cinco veces superior al diámetro de partícula $d_t/d_p > 5[13]$. Esta relación permite conocer el mínimo diámetro de tubo básico se puede utilizar (se estandarizará después a los típicos): $d_t = 5 \cdot d_p = 5 \cdot 5mm = 25mm$ El tubo siguiente típico más pequeño a ese diámetro es el estandarizado de una pulgada (25,4mm), es decir, inferiores como el de 0,75 pulgadas no podría utilizarse.

Se dispone también de la *Ecuación 12* que relaciona la porosidad con el diámetro de tubo:

$$\epsilon = 0.38 + 0.73 * [1 + \frac{(d_t/d_p - 2)^2}{(d_t/d_p)^2}]$$

Ecuación 12. Reactor R-101: Porosidad en función del diámetro de tubo y de partícula[13]

Másicamente, casi todo el caudal es líquido (96% respecto al total). Por este motivo, se utilizarán dentro de los cálculos como velocidad mínima y máxima las del rango para líquidos, que van de 0,5 a 2m/s, y no a las típicos en gases de 10 a 25m/s[15].

El proceso de cálculo del reactor ha sido iterativo y se han llevado varias estrategias:

- Maximizar la superficie total del reactor (para un mejor intercambio de calor).
- Ajustarse a diámetros pequeños (tubos más económicos y normalmente mayor área superficial).
- No tener que cortar ni soldar tubos (utilizar los tamaños típicos).
- No superar una pérdida de carga total superior al 10% de la entrada ($\Delta P < 1,5$ bar).

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 16.

Tabla 16. Reactor R-101: Dimensionamiento. Iteración diámetro de tubo, porosidad, pérdida por rozamiento, número de tubos

Volumen reactor (dm^3)	Velocidad (m/s)	Sección (m^2)	Diámetro tubo (m)	Nº tubos	Porosidad	Re,p
177,131	0,502	8,06E-02	0,0254	159,00	0,4798	3374,48
179,871	0,547	7,40E-02	0,0254	146,00	0,4798	3674,95
177,131	0,555	7,28E-02	0,0318	92,00	0,4873	3732,47
175,171	0,563	7,18E-02	0,0381	63,00	0,4927	3785,13
	0,713	5,68E-02		112,00	0,4798	4790,56
179,871	0,719	5,62E-02	0,0254	111,00	0,4798	4833,80
	0,726	5,57E-02		110,00	0,4798	4877,49
177,131	0,730	5,54E-02	0,0318	70,00	0,4873	4905,72
175,171	0,739	5,47E-02	0,0381	48,00	0,4927	4967,55
172,586	0,768	5,27E-02	0,0508	26,00	0,5001	5159,10
166,300	1,000	4,05E-02	0,2032	1,25	0,5190	6721,08
165,861	1,000	4,05E-02	0,2540	0,80	0,5204	6721,08

Nº tubos	lzq (Pa/m)	Drcha (Pa/m)	ΔP/L (bar/m)	L (m)*	Volumen reactor (dm^3)*	L (m)	∆P (bar)	Superficie (m^2)
159,00	5,8E+03	1,8E+04	0,24	6,341	510,853	2,233	0,53	28,33
146,00	6,7E+03	2,1E+04	0,28	5,365	396,879	2,431	0,68	28,33
92,00	6,4E+03	2,1E+04	0,27	5,547	404,047	2,432	0,66	22,32
63,00	6,3E+03	2,0E+04	0,27	5,654	406,120	2,439	0,65	18,39
112,00	1,1E+04	3,6E+04	0,47	3,190	181,053	3,169	1,49	28,33
111,00	1,1E+04	3,7E+04	0,48	3,135	176,299	3,198	1,53	28,33
110,00	1,1E+04	3,7E+04	0,49	3,080	171,664	3,227	1,57	28,33
70,00	1,1E+04	3,6E+04	0,46	3,246	179,863	3,196	1,48	22,31
48,00	1,0E+04	3,5E+04	0,45	3,317	181,564	3,201	1,45	18,39
26,00	1,0E+04	3,5E+04	0,46	3,279	172,792	3,275	1,50	13,59
1,25	1,4E+04	5,5E+04	0,68	2,192	88,654	5,128	3,51	4,08
0,80	1,4E+04	5,5E+04	0,68	2,198	88,896	3,2733	2,23	2,09

El volumen del reactor es una consecuencia del diámetro de tubo elegido, pues este determina la porosidad del lecho por la *Ecuación 12*. Ambas tablas funcionan como una sola, se conectan por la columna del número de tubos. Lo que se ha hecho ha sido variar la velocidad y después acomodar el diámetro de menos a más para ver qué longitudes de tubo exigía la ecuación.

Se puede observar que se han marcado las casillas de L* y volumen reactor*, estas corresponderían a la longitud y volumen si se utilizasen los 1,5 bar de pérdida de presión. Posteriormente, la L se corrige para que el reactor sea del tamaño de la primera columna de cada sección de la tabla. Esto sirve para diferenciar que, en casos de velocidades grandes, la longitud necesaria hace que se superen los 1,5 bares de presión, excluyéndolos.

Además, se han marcado las casillas de menor diámetro de tubo, se observa que corresponden a después tener que utilizar un mayor número de tubos, lo que conlleva además a los escenarios con mayor área superficial, que interesa para poder controlar mejor la temperatura del reactor. Se podría intentar maximizar la pérdida de rozamiento al 10%, pero esto supone una longitud de tubo que no se sitúa entre las típicas que se venden estandarizadas.

Sin embargo, se elige la posibilidad de comprar los tubos estandarizados para no tener que cortarlos o fundirlos, lo que llevaría tan solo a los escenarios de las filas segunda, tercera y cuarta de la tabla, y también excluye velocidades inferiores a 0,54 m/s, porque se obligaría a tener que recortar los tubos.

Se elije, por tanto, el escenario que corresponde a la segunda fila, pues cumple la mayoría de los criterios, siendo de los de mayor superficie, no tienen que soldarse ni recortarse sus 146 tubos (8 pies, tamaño típico de tubo, corresponden a sus 2,43m).

Por lo tanto, el dimensionamiento final del reactor es el que se muestra en la Tabla 17.

Tabla 17. Reactor	R-101:	Dimensionamiento	final	del	reactor
-------------------	--------	------------------	-------	-----	---------

F (kg/h)	Volumen reactor (dm^3)	Porosidad	Sección (m^2)	Velocidad (m/s)	Nº tubos	Superficie (m^2)
6271,3513	180,391	0,4798	7,40E-02	0,547	146	28,33
Tiempo de residencia (s)	Volumen cat (dm^3)	Masa catalizador (kg)	Diámetro tubo (m)	$\Delta P/L$ (bar/m)	L (m)	ΔP (bar)
4,46	86,308	346,3362	0,0254	0,28	2,438	0,68

Los 146 tubos deben contenerse en una carcasa propia de un intercambiador de carcasas y tubos y deben refrigerarse con 40938,64 kg/h de agua que entre a 32°*C* y salga a 49°C, para refrigerar el reactor el cual libera 808,3 kJ/s. El desarrollo de esto se ha puesto con los intercambiadores.

4.4.5 Información previa para los recipientes (M-101, C-101, C-102, D-101)

Se van a diseñar cuatro recipientes: un mezclador (M-001), un separador líquido-gas (C-001), un destilador multietapa (C-002), y el depósito pulmón del destilador multietapa (C-003). El diseño mecánico de cada recipiente es parecido, aunque con diferencias, como punto en común todos son verticales.



Un parámetro importante que se va a emplear en el cálculo es el espesor mínimo necesario para soportar la presión de diseño, para ello se debe conocer la tensión máxima permitida por el acero inoxidable (ver sección 7.1.2) a la temperatura de operación del equipo. Se han representado en la *Figura 11* los datos que se tienen sobre el acero para sacar una ecuación que relacione la tensión máxima permitida con la temperatura[16]:



Figura 11. Equipos. Recipientes: Tensión máxima permitida por el acero inoxidable 304 vs temperatura

Por cómo es la curva, se va a escoger para el diseño siempre la temperatura máxima que podría soportar el recipiente que se calcule, pues será la mínima tensión máxima que puede soportar.

La *Ecuación 13* para el cálculo del espesor de los recipientes es parecida para la pared y tapa del depósito, difiriendo en un parámetro en el denominador.

$$t_{pared} = \frac{P \cdot D}{2 \cdot S_{max} \cdot E - 1, 2 \cdot P} + t_{CA} \qquad \qquad t_{tapas} = \frac{P \cdot D}{2 \cdot S_{max} \cdot E - 0, 2 \cdot P} + t_{CA}$$

Ecuación 13. Equipos. Recipientes: Cálculo del espesor de las paredes y de las tapas del recipiente respectivamente

Donde:

- P: es la presión de diseño del recipiente. Es la máxima de sumarle 1,8 bar o multiplicarle 1,1 a la presión de operación, o a la de máxima impulsión de las bombas que preceden a los equipos.
- D: es el diámetro del recipiente.
- S_{max}: es la tensión máxima, definida por el material y la temperatura de operación.
- E: es la eficiencia de la soldadura, como toma un valor entre 1 y 0,6 se ha hecho su media (0,8).
- t_{CA}: es el espesor mínimo que se suele seleccionar, toma un valor entre 3.18 y 6.35 mm, se ha escogido su valor intermedio (4,76mm)

Por otro lado, el cálculo de la masa necesaria es un cálculo sencillo con la densidad (*Ecuación 14*), a esta masa se le aplicará además un incremento de un 15% como criterio de seguridad.

$$m_{pared} = \Pi \cdot t_{pared} \cdot (D + t_{pared}) \cdot L \cdot \rho_{pared} \qquad m_{tapas} = 1,375 \cdot \frac{\Pi}{4} \cdot D^2 \cdot t_{tapas} \cdot \rho_{tapas} \cdot 2$$



Ecuación 14. Equipos. Recipientes: Cálculo de las masas de las paredes y tapas del recipiente

La *Tabla 18* expresa cuanto tiempo pasa el líquido alojado en un recipiente, en la industria cada equipo suele tener unos tiempos típicos. Este tiempo se emplea junto con el caudal conocido para calcular el volumen correspondiente del equipo.

Tabla 18. Equipos. Recipientes: Tiempos de residencia por equipo en recipientes. Referencia sacada de Chemical Process Equipment design[16]

Downstream Equipment/Process Function	Holdup Time, t _{I-h} (min)
Distillation tower/column	10
Reactor	15
Heater/furnace	30
Compressor knockout drum	10
Condensate flash drum	5
Reflux drum	5
Source: From Red-Bag (n.d.) and Couper et al. (2012).	

Debido a la falta de un dato de tiempo de residencia para el mezclador, se ha propuesto 10 min (se considera suficiente para que el maleico se funda por llegar a 50°C y se disuelva homogéneamente en el acético).

En bibliografía se estipula que para recipientes con presiones inferiores a 18 bar se emplee una relación de $L/D \ge 2,5$, pero como no hay rango superior se escoge $L/D \ge 5$ como tope. Sin embargo, para presiones de diseño situadas entre 18 y 36 bar se estipula estar dentro del rango 3 < L/D < 4[16].

4.4.6 Mezclador (M-101) y depósito del condensador (D-101)

Los recipientes M-101 y D-101 se consideran más sencillos que los otros dos recipientes, estos se desarrollarán en el *anexo IV*, de forma parecida al separador C-101 y al destilador C-102, los cuales sí van a desarrollarse a continuación en la memoria técnica.

4.4.7 Separador Líquido-Gas (C-101)

Del reactor se partía a 100°C y a 16,5 bar. En cuanto a la presión el descenso es mayor, el separador C-101 opera a 15,57 bar porque por el reactor se ha calculado una pérdida de 0,68 bar, más la pérdida en la conducción de 0,25 bar. Esta presión de operación (15,57 bar) es la presión que se tendrá en cuenta para calcular el diámetro mínimo que debe tener.

La presión de diseño, por seguridad, va a ser la de máxima impulsión de la bomba al reactor (G-102 A/B), de 24,3 bar, es la máxima presión que tendría que soportar el recipiente en caso de fallo de control de la bomba.

En este caso, y al contrario que para el mezclador M-101, al tener una mezcla de líquido-gas debe calcularse el diámetro mínimo que debe tener el recipiente para que no se de arrastre líquido por el gas.



Esto se calcula con la *Ecuación 15* que depende mayormente de la densidad de los fluidos y la viscosidad del gas, además de su caudal:

$$D_{min} = \sqrt{\frac{72 \cdot Q_g \cdot \mu_g}{\Pi \cdot D_{sp}^2 \cdot (\rho_l - \rho_g) \cdot g}} = \sqrt{\frac{72 \cdot 106,13 \frac{kg}{m^3} \cdot 1,14 Pas \cdot 10^{-5}}{\Pi \cdot 100 \cdot 10^{-6} \cdot (1146,18 - 1,61) \cdot 9,81}} = 0,26m$$

Ecuación 15. Separador Líquido-Gas C-101: Cálculo del diámetro mínimo

Donde

- D_{min} : Es el diámetro mínimo para que no se arrastren gotas de tamaño superior al seleccionado.

- D_{sp} : Es el diámetro de la gota elegido, se ha seleccionado un valor común en separadores (100µm).

Como es un recipiente que tiene una presión de diseño superior a 18 bar (23,74 bar), se pasa a tener como rango objetivo 3 < L/D < 4. Para un separador L-V se ha elegido respetar las relaciones de la *Figura 12* que dependen del diámetro.



Figura 12. Separador Líquido-Gas C-101: Dimensionamiento típico de un separador L-G[16]

En la Tabla 19 se presentan las dimensiones que debería tener el equipo para cada relación L/D.

Tabla 19. Separador Líquido-Gas C-101: Propiedades de la corriente a separar. Diámetros y alturas que hay que evaluar.

	Temperatura (ºC)	Presión (bar)	Caudal (m^3/h)	Densidad (kg/m^3)	Viscosidad (Pa·s)	Volumen líquido NLL (m^3)
Líquido	99,98	15,57	5,32	1146,19	-	0.40
Gas	99,98	15,57	106,13	1,61	1,14E-05	0,49

Diámetro (m)	Altura líquido NLL (m)	HLL (m)	LLL (m)	Altura total (m)	L/D
0,26	9,02	16,24	1,80	19,45	74,12
0,82	0,93	1,88	0,39	3,26	4,00
0,85	0,86	1,75	0,37	3,12	3,67
0,89	0,78	1,61	0,36	2,97	3,33
0,94	0,71	1,47	0,34	2,81	3,00

Se observa que el diámetro mínimo (primera fila) con su altura correspondiente queda muy lejos del rango recomendado por la bibliografía, por lo que puede asegurarse que no habrá arrastre de líquido por el gas. El HLL y LLL determinan la altura a la que deberían ponerse las alarmas de alto y bajo nivel en caso de querer controlarlo.



Se pasa a evaluar económicamente la mejor relación dentro del rango recomendado de L/D. Los resultados se muestran en la *Tabla 20*.

P (MPa)	Di (m)	Altura (m)	Espesor tapas (m)	Espesor pared (m)	Masa tapas (kg)	Masa carcasa (Kg)	Masa conjunto +15% (Kg)	Coste 2007 (\$)
2,43E+06	0,82	3,26	1,68E-02	1,70E-02	193,95	1164,42	1562,13	45924,08
	0,85	3,12	1,74E-02	1,75E-02	216,85	1193,26	1621,63	46573 <i>,</i> 83
	0,89	2,97	1,79E-02	1,81E-02	245,76	1229,26	1696,27	47381,70
	0,94	2,81	1,86E-02	1,89E-02	283,30	1275,18	1792,25	48407,10

Tabla 20. Separador Líquido-Gas C-101: Optimización de la altura y diámetro del recipiente

Se observa que la relación óptima es la relación mayor dentro del rango: L/D = 4.

4.4.8 Destilador multietapa (C-102)

El destilador multietapa sirve para separar el disolvente (el acético) del producto (succínico). El succínico es el componente pesado y el acético es el ligero, su separación es mejor cuanto menor es la presión de operación. Se ha escogido que la corriente de salida de producto tenga un **99% de pureza**, y al menos un **99% de recuperación** del succínico.

En destilación una menor presión de operación implica que el coste total disminuya porque el coste energético de acondicionar el alimento, de calentar en el calderín y enfriar en el condensador decrece al ser menores temperaturas de operación. No obstante, si la presión se disminuye demasiado (a condiciones de vacío) los costes vuelvan a aumentar por el coste energético de despresurizar la columna. Por lo tanto, se considera que lo más económico resulta operar a presión atmosférica en la cabeza de la columna y suponer 0,7 bares de pérdida de presión, y que sean por tanto aproximadamente 1,7 bares de presión en el fondo de la columna. Esta presión supone una temperatura de rocío de 140°C en la cabeza de columna y de burbuja de 285°C en el fondo de la columna.

Se ha realizado un estudio económico sobre los costes variables de calentar y enfriar en función del número de etapas teóricas y la relación de reflujo molar en el destilador, fijando la pureza y recuperación (99% ambas). Los resultados se muestran en la *Tabla 21* y en la *Figura 13*.

Piso alimentación	№ etapas	Reflujo (molar)	Destilado / alimento (molar)	Recuperación (%)	Q condensador (kW)	Q hervidor (kW)	Coste condensador (€/año)	Coste reboiler (€/año)	Costes variables (€/año)
3	5	1,61E+00	0,66	0,99	-1203,97	902,66	42648,27	159125,62	201773,89
4	6	5,30E-01	0,66	0,99	-703,12	401,64	24906,71	70802,51	95709,23
4	7	3,34E-01	0,65	0,99	-612,96	313,39	21712,94	55245,55	76958,49
5	8	3,04E-01	0,66	0,99	-596,74	295,42	21138,23	52077,71	73215,95
6	9	3,03E-01	0,66	0,99	-595,44	294,10	21092,22	51844,84	72937,06



Figura 13. Destilador multietapa C-102: Reflujo y coste en función del número de etapas teóricas

Se puede comprobar que tener tan solo 5 o 6 etapas teóricas podría incrementar en gran medida los costes de operación de la columna, pero que a partir de las 7 etapas el coste empieza a disminuir mucho menos en comparación. Como puede no compensar tener una columna demasiado alta, se escogen 7 etapas teóricas sean las elegidas, lo que corresponden a 5 platos teóricos más el condensador y el calderín. Como son cinco platos teóricos y se debería suponer aproximadamente un 70% de eficiencia de plato[11], la cantidad de platos reales deberían ser 7,14 \approx 7 platos.

Para calcular el diámetro de la columna se ha determinado primero la velocidad de arrastre de la columna, para ello se necesitan conocer los siguientes datos de los platos con mayor caudal de líquido y de vapor. En la *Tabla 22* se ven los datos de las corrientes en los platos más críticos para el diseño.

		Primer plato teórico		Último pl	ato teórico
		Líquido Gas		Líquido	Gas
Caudal másico	kg/h	897,20	5388,88	4068,05	1988,24
Densidad	kg/m ³	991,05	3,40	1306,32	3,68
Caudal	m³/h	0,91	1585,73	3,11	539,99
Masa molar	kg/kmol	101,71	102,07	100,13	100,58

Tabla 22. Destilador multietapa C-102. Propiedades en los platos críticos de la columna: caudales de líquido y de gas

Se puede observar que el caudal del gas en el plato que está antes del condensador posee hasta tres veces mayor que el existente en el plato que el último plato de la columna. Esto afecta considerablemente al diseño de la columna, porque implica que, para un mismo diámetro de columna, en la parte de arriba de la columna es más fácil que el líquido se vea arrastrado si el diámetro es insuficiente, o que la parte de debajo de la columna se inunde si el diámetro es demasiado grande. Es decir, es complicado mediar y pueden considerarse dos opciones:



- Tener dos secciones diferentes, es decir, un diámetro más grande en la parte de cabeza de columna (desde el piso de alimentación), y un diámetro inferior en la parte de debajo. De esta forma se aseguraría que la velocidad de paso del gas es la idónea.
- Espaciar los platos de forma diferente, tenerlos más juntos en la parte de debajo de la columna, y más espaciados en la parte superior de la columna.

En la Figura 14 se presenta la relación entre los platos, y los parámetros K_1 y F_{LV} , los cuales se calculan a su vez con las *ecuaciones 16* y *17*. Están relacionados junto con la distancia entre platos y sirven para calcular la velocidad de arrastre de cada plato de la columna.



Figura 14. Destilador multietapa C-102: Determinación de K1 a partir de FLV. Gráfica sacada de Chemical Engineering Design

$$F_{LV} = \frac{L_W}{V_W} \cdot \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}}$$

Ecuación 16. Destilador multietapa C-102: Ecuación para determinar el factor del caudal líquido-vapor, F_{LV}

$$u_f = K_1 \cdot \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_v}{\rho_L}}$$

Ecuación 17. Destilador multietapa C-102: Ecuación para determinar la velocidad de arrastre, uf

Donde:

- L y V: caudales másicos de líquido y vapor respectivamente.

- ρ_L y ρ_v : densidad del líquido y vapor respectivamente.

Se decidió la segunda opción, para tener el mismo diámetro en toda la columna variando el espaciado, de esta forma el diseño mecánico supone una única carcasa. Se quiere además que la velocidad de paso del gas por la columna resultante sea un 75% de la de arrastre en condiciones del caudal normal de operación. Además, de este modo cuando se considerase un caudal un 10% mayor por picos de producción se estaría en el rango de diseño óptimo (de 80 a 85%). Esto supone un 82,5% de velocidad en caso de caudal de diseño (evitando que se supere el límite superior que supone arrastre del líquido por el gas).

Por otro lado, es posible que, en la parte de debajo de la columna, a pesar de corregir la necesidad de un menor diámetro con un menor espaciado, mientras se supere un 40% de velocidad de paso la columna puede operar con normalidad (por debajo de este valor los platos pueden empezar a inundarse). Se sabe que si la diferencia es pequeña se pueden tapar los agujeros de los platos de la columna para que se ajuste mejor la velocidad de paso del gas.

Finalmente, considerando que lo habitual es que los platos se distancien en un rango entre 0,15m y 0,90m, se obtienen los resultados que se muestran en la *Tabla 23*.

Tabla 23. Destilador multietapa C-102: Determinación del diámetro de columna a partir del 75% de la velocidad de arrastre.

Etapa	FLV	Espaciado escogido (m)	k1	u _f (m/s)	D (m)	Superficie (m2)	Velocidad (m/s)	Velocidad / u _f (%)
Cabeza	0,01	0,60	0,10	1,70	0,66	0,34	1,28	75,00
Fondo	0,11	0,15	0,04	0,75	0,66	0,34	0,44	57,87

Se probó al mínimo espaciado (0,15m) en el sector de debajo del piso de alimentación para maximizar su velocidad de arrastre, y al máximo que se puede utilizar según la *Figura 14* (de 0,60m con el valor de k₁ que se tiene) para obtener las velocidades de arrastre de 1,70 m/s y 0,75 m/s. La velocidad de paso del gas se ha calculado simplemente dividiendo el caudal de gas del primer y último plato teórico por la sección calculada a partir del diámetro, además está dentro de los criterios seleccionados anteriormente, fijando que para la parte de arriba la velocidad de paso sea un 75% de la velocidad de arrastre.

Para el dimensionamiento de la columna se va a coger además el espaciado típico de 0,91m por encima del primer y último plato y entre el de alimentación y el primero. Como se calcularon 7 platos reales en vez de los cinco teóricos, se decide poner uno en cada sección de la columna diferenciadas por el piso de alimentación. Es decir, el piso de alimentación en vez de tener su entrada por encima del plato 4, pasa a tenerla por encima del plato 5, teniendo un total de 7 platos más condensador y calderín. Teniendo en cuenta el espaciado escogido de cada sección, y el tiempo de residencia que debe tener una columna de destilación de fondo de líquido (10 min), se calcula la altura total de la columna:

$$H = (0,91 \cdot 3 + 2 \cdot 0,6 + 4 \cdot 0,15)m + (\frac{\frac{3,11m^3}{h} \cdot \frac{1h}{60\min} \cdot 10\min}{0,34m^2}) \cdot 2 = 4,53 + 3,05 = 7,58m$$



Se obtiene una altura de columna total de H = 7,58m, siendo z = 3,05m del nivel de fondo de la columna de líquido (NLL = 1,5m).

Se calcula el espesor y la masa necesaria como se explicó en los otros recipientes, atendiendo que esta vez se pone como temperatura de diseño unos 300°C (por tener margen de unos 10°C) y presión de diseño de P = 1,72 + 1,8 = 3,52bar (presión del fondo más presión de seguridad). Además, se añade el 15% en masa extra de seguridad. Finalmente, se calcula con los datos del *anexo IV* el coste de los platos que son función de su diámetro y del tipo de plato (tamiz, de borboteo o de válvulas). Se escoge válvulas pues suele presentar el precio intermedio y se quiere una buena aproximación. Se recogen los resultados de los costes totales en el apartado económico 4.5.

4.4.9 Separador de membrana (M-102)

En cuanto al separador de membrana, la función de este equipo es la de separar el anhídrido acético del hidrógeno. La corriente llega a una temperatura de 99,9767°C y a 15,57 bar, el anhídrido acético está en forma de gas porque es atrapado en un equilibrio con el hidrógeno.

La bibliografía sobre separadores de membrana [17] indica que si están fabricadas con polímeros su límite de utilización es hasta los 100°C de temperatura, si son de material cerámico se suelen utilizar a partir de los 200°C, si son metálicas por encima de 300°C, y de carbono temperaturas mayores a 500°C.

Se ha escogido utilizar una membrana cerámica porque se ha considerado que los polímeros, aunque son más baratos, funcionan por difusión y no se podría asumir selectividad total hacia la permeación del hidrógeno. En cambio, el material cerámico funcionará como un tamiz molecular microporoso, esto permite asumir que casi exclusivamente las moléculas de hidrógeno sean las que traspasarán la membrana por ser mucho más pequeñas que las del anhídrido acético.

Se ha encontrado una membrana constituida por óxido de silicio y soportada por α -alumina que opera a 100°C con una permeabilidad hacia el hidrógeno de 5,1 · 10⁻² mol m⁻² s ⁻¹bar⁻¹ [18]. Teniendo en cuenta que se tiene un caudal de hidrógeno de 52,20*kmol/h*, se puede calcular la cantidad de membrana necesaria con la siguiente ecuación:

$$M = \frac{P_i}{\partial} \cdot \left(p_{i,entrada}^n - p_{i,salida}^n \right)$$

Donde:

- M: Es el flujo molar del hidrógeno (mol/m^2s) .

- P_{H2} : Es la permeabilidad del hidrógeno a través de la membrana ($mol/m^1s \ bar^n$). *Nótese que por unidades el dato que se tiene corresponde ya a la permeabilidad dividido por el espesor.

- ∂ : Es el espesor de la membrana (m).

- p_i : Es la presión parcial del hidrógeno (*bar*ⁿ).

- n: es el orden de la ecuación que depende del método de transporte. Puede tener un rango de 0,5 a 2.
Si es por difusividad toma un valor de 0,5, en este caso es por permeabilidad por los poros así que toma un valor de 1.

$$M = 5.1 \cdot 10^{-2} \frac{mol}{m^2 \cdot s^{-1} \cdot bar^1} \cdot (15.57^1 - 1.96^1) \ bar = 69.4 \cdot 10^{-1} \frac{mol}{m^2 \cdot s}$$

Superficie = $\frac{N}{M} = \frac{\frac{52.20 kmol}{h} \cdot \frac{1000 mol}{1 kmol} \cdot \frac{1h}{3600s}}{69.4 \cdot 10^{-1} \frac{mol}{m^2 \cdot s}} \cdot 1.1 = 22.98 \ m^2$

Simplemente se ha estimado la superficie con la relación entre el caudal molar que hay de hidrógeno y con el flujo que se puede conseguir, además de por sobredimensionamiento aplicar un 10% más al resultado.

El coste es difícil de cuantificar con bibliografía porque la tecnología de las membranas se basa en patentes. Aun con todo, se puede calcular el coste del equipo, pero no así qué geometría debería tener. Realmente un separador de membrana lo tiene que diseñar el propio fabricante que te vende la membrana con las características que se necesiten. Se va a utilizar el dato de que una membrana óptima actual tendría un coste dentro del rango de $500 - 1000 \notin /m^2$ [19].

C = 22,98
$$\frac{m^2}{ano}$$
 · 750 $\frac{\text{€}}{m^2}$ · $\frac{800,6}{402}$ = 17237,52 €/ano

De la membrana cerámica escogida solo comprobaron en el estudio que perdía permeabilidad tras aumentar mucho la temperatura de operación (no es este caso), pero es tan pequeño el coste que puede considerarse parte de la amortización de los equipos.

4.4.10 Intercambiadores de calor

Todos los intercambiadores se calculan con el mismo procedimiento, incluso el reactor R-101. En el caso del reactor se elige encerrar el haz de tubos en una carcasa, de esta forma se puede operar de forma isoterma como si de un intercambiador de calor se tratase. Se ha decidido desarrollar en la memoria técnica un intercambiador que tenga varias particularidades, de esta forma, los demás se desarrollarán en el *anexo IV* al ser semejantes o más sencillos.

Se va a utilizar como documento de referencia la guía *Heat Exchanger Design* Guide[15], de la cual se van a extraer gráficas y datos bibliográficos.

El proceso de cálculo es sencillo tras haber obtenido por medio de Aspen los caudales de calor que se necesitan aportar o ceder para calentar o enfriar las corrientes respectivamente, además de cuánto caudal de agua o vapor se necesita para enfriar o calentar respectivamente. Después de eso se evalúa la



temperatura media logarítmica, se utilizan los coeficientes individuales de calor típicos bibliográficos, se aplica el ensuciamiento de cada fluido. Por ejemplo, para el intercambiador E-106:

$$\Delta T_{ml, E-106} = \frac{(T_1' - T_2'') - (T_2' - T_1'')}{Ln \frac{(T_1' - T_2'')}{(T_2' - T_1'')}} = \frac{(216, 2 - 124, 8) - (215 - 124, 8)}{Ln \frac{(216, 2 - 124, 8)}{(215 - 124, 8)}} = 42,42^{\circ}C$$

Ecuación 18. Intercambiadores de calor. Temperatura media logarítmica: Ecuación y ejemplo (E-106)

Donde T'_1 hace referencia a la temperatura del fluido caliente, y T''_1 a la del fluido frío. Para evitar cruce de temperaturas se elige una diferencia de 15°C entre la salida de ambos fluidos. Una vez conocido esto se utilizan los datos medios bibliográficos para los coeficientes individuales de transmisión de calor y los correspondientes valores de ensuciamiento.

Para calcular el coeficiente individual de transmisión de calor del fluido frío (consistente en una mezcla de anhídrido acético en un 65%, y anhídrido succínico en un 35%). Este fluido frío puede asimilarse a "organic solvent" [15], tanto en las categorías de líquido fluyendo como vaporización de este, porque parte del líquido se vaporiza y otra parte permanece líquido, por lo que se hace la media de ambos rangos de los coeficientes individuales de transmisión de calor:

$$h_e = \left[\frac{(300+1000)}{2} + \frac{(1000+2500)}{2}\right]/2 = 1200\frac{W}{m^2k}$$

Donde la primera fracción corresponde a si fuese solo fase líquida (Flowing media) y la otra fracción corresponde a la transmisión de calor cuando se vaporiza un "organic solvent". La *Tabla 14* muestra los resultados obtenidos.

Tabla 24. Intercambiador E-106: Pi	opiedades físicas de los	fluidos. Vapor de calefacción	(caliente) y alimento	destilador (frío)

E-106: Fluido	T1' (ºC)	T2' (≌C)	∆Tml	F' (Kg/h)	λ (kJ/Kg)	h _i (W/m ² K)	f _i (m ² K/W)
caliente	216,20	215,00	42,42	990,93	1879,60	7500	1,00E-04
E-106: Fluido	T1" (ºC)	T2" (ºC)	Q' (kW)	F" (Kg/h)	-	h _e (W/m ² K)	f _e (m ² K/W)
frío	124,80	200,70	516,99	6127,48	-	1200	2,00E-04

El parámetro "h" representa los coeficientes de transmisión de calor individuales y el parámetro "f" los factores de ensuciamiento. La distinción entre el subíndice "i" y el subíndice "e" es interno y externo en los casos de doble tubo, y por lado tubos y lado carcasas en los casos de carcacas y tubos respectivamente. Esto va a depender caso a caso, en concreto para el E-106 como el fluido frío va a cambiar parcialmente de fase de líquido a líquido-vapor debería ir en el lado de la carcasa para asumir ese aumento de volumen. Mientras tanto, el vapor de calefacción que va a condensar puede acoplarse en el lado tubos (de no ser por el cambio de fase del otro fluido se habría puesto el vapor en la carcasa porque es más típico).

Una vez obtenido todos los valores, se pasa a calcular el coeficiente global de transmisión de calor con la *Ecuación 19*.

Universidad Rey Juan Carlos

Adrián de Galdo Dapena

$$\frac{1}{U_{E-106}} = \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_e} + f_i + f_e = \frac{1}{7500} + \frac{1}{1200} + (1+2) \cdot 10^{-4} = 1,27 \cdot 10^{-3} \frac{m^2 k}{W}$$
$$U_{E-106} = \frac{1}{1,27 \cdot 10^{-3}} = 789,47 \frac{W}{m^2 k}$$

Ecuación 19. Intercambiador de calor. Coeficiente global de transmisión de calor: Ecuación y ejemplo (E-106)

Con las *ecuaciones 20, 21 y 22* se calcula el valor Z, el rendimiento de calefacción, y otros parámetros para carcasas y tubos:

$$Z = \frac{(T_1' - T_2')}{(T_2'' - T_1'')} = \frac{(216, 2 - 215)}{(200, 7 - 124, 8)} = 1,59 \cdot 10^{-2}$$

Ecuación 20. Intercambiador de calor. Parámetro Z: Ecuación y ejemplo (E-106)

$$\eta_c = \frac{(T_2^{\prime\prime} - T_1^{\prime\prime})}{(T_1^{\prime} - T_1^{\prime\prime})} = \frac{(200 - 124,8)}{(216,2 - 124,8)} = 0,83$$

Ecuación 21. Intercambiador de calor. Rendimiento de calefacción: Ecuación y ejemplo (E-106)

$$W = \frac{Z + 1 + \sqrt{Z^2 + 1} - (2 \cdot X_p \cdot Z)}{Z + 1 + \sqrt{Z^2 + 1} - (2 \cdot X_p)}$$

$$W = \frac{1,59 \cdot 10^{-2} + 1 + \sqrt{(1,59 \cdot 10^{-2})^2 + 1} - (2 \cdot 0,9 \cdot 1,59 \cdot 10^{-2})}{1,59 \cdot 10^{-2} + 1 + \sqrt{(1,59 \cdot 10^{-2})^2 + 1} - (2 \cdot 0,9)} = 0,79 \approx 1 \ carcasa$$

Ecuación 22. Intercambiador de calor. Cálculo del número de carcasas óptimo: Ecuación y ejemplo (E-106)

Se asume que al haber cambio de fase el factor de corrección es FT = 1, y por lo tanto $X_p = 0,9$ [15]. Finalmente, se calcula el coste del equipo asociado al área de intercambio de calor (ecuación descrita en el punto 4.4.1), los datos obtenidos se resumen en la *Tabla 25*.

Tabla 25. Intercambiador E-106. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste (Ejemplo E-106)

	E-106								
1/U (m ² K/W)	U (W/m ² K)	Z	η _c =P	FT	Хр	W	N	A (m ²)	Coste (\$)
1,27E-03	789,47	1,59E-02	0,83	1,00	0,90	9,20	0,79	16,98	26960,16

Resulta correcto haber asumido que se trata de un intercambiador de carcasas y tubos porque el área resulta en $A > 10 m^2$. Los demás intercambiadores se diseñarán de forma análoga, mostrando los resultados en el anexo *IV*.

4.5 Evaluación económica

La evaluación económica comienza evaluando el coste de los equipos principales del proceso, pues con estos se conseguirá deducir por el método de los porcentajes la inversión de capital fijo (que comprende el ISBL (limite interior de batería), el OSBL (límite exterior de batería), el diseño e ingeniería, y los imprevistos), y el capital de trabajo (circulante). Ambos forman el capital inmovilizado.

El procedimiento de cálculo del coste de los equipos ha sido explicado en el punto 4.4.1 y desarrollado en los puntos concretos de cada equipo en la memoria técnica y en el *anexo IV*, donde se ha realizado el dimensionamiento y el cálculo de determinados parámetros del equipo que determinan en gran medida el coste de estos. El resumen de estos costes se sitúa en el *anexo II*.

Se aplica el método de los porcentajes, se han utilizado los que se basan en industrias que contienen tanto sólidos como líquidos[11]. El método consiste en aplicar un determinado factor al coste de los equipos para estimar los costes de partes concretas del proyecto (tuberías, civil, estructuras, etc). El conjunto de estos costes primarios forma el ISBL. Con el ISBL se pasa a deducir el coste del OSBL, el diseño e ingeniería, y se añade una partida para imprevistos.

El ISBL y los otros tres costes que se han estimado a partir de este ISBL se definen como la inversión de capital fijo, utilizando otro factor aplicado a esta misma categoría se obtiene el capital de trabajo (circulante). Finalmente, la suma de estas dos últimas categorías forma el inmovilizado. En la *Tabla 26* se presentan los resultados:

	Coste	(€)		
Equipos (acero al carbono/acero inoxidable)*	/acero inoxidable)* 1.812.062 2.28			
Montaje equipos	906.03	31		
Tuberías	1.368.8	343		
Instrumentación y control	543.62	19		
Electricidad	362.42	12		
Civil	543.63	19		
Estructuras y edificios	362.412			
Aislamiento térmico y pintura	181.20	06		
ISBL	6.549.5	548		
OSBL	2.619.8	319		
Diseño e ingeniería	1.637.3	387		
Imprevistos	654.955			
nversión de capital fijo 11.461.710				
Capitial de trabajo	apitial de trabajo 1.719.256			
Inmovilizado	13.180.	966		

Tabla 26. Evaluación económica: Método de los porcentajes para obtener el ISBL, el capital de trabajo y el inmovilizado

Nota 2. Para el coste correspondientes a tuberías aplica que sean de acero inoxidable los equipos, mientras que para el resto (montaje, electricidad...) no porque el material del que está hecho el equipo es independiente del coste.

La obtención de los precios de las materias primas y el precio de venta del producto se ha explicado en la sección 7.1.7. Los resultados de los costes variables se muestran en la *Tabla 27*.



Tabla 27. Evaluación económica. Costes variables de producción: Materias primas y catalizador, agua de refrigeración y vapor de calefacción, y consumo eléctrico.

		Materias primas, di	solvente y catalizador		
Materias primas	Caudal (kg/h)	Precio (\$/tm)	Factor de operación (h/año)	Costes (\$/año)	Costes (€/año)
Li defenne	147	9.053	80	106.382	97.872
пагодено	42	9.053	7.920	2.985.076	2.746.270
	4.083	766	80	250.205	230.188
Anniarido acetico	14	766	7.920	87.015	80.054
Anhídrida malaica	2.041	900	80	146.987	135.228
Anniando maleico	2.032	900	7.920	14.483.147	13.324.495
Catalizador	Masa (kg/año)	Precio (\$/kg)	-	Coste (\$/año)	Coste (€/año
Nickel-Raney	346	14	-	4.907	4.514
		Agua de r	efrigeración		
Equipo	Caudal (kg/h)	Caudal fresco (kg /h)	Calor cedido (kW)	Coste (€/año·kW)	Costes (€/año)
E-103	874	26	17	35,4	611
E-104	4.725	142	93	0,35*	33
E-104	5.681	170	112	35,0	3.933
E-107	31.046	931	613	25 /	21.713
R-101	40.938	1.228	808	33,4	28.631
		Vapor de	calefacción		
Equipo / Presión entrada - salida (bar)	Caudal (kg/h)	Caudal fresco (kg /h)	Calor captado (kW)	Precio (€/kW·año)	Coste (€/año)
E-101 / 2,32 - 1,82	11.092	333	6.743	1,75*	11.828
E-102 / 2,32- 1,82	97	3	64	1,75*	112
E-106 / 21,18 - 20,68	1.148	34	598	1,75*	1.051
E-106 / 21,18 - 20,68	991	30	517	174	89.913
E-108 / 86,95 - 85,95	803	24	313	176	55.246
		Elect	ricidad		
					0 1 101 7 1

		Liectheidad		
Equipo	Potencia (kW)	Precio (€/MWh)	Factor de operación (h/año)	Coste (€/año)
G-101-A/B	1		80	6
G-102-A/B	4		8 000	2.415
G-103-A/B	1		8.000	572
G-104-A/B	1	72	7.920	566
K-101	120	72	80	686
K-101	125		7.920	70.639
K-102	120		80	686
К-102	125		7.920	70,702

Se va a recalcar la distinción que se ha mencionado en el punto 4.2. y en el *anexo I (7.1.1.)*, se ha distinguido entre el proceso industrial operando de forma estacionaria (99% del factor de operación anual, 7920 de 8000 h), frente al proceso en la puesta en marcha (1% del factor de operación anual, 80 h). Eso se ve claramente en el uso diferente de materias primas y disolvente, además de cambiar cuáles bombas e intercambiadores se utilizan o se dejan de utilizar. Por otro lado, se expone en la *Tabla 28* los datos referentes al producto durante la puesta en marcha y en estado estacionario:

Tabla 28. Evaluación económica: Ventas

Corriente	Caudal (kg/h)	Precio (\$/Tm)	F.op (h/año)	Cambio \$/€	Beneficios (€/año)	Total (€/año)
Anhídrido succínico	2.068	1.500	80	0,92	228.311	22 047 614
	2.088	1.500	7.920	0,92	22.819.303	25.047.014

En cuanto a los costes fijos de producción, se ha establecido un número de 15 trabajadores y un coste de mantenimiento que corresponde al 5% del ISBL. Se han ignorado otros costes fijos típicos (como alquiler de edificios) porque se ha cogido el rango máximo del mantenimiento, que puede englobar a los demás. En la *Tabla 29* se recogen los resultados obtenidos.

Tabla 29. Evaluación económica: Costes fijos de producción

Costes fijos de producción						
Concepto Nº de trabajadores Sueldo (€/año) Costes (€/año)						
Trabajadores	15	38.000	570.000			
Mantenimiento	-	-	327.477			

En la Tabla 30 se resumen los resultados principales de la evaluación económica realizada.

Inmovilizado	13.180.966
Circulante	1.719.256
Inversion	13.563.278
Costes variables de producción: materias primas y catalizador	16.618.622
Costes variables de producción: servicios auxiliares	359.344
Costes fijos de producción	897.477
Costes totales	17.875.443
Ventas	23.047.614

Tabla 30. Evaluación económica. Resumen de la evaluación inicial: Datos para la obtención del VAN, TIR y PayBack

Con estos datos se procede a calcular el VAN (Valor Actual Neto) y el TIR (Tasa Interna de Retorno) del proyecto (ver *Tabla 61* del *anexo V*). Para ello, se ha seguido lo que dice la bibliografía[11]. Lo más relevante es que durante el año 2 y 3 de operación se consideran los factores recomendados a aplicar sobre las ventas y costes totales anuales, puesto que se considera que la planta no opera con sus valores de diseño hasta el año 4. Se ha utilizado una inflación del 3,2% (sacado del INE, dato anual con vistas a mayo de 2023).

Se obtiene un VAN de 23 millones de euros, lo cual indica que el proyecto es viable porque se puede considerar cualquier VAN siempre que este sea positivo. Este resultado se ha obtenido utilizando una tasa de interés del 10%.

El TIR obtenido es del 31%, por lo que el VAN sería positivo hasta tener ese mismo interés, es un porcentaje alto lo que indica que el proyecto es bastante rentable. Este resultado describe el TIR, el cual es la tasa de rendimiento, que mide qué valor de interés hace que el VAN del proyecto se vuelva cero.

Finalmente, en la *Figura 15* se presenta el *PayBack* (Plazo de recuperación), muestra que se empiezan a obtener beneficios a partir del año 5°, momento que se sitúa sobre el primer tercio del proyecto de 16 años de operación (siendo los dos primeros de optimización) y 2 de construcción, lo cual no está mal porque se recupera relativamente rápido. En conclusión, el proyecto es recomendable llevarlo a cabo.



Figura 15. Evaluación económica. Payback



5 Conclusiones.

Se han cumplido los objetivos principales del TFG y se han explicado todas las decisiones tomadas en su desarrollo, las cuales se han defendido atendiendo a criterios técnicos y económicos. De esta forma, las principales conclusiones del presente trabajo son:

- Se ha diseñado una planta con una capacidad de producción de 16700 ton/año de anhídrido succínico con especificaciones de alta calidad (99% de pureza).

- Se han dimensionado y diseñado mecánicamente de cuatro recipientes (un mezclador, un separador líquido-gas, un destilador multietapa, y el depósito del condensador del destilador), el reactor, un separador de membrana, tres pares de bombas, dos compresores y ocho intercambiadores de calor.

- El tamaño del reactor (de lecho fijo) se ha determinado mediante una optimización basada en minimizar los costes asociados al acondicionamiento de las materias primas, la cantidad de catalizador empleada y el tamaño final del equipo. Los resultados mostraron que la configuración más adecuada implica trabajar con la menor presión (manteniendo una relación molar H2/maleico de 3,5) y la mayor temperatura posible (de acuerdo a los rangos existentes en bibliografía), reduciendo al máximo la cantidad de catalizador empleada.

- El reactor opera a 100°C, y tiene un gradiente de presión de 16,5 a 15 bar. El volumen final obtenido para el reactor de la planta es de 180 m³, siendo 86m³ ocupados por el catalizador (porosidad del 48%). Se compone de 146 tubos (2,43 m de longitud) con el diámetro normalizado de 0,0254 m, y debe ser refrigerado con agua de refrigeración (40939 kg/h) porque libera 808,3 kW debido a la reacción exotérmica.

- Para el diseño en detalle del reactor (multitubular) se siguió un proceso de iteración que consistía en seleccionar un diámetro de tubo. Del diámetro de tubo y del tamaño de partícula se extrae una porosidad típica con la que conocido el volumen de catalizador se puede calcular el volumen total que debe obtenerse al final. A continuación, conocido el caudal, se determinaba o la velocidad o el área de paso para sacar el número de tubos. Teniendo todos los datos anteriores se saca la pérdida de carga por unidad de longitud. Se calcula la longitud a partir del límite de no perder un 10% de la presión de entrada. Conocidas la longitud, diámetro y número de tubos se extrae el volumen real, el cual debe cuadrar con la porosidad inicial y volumen del principio.

- El destilador se ha diseñado para que sea capaz de adecuar la gran diferencia de fase líquida y gas que hay por encima y por debajo del plato de alimentación, separando más o menos los platos, por lo que en el sector de enriquecimiento los platos tienen un espaciado de 0,6 m y en el de agotamiento de 0,15 m. El diámetro es de 0,66 m en toda la columna, con un número total de 7 platos reales (el de alimentación se encuentra por encima del quinto) más el condensador total y calderín. La altura total del destilador es de 7,58 m, siendo 1,5 m la altura normal de líquido del fondo.

- El diseño propuesto plantea la integración energética entre corrientes de la planta, lo que permite ahorrar costes variables. De esta forma se utiliza la corriente de acético que sale del destilador y la de hidrógeno producida en el segundo compresor para calentar los reactivos que entrarían en el reactor. Además, se ha utilizado la energía del fondo del destilador para un precalentador, que reduce el consumo del intercambiador que acondiciona la alimentación del destilador en 81,75 kW.

- Se ha evaluado la rentabilidad económica del proyecto a través del VAN, el TIR, y el PayBack. La inversión se recupera en el primer tercio del proyecto y se acaba consiguiendo 23 millones de euros de VAN, también se tiene mucha buena holgura del interés, pues se ha obtenido un 31% de TIR. El resultado es favorable y por tanto el proyecto es rentable y sería recomendable llevarlo adelante.



6 Bibliografía.

- United Nations Environment Programme, "Water Pollution by Plastics and Microplastics: A Review of Technical Solutions from Source to Sea," 2020. Accessed: Dec. 01, 2022. [Online]. Available: https://wedocs.unep.org/xmlui/handle/20.500.11822/34424
- [2] Fritz Ullmann, Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 2222222nd ed. 1996.
- [3] N. Alonso Fagúndez, M. López Granados, and R. Mariscal López, "Procedimiento para la oxidación de furfural a ácido maleico," 2558261, 2016
- [4] C. Delhomme, D. Weuster-Botza, and F. E. Kuhn, "Succinic acid from renewable resources as a C4 building-block chemical—a review of the catalytic possibilities in aqueous media," *The Royal Society of Chemistry*, vol. 11, pp. 13–26, 2009.
- [5] Kirk-Othmer, *Encyclopedia of Chemical Technology*, 4th ed., vol. 22. 1998.
- [6] J. M. Pinazoa, M. E. Dominea, V. Parvulescub, and F. Petru, "Sustainability metrics for succinic acid production: A comparison between biomass-based and petrochemical routes," *Catal Today*, vol. 239, pp. 17–24, 2015.
- [7] D. Morán, "BioRefineries Blog," Biorrefinerías de ácido succínico. Accessed: Jan. 28, 2023.
 [Online]. Available: https://biorrefineria.blogspot.com/2015/10/biorrefinerias-de-acido-succinico.html
- [8] S. Tomczyk, S. Ozturk, T. Wawrzyniak, M. Tessman, C. Ehrlich, and F. Shaikh, "The design and techno economic analysis of a succinic acid production facility," *Sustainable Chemical Process design*, vol. 3, 2022.
- [9] Y. Feng, H. Yin, A. Wang, T. Xie, and T. Jiang, "Selective hydrogenation of maleic anhydride to succinic anhydride catalyzed by metallic nickel catalysts," *Appl Catal A Gen*, vol. 425–426, pp. 205–212, May 2012, doi: 10.1016/j.apcata.2012.03.023.
- [10] "London Metal Exchange (HKEX)." Accessed: Jun. 25, 2023. [Online]. Available: https://www.lme.com/
- [11] R. Sinnot and G. Towler, *Diseño en ingeniería química*, 5th ed. Reverte, 2012.
- [12] G. Jandjel, "Select the Right Compressor," *Chem Eng Prog*, vol. 96(7), pp. 15–29, Jul. 2000.
- [13] G. F. Froment, K. B. Bischoff, and J. De wilde, *Chemical Reactor Analysis and Design*, 3rd ed. Hamilton Printing Company, 2010.
- [14] A. k. A. AlAssel et al., Hydrogenation: Catalysts and Processes Google Libros. 2018. Accessed: Jun. 25, 2023. [Online]. Available: https://books.google.es/books?id=7IJyDwAAQBAJ&printsec=frontcover&dq=Hydrogenation:+ Catalysts+and+Processes&hl=es&sa=X&redir_esc=y#v=onepage&q=Hydrogenation%3A%20Ca talysts%20and%20Processes&f=false
- [15] M. Nitsche and R. O. Gbadamosi, *Heat Exchanger Design Guide: Practical guide for planning, selecting and designing of shell and tube eschangers*. 2015.
- [16] R. Turton and J. A. Shaeiwitz, *Chemical Process Equipment Design*, 1st ed. Financial Times Prentice Hall, 2017.



- [17] S. C. A. Kluiters, "Status review on membrane systems for hydrogen separation: Intermediate report EU project MIGREYD BBE5-2001-670," Dec. 2004.
- [18] S. Gopalakrishan and J. Dinizdacosta, "Hydrogen gas mixture separation by CVD silica membrane," J Memb Sci, vol. 323, no. 1, pp. 144–147, Oct. 2008, doi: 10.1016/j.memsci.2008.06.016.
- [19] R. Bredesen, K. Jordal, and O. Bolland, "High-temperature membranes in power generation with CO2 capture," *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 43, no. 9, pp. 1129–1158, Sep. 2004, doi: 10.1016/j.cep.2003.11.011.
- [20] Statista, "Electricidad: precio medio final España 2010-2022." Accessed: Apr. 10, 2023.
 [Online]. Available: https://es.statista.com/estadisticas/993787/precio-medio-final-de-laelectricidad-en-espana/
- [21] E. Pérez, "Vuelve a ser el momento del PVPC: qué ha cambiado en 2023 y en qué hay que fijarse para conseguir la luz más barata." Accessed: Apr. 10, 2023. [Online]. Available: https://www.xataka.com/energia/vuelve-a-ser-momento-pvpc-que-ha-cambiado-2023-quehay-que-fijarse-para-conseguir-luz-barata
- [22] Energy Information Administration (EIA), "Henry Hub Natural Gas Spot Price (Dollars per Million Btu)." Accessed: Apr. 10, 2023. [Online]. Available: https://www.eia.gov/dnav/ng/hist/rngwhhdd.htm
- [23] W. D. Seider, J. D. Seader, and D. R. Lewin, *Product and Process Design Principles Synthesis, Analysis, and Evaluation*, 2nd ed. John Wiley and Sons, 2009.

7 ANEXOS.

7.1 Anexo I. Asunciones específicas

En la memoria técnica de este proyecto se han tomado ciertas decisiones que van más allá de los criterios de diseño típicos y que son concretos al proyecto estudiado.

7.1.1 Puesta en marcha y estado estacionario de la planta

A lo largo de la memoria se ha ido describiendo diferencias entre la planta cuando opera en estado estacionario y se hace la distinción a sus puestas en marcha. Esto influye de cara a los equipos que deben emplearse (ver punto 4.2.) y al factor de operación empleado por cada equipo, además de los costes variables asociados a los equipos y las materias primas que se utilicen.

La distinción clave es dejar de tener que aportar tanto anhídrido acético fresco porque este se recircula casi completamente en estado estacionario. Esto provoca no tener que utilizar una pareja de bombas (G-101-A/B) puesto que están diseñadas para un caudal muy grande respecto a cuando se necesitan otras bombas más pequeñas para el acético fresco en estado estacionario (G-104-A/B).

Además de esta impulsión, también se dejan de utilizar dos intercambiadores de calor en estado estacionario porque la integración energética de la planta ya asume que no se necesiten (E-101 y E-102), aunque pueden servir por *bypass* si en un determinado momento hay fluctuaciones operativas y se necesitase cierto control de temperatura.

Se ha diseñado el E-106 con el área de cuando se necesita mayor vapor de calefacción, pero después este puede asumir menor vapor para cuando se está en estado estacionario porque se ahorra parte de la energía con el E-105 el cual emplea el producto del fondo del destilador en estado estacionario.

Se ha asumido que la puesta en marcha tiene un impacto en el factor de operación de la planta en un 1% del total anual. Esto quiere decir que la planta que opera con un factor de 8000 h/año, presenta 80 horas en las que se utilizan esos equipos mencionados (G-101-A/B, E-101 y E-102), y el resto del tiempo, 7920h, se operan con todos los demás (además de las G-104-A/B).

7.1.2 Disolvente utilizado

Se quiere expresar que se ha utilizado como disolvente el anhídrido acético frente a los otros disolventes porque por las gráficas del artículo científico empleado es el que aumenta más la conversión hacia el succínico (a una temperatura y presión dadas), además de ser el disolvente que el estudio escogió para los experimentos de la conversión con el tiempo a diferentes temperaturas (es del que se dispone de más datos). Por otro lado, es menos perjudicial y/o peligroso a otros disolventes industriales como el 1-4 dioxano que también se suele utilizar como disolvente para el anhídrido maleico.

7.1.3 Material estructural empleado

Se ha utilizado la siguiente tabla que relaciona materiales que se pueden emplear con el anhídrido[16].

Tabla 31. Material estructural: Material compatible con el anhídrido acético[16].

Chemical Component	Carbon Steel	304 Stainless Steel	316 Stainless Steel	Aluminum	Copper	Brass	Monel	Hastelloy C	Titanium	TFE	Graphite
Acetaldehyde	Ν		А			С		А	А	А	А
Acetic acid, glacial	N		А	Α	А	С	В	Α	А	А	А
Acetic acid, 20%	N	Α	А	Α	А	С	в	А	А	А	А
Acetic anhydride	N	Α	в	А	Α	С		А	А	А	А

Los anhídridos maleico y succínico no son tan corrosivos como el acético, y el hidrógeno presenta sus propias limitaciones (como la fragilización por hidrógeno). En sí, la elección obvia sería el aluminio o el acero inoxidable 304, se escogió este último en toda la planta por simplicidad y ser un material mecánicamente más resistente.

7.1.4 Cambio de moneda

Se ha estimado un periodo de los 5 últimos años (marzo 2018-febrero 2023) del cambio del dólar por euro, el valor más fuerte del euro ha correspondido con un cambio de 1,25\$/€, y el más débil de 0,96\$/€. En los cálculos en los que haya que cambiar de divisa se escogió el valor central: 1,09\$/€.

7.1.5 Tratamiento de datos y notación

En lo que afecta a la documentación técnica y los datos utilizados y expuestos, en el informe se han aproximado generalmente a dos decimales, utilizando más en caso de ser necesario por distinción en una misma columna de datos, o utilizando la notación científica. Sin embargo, se ha trabajado en Excel utilizando todos los decimales, por lo que puede haber pequeñas incongruencias si se utilizan las ecuaciones de las gráficas, pues están redondeadas para ver mejor los datos significativos.

7.1.6 Elección del tipo de compresor

Se han seguido varios criterios para escoger entre un compresor centrífugo politrópico, o como ha resultado siendo, un compresor de tipo **pistón o reciprocante isentrópico**:

- Tamaño de partícula: se expone que un compresor centrífugo es mejor para moléculas de masas molares superiores a los 10 g/mol; como es para impulsar hidrógeno, un compresor centrífugo tendría mucha menos eficiencia que uno de tipo pistón.
- Caudal: El caudal es realmente pequeño para utilizar un compresor centrífugo y su eficiencia sería pequeña (en las condiciones mínimas de caudal de operación se llegan a alrededor de 0,045m³/s, en la salida de la última etapa). El caudal, sin embargo, no es determinante en uno de tipo pistón, a menos que se tenga uno demasiado grande.
- Relación P₂/P₁: El compresor de tipo pistón sin aceite permite una relación de hasta P₂/P₁=5, mientras que un centrífugo solo permite hasta una relación de P₂/P₁=3; esto ayuda a poder tener menos etapas y menos equipos. Uno con aceite permitiría una relación incluso mayor, pero habría que gastar más en refrigerar porque su temperatura máxima es bastante menor, por lo que este no compensa.

En sí, el compresor de tipo pistón sin aceite puede asegurar 5 años de periodo de vida, y 24000h de operación seguidas. Puede aguantar temperaturas de salida de entre 200 y 260°C, aunque por encima de los 150°C es posible que los anillos y las válvulas necesiten reponerse tras 1-2 años de operación.

La bibliografía [12]deja claro que se estaban probando nuevos materiales más resistentes a la temperatura ya en el año 2000. Aun así, se considera no sobrepasar el límite superior de 260°C, y no se



considera por lo anterior mencionado el posible gasto de los repuestos en materiales, al haber dado ya tiempo a la tecnología a mejorar o a abaratar sus costes de repuesto.

7.1.7 Precios de las materias primas y producto

Para dar homogeneidad a los datos de los costes de las materias primas y beneficios del producto se ha tratado de utilizar fuentes de la misma procedencia. Se ha escogido para los anhídridos basarse en el mercado asiático puesto que parecen datos más o menos representativos a cuando no había estallado aún la guerra entre Rusia y Ucrania.

Para conocer el coste del anhídrido succínico se ha empleado el anuncio https://www.alibaba.com/product-detail/Succinic-Anhydride-CAS-108-30-

<u>5_1600622872935.html?s=p</u>, hay otros anuncios que lo tienen a menor coste, pero estos no presentan tanta capacidad de producción por lo que es inviable la comparativa a la escala de una industria, y que por lo tanto no influyen en el mercado. Se puede observar que se ha escogido el menor rango del anuncio (1,5 \$/ton frente a 5,5 \$/ton) para acotar al máximo el posible beneficio y poder comprobar si aun así es rentable el proyecto con ese precio de succínico del rango.

Para el coste del acético, el maleico y el hidrógeno se ha empleado una página diferente que sí presenta datos de los costes año a año: <u>https://www.chemanalyst.com/</u>. Se ha comprobado que los costes referenciados ahí fuesen comparables con los del anuncio del succínico anterior, y ambas páginas parecen serlo. Se ha escogido el coste asiático del maleico en 2020 (porque actualmente están bajando de nuevo a esos valores porque la relación entre Asia y Estados Unidos ha mejorado) que rondaba los 900\$/ton, el coste asiático del anhídrido acético en 2023, y el coste europeo del hidrógeno en 2023, el cual se espera que baje considerablemente por el proyecto europeo de la ampliación de hidrógeno verde.

El hidrógeno se ha escogido que sea el europeo por ser un gas que necesita un gran coste energético para ser comprimido, no es tan fácil de transportar como los anhídridos los cuales pueden ir fundidos o en estado sólido y pueden importarse mejor.



7.2 Anexo II. Coste equipos

7.2.1 Tabla para el coste de los equipos: U.S. Gulf Coast basis, enero 2007

Se dispone la *Tabla 32* utilizada para la *ecuación 2*.

Tabla 32. Parámetros para la ecuación 2. Tabla extraída de Diseño en Ingeniería Química[11]

- 100 - 100	Unidades		-				
Equipo	para tamaño, S	Sinferior	S _{superior}	α	ь	n	Nota
Hornos							
Cilíndrico	potencia, MW	0,2	60	68 500	93 000	0,8	
Caja	potencia, MW	30	120	37 000	95 000	0,8	
Rellenos							
Anillos Raschig ai 304	m ³			0	73 000	1.0	
Sillas cerámica intalox	m ³			0	1800	1.0	
Anillos Pall ai 304	m ³			0	7700	1.0	
Relleno estructurado de PVC	m ³			0	500	1.0	
Relleno estructurado ai 304	m ³			0	6900	1,0	4
Recipientes a presión							
Vertical, ac	masa carcasa, kg	160	250 000	10 000	29	0.85	5
Horizontal ac	masa carcasa, kg	160	50 000	8800	2.7	0.85	
Vertical ai 304	masa carcasa, kg	120	250.000	15,000	68	0.85	5
Horizontal, ai 304	masa carcasa, kg	120	50 000	11 000	63	0,85	~
Romhos v motores							
Contrifuga de una etana	caudal 1/s	0.2	126	6900	206	0.9	
Motor de evolosión	notencia kW	1.0	2500	-950	1770	0,5	
Turbina de vapor de agua condensante	potencia, kW	100	20 000	-12 000	1630	0,75	
Cintas transportadoras							
Cinta, 0,5 m ancho	longitud, m	10	500	36 000	640	1,0	
Cinta, 1,0 m ancho	longitud, m	10	500	40 000	1160	1,0	
Elevador de cangilones, cangilón 0,5 m	longitud, m	10	30	15 000	2300	1,0	
Trituradoras							
Molino de martillos reversible	t/h	30	400	60 000	640	1,0	
Pulverizadores	kg/h	200	4000	$14\ 000$	590	0,5	
Cristalizadores							
Cristalizador de superficie raspada	longitud, m	7	280	8400	11 300	0,8	
Columnas de destilación							
Véase recipientes a presión.							
rellenos y platos							
Secaderos							
Rotatorio de contacto directo	área, m ²	11	180	13 000	9100	0,9	1
Bandejas atmosféricas por cargas	área, m ²	3,0	20	8700	6800	0.5	2
Secadero por pulverización	caudal evap., kg/h	400	4000	350 000	1900	0,7	
Evaporadores							
Tubos varticalas	área m ²	11	640	280	30 500	0.55	
Película descendente agitada	área, m ²	0.5	12	75 000	56 000	0,55	
r cheula desectidente agrada	area, m	0,5	12	75 000	50 000	0,75	
Intercambiadores	· · · · 2	10	1000	24,000	16	1.2	
Carcasa y tubos, tubos en U	area, m-	10	1000	24 000	46	1,2	
Doble tubo	area, m-	1,0	80	1600	2100	1,0	
Caldera de termosilon	area, m-	10	500	26 000	104	1,1	
Caldera de tubos en U	area, m-	10	500	25 000	540	0,9	
Placas y marcos	arca, m-	1,0	500	1350	180	0,95	3
Filtros							
Placas y marcos	capacidad, m'	0,4	1,4	110 000	77 000	0,5	
Tambor a vacio	área, m ²	10	180	-63000	80 000	0,3	



	Unidades						
Equipo	para tamaño, S	Sinferior	S _{superior}	α	ь	n	Nota
Agitadores & mezcladores							
Hélice	potencia motor, kW	5,0	75	15 000	990	1,05	
Mezclador de cinta en espiral	potencia motor, kW	5,0	35	27 000	110	2,0	
Mezclador estático	L/s	1.0	50	500	1030	0,4	
Calderas							
15 a 40 bar	kg/h vapor de agua	5000	200 000	106 000	8,7	1,0	
10 a 70 bar	kg/h vapor de agua	20 000	800 000	110 000	4,5	0,9	
Centrífugas							
Disco de alta velocidad	diámetro, m	0,26	0,49	50 000	423 000	0,7	
Cesta suspendida atmosférica	potencia, kW	2,0	2,0	57 000	660	1,5	
Compresores							
Ventilador	m 3/h	200	5000	3800	49	0,8	
Centrífugo	potencia motor, kW	75	30 000	490 000	16 800	0,6	
De pistón	potencia motor, kW	93	16 800	220 000	2300	0,75	
Reactores							
Agitado, encamisado	volumen, m3	0,5	100	53 000	28 000	0,8	3
Agitado, encamisado, vidriado	volumen, m ³	0,5	25	11 000	76 000	0,4	
Tanques							
Techo flotante	capacidad, m3	100	10 000	97 000	2800	0,65	
Techo cónico	capacidad, m ³	10	4000	5000	1400	0,7	
Platos							
Platos tamiz	diámetro, m	0,5	5,0	110	380	1,8	6
Platos de válvulas	diámetro, m	0,5	5,0	180	340	1,9	6
Platos de campanas de borboteo	diámetro, m	0,5	5,0	290	550	1,9	6
Servicios							
Torre de enfriamiento & bombas	caudal, L/s	100	10 00	150 000	1300	0,9	7
Refrigerador mecánico relleno	potencia evaporador, kW	50	1500	21 000	2100	0,9	
Planta de intercambio iónico para agua	caudal, m3/h	1	50	12 000	5400	0,75	

Notas:

- 1 Calentador directo.
- 2 Funcionamiento con gas.
- 3 Acero inoxidable del tipo 304.
- 4 Con área superficial de 350 m²/m³.
- 5 No incluye calentadores, puertos, soportes, internos, etc. (véase Capítulo 13 para calcular el espesor de la pared).
- 6 Coste por bandeja, basado en una pila de 30 bandejas.
- 7 Montaje de campo
- 8 Todos los costes son en base U.S. Gula Coast, Enero 2007 (índice CE (CEPCI) = 509,7, NF índice de inflación de la refinería = 2059,1)

En aquellos cálculos donde se esté fuera del rango inferior se cogerá el límite de rango.

7.2.2 Resumen del coste de los equipos

La obtención del coste de los equipos necesita del dimensionamiento previo de estos, este dimensionamiento se sitúa en los apartados propios de la memoria de cada uno o en el *anexo IV*. Algunos equipos ya han sido estudiados económicamente también en sus propios apartados. El proceso de cálculo general se situó en el punto *4.4.1*. Los resultados se recogen en la *Tabla 33*.



Tabla 33. Evaluación económica: Coste de los equipos

Equipo	2007 (\$)	2023 (\$)	2023 (€, España)	2023 (€, acero inoxidable)
Mezclador M-101 ⁽¹⁾	30.972	48.649	50.575	50.575
Separador de membrana M-102 ⁽²⁾ (€)	17.238	-	38.792	50.430
Reactor R-101	28.822	45.272	47.064	61.184
Separador Líquido-Vapor C-101 ⁽¹⁾	45.924	72.134	74.991	74.991
Destilador multietapa C-102 ⁽³⁾	42.486	66.734	69.377	70.527
Recipiente D-101 ⁽¹⁾	23.169	36.392	37.833	37.833
Bombas G-101-A/B ⁽⁴⁾	15.911	24.993	25.982	32.974
Bombas G-102-A/B ⁽⁴⁾	20.960	32.923	34.226	41.311
Bombas G-103-A/B ⁽⁴⁾	16.128	25.333	26.336	33.433
Bombas G-104-A/B ⁽⁴⁾	15.537	24.404	25.370	32.178
Compresor K-101	305.827	480.372	499.394	649.212
Compresor K-102	305.885	480.462	499.488	649.334
Cambiador de calor E-101	118.345	185.888	193.250	251.224
Cambiador de calor E-102	5.977	9.389	9.760	12.688
Cambiador de calor E-103	11.048	17.353	18.040	23.452
Cambiador de calor E-104	16.761	26.328	27.370	35.581
Cambiador de calor E-105	9.252	14.532	15.107	19.639
Cambiador de calor E-106	26.960	42.347	44.024	57.231
Cambiador de calor E-107	17.686	27.780	28.880	37.544
Cambiador de calor E-108	28.294	44.443	46.202	60.063
Total equipos	1.103.182	1.705.724	1.812.062	2.281.405

- Nota (1): Al tratarse de recipientes ya se han diseñado de forma que cumplen con ser de acero inoxidable.

- Nota (2): El separador de membrana por bibliografía ya se obtenía en euros, por lo que no se ha aplicado cambio de moneda. (Ver sección 4.4.9.)

- Nota (3): El recipiente del destilador es de acero inoxidable, pero para sus platos se ha tenido que utilizar el factor de 1,3 pues su base era de acero al carbono.

- Nota (4): Al coste del motor no se le aplica el factor de cambio de material al acero inoxidable, solo a la aportación en el coste en la bomba

Se tiene una primera columna que describe los costes de los equipos en dólares si se hubiesen adquirido en 2007, la segunda columna actualiza los precios a la actualidad con el índice CEPCI, la tercera columna aplica un factor geográfico para la localización (de la bibliografía se coge Francia, se asume que puede corresponder a España) además de cambiar el curso legal al euro, finalmente la última columna pasa el coste al material empleado, pues el valor base es en acero al carbono, el cual se necesita para casi todas las categorías que conforman el ISBL, pero también se requiere el coste en acero inoxidable para extrapolar el coste de las tuberías.



7.3 Anexo III. Desarrollo servicios auxiliares

• Costes electricidad:

Se ha recogido el precio medio final en euros por megavatio hora por año desde el 2010 hasta el 2022[20] en la *Tabla 34*. El precio era realmente estable hasta antes de la guerra de Rusia con Ucrania (debido al aumento del precio del gas natural).



Año	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021	2022
€/MWh	45,83	60,22	59,57	55,79	55,05	62,84	48,42	60,55	64,37	53,41	40,37	118,7	204,7

Por otro lado, se estima que los valores de la electricidad de cara al PVPC van a mantenerse en 2023 en los 207,88€/MWh, para 2024 situarse en los 129,66€/MWh, y acabar en los 78,19€/KWh para 2025.

Se ha decidido hacer un promedio que resulta en 71,52€/MWh en el intervalo de precios medios finales entre el 2010 y el 2022, y se espera que el valor de la electricidad baje bastante en tan solo los tres próximos años.

Como puede observarse, el promedio no se aleja del valor para 2025, y es de suponer que siga bajando en los siguientes años por el aumento de las energías renovables y disminución del gas natural y su dependencia[21]. Como la planta no operaría hasta después de dos años de construcción, el valor promedio estimado será correcto porque se espera esa disminución en el precio del gas.

• Gas natural:

Se ha recogido el precio del coste por energía del gas natural desde el 1 de enero de 2021 hasta el 22 de febrero de 2023[22] en la *Figura 16*.



Figura 16. Servicios auxiliares: Precio gas natural

Se ha decidido hacer un promedio y calcular la desviación estándar, además de utilizar el cambio de divisa 1,087\$/€, mostrado en la *Tabla 35*.

Tabla 35. Servicios auxiliares: Precio gas natural

Normal (\$/GJ)	+Desviación (\$/GJ)	\$/€	Normal (€/GJ)	+Desviación (€/GJ)
4,76	6,78	1,09	4,38	6,24

La desviación podría utilizarse para comprobar cómo afecta el encarecimiento del coste del gas natural en el proceso Además de poder integrar un análisis de sensibilidad al cambio de moneda. Aunque no se ha añadido al contenido del trabajo.

Coste agua

El coste de agua en España es de media 1,97€/m³(https://www.canaldeisabelsegunda.es/), por bibliografía se sabe que el precio de su impulsión es de unos 1,5kWh/3,8 m³, y si se quiere desmineralizada el coste del agua es de alrededor del doble[11]. Se resume en la Tabla 36.

Tabla 36. Servicios auxiliares. Precio del agua bruta y desmineralizada, y de su impulsión

	Agua									
Sin tratar (€/kg)	Desmineralizada (€/kg)	Consumo eléctrico (MWh/kg)								
1,97E-03	3,94E-03	3,95E-07								

Se ha decidido añadir también el coste que supone emplear agua de refrigeración, y vapor de calefacción por unidad calorífica para facilitar los cálculos posteriores. Los datos desarrollados del consumo de vapor de calefacción o agua refrigeración vienen desarrollados en este mismo apartado más adelante:

• Agua de refrigeración

El agua de refrigeración tiene ya el coste asociado de la electricidad para su impulsión, pero se debe calcular cuánto supone de consumo por energía de calor robada por ella. Se va a tener en cuenta que el el gradiente térmico sea de $\Delta T = 49 - 32 = 17$ °C. Este gradiente térmico es uno común en la industria química[23]. En el rango de temperatura estudiado, el calor sensible del agua puede considerarse constante e igual a $C_p = 4,181 \frac{kJ}{ka \cdot k}$. Por lo tanto, para calentar 1kW:

$$Caudal_{bruto,1kW} = \frac{Q}{C_p \cdot \Delta T} = \frac{1\frac{kJ}{s} \cdot 3600\frac{s}{h}}{4,181\frac{kJ}{kg \cdot k} \cdot 17k} = 50,65\frac{kg}{h}$$
$$Caudal_{agua\ fresca,1kW} = 50,65\frac{kg}{h} \cdot 0,03 = 1,52\frac{kg}{h}$$

Se sabe que por cada litro de agua que se utiliza, un 3% se pierde al recircularla y debe ser añadida como agua fresca al sistema, es por ello que, se ha diferenciado entre el agua bruta que se consume (para poder calcular el coste del consumo eléctrico), con el coste del agua fresca que supone (para el consumo de agua):

Universidad Rey Juan Carlos

Adrián de Galdo Dapena

$$C_{refrig,1kW} = \left(1,97 \cdot 10^{-3} \frac{\epsilon}{kg} \cdot 1,52 \frac{kg}{h} + 50,65 \frac{kg}{h} \cdot 3,95 \cdot 10^{-7} \frac{MWh}{kg} \cdot 71,52 \frac{\epsilon}{MWh}\right) \cdot 8000 \frac{h}{a\tilde{n}o}$$
$$C_{refrig,1kW} = 35,42 \frac{\epsilon}{a\tilde{n}o}$$

Por lo tanto, el coste de enfriar con agua de refrigeración supone $35,42 \frac{\epsilon}{a \| o \cdot k W}$, habiendo atendido tanto al consumo eléctrico de su impulsión como al consumo de la propia agua fresca nueva. Se ha ignorado el coste de la primera agua que entra al sistema porque su coste es ínfimo frente al coste anual de las otras dos. Dimensionalmente, se refieren a por un kW, por lo que puede añadirse como denominador.

• Agua de calefacción: baja presión

El agua de calefacción a baja presión se utilizará para calentar el agua de alimentación del reactor y el anhídrido acético antes de que entre al mezclador, este último es el limitante por alcanzar una temperatura alta, hasta los 113,15°C. Interesa que el vapor de agua se encuentre en su punto de saturación y a mínimo 10-15°C superior a la temperatura final que se quiere alcanzar. Por lo que se ha decidido que sea vapor saturado que se encuentre a 125°C, que es un valor dentro del rango permitido.

Para las calderas se suele emplear agua desmineralizada, por lo que se cogerá el coste de esta. Se ha calculado con la ecuación *6.18* del libro de *Diseño en ingeniería química* con ciertas variaciones:

$$P_{combustible\ consumido,1kW} = \left(\frac{1\frac{kJ}{s} \cdot 3600\frac{s}{h} \cdot 4,37 \cdot 10^{-6}\frac{\epsilon}{GJ}}{\frac{0,85+0,6}{2}}\right) \cdot 8000h = 173,59 \epsilon un\ kW$$

El denominador de la primera fracción representa la media de las eficiencias de una caldera típica (entre 60 y 85%), el valor de 4,37 $\cdot 10^{-6} \frac{\epsilon}{GI}$ es el precio de la energía trasmitida por el combustible.

$$P_{agua\ consumida,1kW} = \left(\frac{1\frac{kJ}{s}\cdot 3600\frac{s}{h}}{2188,4\frac{kJ}{kg}}\cdot 0,03\cdot 3,94\cdot 10^{-3}\frac{\epsilon}{kg}\right)\cdot 8000h = 1,55\epsilon\ un\ kW$$

Se ha escogido el calor latente del agua saturada a 125°C. También se ha tenido en cuenta de nuevo fugas de un 3% de agua que hay que reponer con agua fresca. Ignorando el coste del primer agua consumida por la instalación.

Se puede observar que el coste de vaporizar es en gran medida por el combustible consumido, más que por el consumo de agua. La suma de ambos hace unos 175€ por kW de calefacción a baja presión.



• Agua de calefacción: media y alta presión

El proceso de cálculo sería el mismo para media y alta presión, simplemente se han utilizado los calores latentes a 204°C de temperatura (1924,7 kJ/kg) y a 300°C (1404,9 kJ/kg) en vez del del ejemplo anterior. Se resumen los costes de utilizar agua o vapor en base a kW captado o cedido en la *Tabla 37*.

Tabla 37. Servicios auxiliares. Precio del agua de refrigeración y del vapor de calefacción por kW cedido o captado

Agua	Vapor						
Refrigeración (€/año·kW)	A baja presión (€/año·kW)	A media presión (€/año·kW)	A alta presión (€/año·kW)				
35,42	175,42	175,67	176,28				

Se puede observar que como no se ha tenido en cuenta el calor sensible, el precio del vapor es muy parecido a baja, media y alta temperatura. Debería ser fiel a estos resultados el precio en estado estacionario, donde se utilice constantemente agua saturada en recirculación como alimentación para el vapor que entra a la caldera.

7.4 Anexo IV. Resto de equipos. Análogos a anteriores o de cálculo sencillo

7.4.1 Mezclador (M-101)

El anhídrido maleico es introducido en el mezclador M-001 en estado sólido y condiciones atmosféricas, junto al anhídrido acético que ha sido acondicionado por el intercambiador E-101 (solo en la puesta en marcha) hasta resultar en una corriente de entrada a 113,15°C. El balance energético de ambas corrientes encuentra su equilibrio térmico a los 50°C, temperatura a la que el maleico se funde y pasa a estado líquido, ayudando a la disolución de este en el acético.

El mezclador sirve a modo de recipiente, que además de homogenizar la corriente de entrada al reactor, la almacena y ayuda a mantener un caudal constante al reactor. Las ecuaciones utilizadas han sido descritas en el punto sobre información previa para los recipientes (4.4.5.)

El mezclador es el recipiente más sencillo de calcular. Como su rango de temperatura puede variar de 25°C (maleico puro) a 113,5°C (acético puro), se escoge el valor de la tensión máxima definida por la temperatura más alta, pues esta temperatura resulta en la tensión mínima por lo que se observa en la *figura 11*. Se escoge por otro lado como presión de diseño la de máxima impulsión de la bomba al ser superior a las presiones de vapor de los compuestos a la temperatura dada. Se dispone con ello de todos los datos necesarios:

$$V = 5,54 \frac{m^3}{h} \cdot 10min \cdot \frac{1h}{60min} \cdot 2 \cdot 1,10 = 2,03 \ m^3$$

El factor de 2 de la ecuación anterior corresponde a doblar el volumen porque en continuo el equipo estará lleno solo por la mitad de este (valor de nivel normal), necesitando por lo tanto el doble de volumen, además se ha aplicado al caudal un aumento del 10% respecto al de diseño.



Se puede conseguir las relaciones de $2,5 \le V$ y $L/D \le 5$ en un proceso iterativo, se va a comprobar para los límites del rango y dos puntos intermedios. Se utiliza la *Ecuación 23* y los resultados se recogen en la *Tabla 38*.

$$V = \Pi \cdot \frac{D^2}{4} \cdot L$$

Ecuación 23. Mezclador M-101: Volumen de un cilindro

Tabla 38. Mezclador M-101: Obtención de diámetros y alturas que hay que evaluar.

Q (m^3/h)	Volumen (dm^3)	D (m)	Altura (m)	L/D	Altura normal líquido (m)	HAL (m)	LAL (m)
E E 4	2032,20	1,01	2,53	2,50	1,26	2,28	0,25
5,54		0,94	2,93	3,13	1,47	2,64	0,29
Tiempo (min)		0,84	3,67	4,38	1,84	3,31	0,37
10		0,80	4,01	5,00	2,01	3,61	0,40

Se ha dispuesto las alarmas que se podrían considerar ponerse, se ha puesto uno de los márgenes típicos (10 y 90% para LAL y HAL, alarma de bajo nivel y de alto nivel respectivamente).

Este recipiente difiere en los demás en ser un recipiente concebido solo para líquido y salida de líquido, este debe estar por la mitad de su altura como altura normal de líquido. Sin embargo, es cierto que el volumen restante deberá tener un pequeño control de presión a 1 atm con un gas inerte para evitar que se trabaje a presión de vacío (por la baja presión de vapor de los anhídridos). Pero al ser tan poco volumen de cara a un gas, su coste es despreciable.

Se realiza el cálculo del espesor mínimo, de la *ecuaciones 12*, descrita anteriormente.

$$t_{pared} = \frac{[10^5 \cdot (4,53 + 1,03323) \cdot 1,0197] Pa \cdot 1,01 m}{(2 \cdot 1031,37 \cdot 10^5 \cdot 0,8) Pa - [1,2 \cdot 10^5 \cdot (4,53 + 1,8) \cdot 1,0197] Pa} + 4,76 \cdot 10^{-3}m$$
$$t_{pared} = 8,26 \cdot 10^{-3}m = 8,26mm$$

 $t_{tapas} = \frac{[10^5 \cdot (4,53 + 1,03323) \cdot 1,0197] Pa \cdot 1,01 m}{(2 \cdot 1031,37 \cdot 10^5 \cdot 0,8) Pa - [0,2 \cdot 10^5 \cdot (4,53 + 1,8) \cdot 1,0197] Pa} + 4,76 \cdot 10^{-3} m$

$$t_{tapas} = 8,25 \cdot 10^{-3}m = 8,25mm$$

La presión que se ha utilizado ha sido la de máxima impulsión de la bomba (4,53kg/cm²g). Se aprecia que el espesor que debe tener no llega a ser el doble del mínimo recomendado que debe de tener de por sí un recipiente sea cual sea su presión (t_{CA}). La masa de acero inoxidable necesario es de:

$$m_{pared} = \Pi \cdot 8,29 \cdot 10^{-3} m \cdot (1,01 + 8,26 \cdot 10^{-3}) m \cdot 2,53m \cdot 8000 \frac{kg}{m^{-3}} = 535,23 \ kg$$
$$m_{tapas} = 1,375 \cdot \frac{\Pi}{4} \cdot 1,01^2 m^2 \cdot 8,25 \cdot 10^{-3} m \cdot 8000 \frac{kg}{m^{-3}} \cdot 2 = 145,78 kg$$



$$m_{total} = (m_{pared} + m_{tapas}) \cdot 1,15 = (535,23 kg + 145,78) \cdot 1,15 = 783,16 kg$$

Se va a utilizar la ecuación del coste de los equipos definida anteriormente[16], estipula un precio en función de una ecuación dada y parámetros en función de la masa de la carcasa del recipiente de acero inoxidable 304 (se recuerda incrementar un 15% a la obtenida):

$$C_{mezclador,España} = (15000 + 68 \cdot (535,23 \cdot 1,15)^{0,85}) \cdot 1,13 = 35617,8$$

El resumen de los datos se muestra en la Tabla 39.

Tabla 39. Mezclador M-101: Espesor, masa y costes obtenidos (sin el factor de 1,13 de localización geográfica)

P (MPa)	Di (m)	Altura (m)	Espesor tapas (m)	Espesor pared (m)	Masa tapas (kg)	Masa carcasa (Kg)	Masa conjunto +15% (Kg)	Coste 2007 (\$)
	1,01	2,53	8,25E-03	8,26E-03	145,78	535,23	783,16	30972,04
	0,94	2,93	8,00E-03	8,01E-03	121,83	559,27	783,26	31579,73
5,08E+U5	0,84	3,67	7,65E-03	7,66E-03	93,17	599,10	796,11	32578,35
	0,80	4,01	7,53E-03	7,54E-03	83,83	616,21	805,05	33004,04

Se observa, por tanto, que la relación más económica es la de L/D = 2,5, pues necesita de menor masa de carcasa para servir de recipiente. Aunque es un mezclador y debería tener aplicada cierta potencia, o además de un coste algo superior porque debería tener una hélice, estos costes se van a desestimar porque no se necesitaría demasiada potencia, ya que el sólido realmente se funde en el mezclador y debería disolverse muy fácilmente en el anhídrido acético (son dos partes en masa de acético por cada parte de maleico).

7.4.2 Depósito pulmón del condensador (D-101)

Este depósito es el que recoge el condensado del intercambiador E-107, y este se puede resolver exactamente igual que el mezclador M-101. Tiene la función de regular el caudal de reflujo que vuelve a la columna C-102 y sirve como alimento de las bombas G-103-A/B para la recirculación de anhídrido acético de vuelta al mezclador.

Como la presión que llega a este recipiente depende tan estrechamente con la columna C-102, se ha escogido en este caso tomar también la presión máxima de impulsión de la bomba como se hizo ahí. También se ha escogido 155°C de temperatura para la determinación de la tensión admisible.

Utilizando las mismas expresiones que para el mezclador M-101, se elabora la Tabla 40.

Tabla 40. Depósito pulmón D-101	. Dimensionamiento inicial	que hay que evaluar
---------------------------------	----------------------------	---------------------

Q (m^3/h)	Volumen (dm^3)	Di (m)	Altura (m)	L/D	Altura normal líquido (m)	HAL (m)	LAL (m)
4.24		0,74	1,85	2,50	0,92	1,66	0,18
4,54	705.24	0,69	2,15	3,13	1,07	1,93	0,21
Tiempo (min)	795,24	0,61	2,69	4,38	1,34	2,42	0,27
5		0,59	2,94	5,00	1,47	2,64	0,29

Lo único relevante de cara a los otros recipientes, es que este depósito, por bibliografía, debe tener tan solo 5 min de tiempo de residencia. Esto supone un volumen menor que si fuesen 10 min como con el resto, y, por tanto, conlleva un menor coste. Se obtienen los resultados mostrados en la *Tabla 41*.
Tabla 41. Depósito pulmón D-101. Dimensionamiento con sus costes

P (Pa)	Di (m)	Altura (m)	Espesor cabeza (m)	Espesor carcasa (m)	Masa cabezas (kg)	Masa carcasa (Kg)	Masa conjunto +15% (Kg)	Coste 2007 (\$)
4.625.05	0,74	1,85	7,00E-03	7,00E-03	66,19	243,18	355,78	23168,60
	0,69	2,15	6,84E-03	6,84E-03	55,73	256,08	358,59	23535,45
4,032+03	0,61	2,69	6,62E-03	6,62E-03	43,10	277,46	368,64	24137,43
	0,59	2,94	6,54E-03	6,54E-03	38,95	286,64	374,43	24393,82

Se observa que la relación óptima es la del límite inferior recomendado: L/D = 2,5. Este coste es el directo de utilizar la ecuación comentada anteriormente para el coste de los equipos.

7.4.3 Bombas

De cara a las bombas se van a recoger las fichas directamente como resultados junto a sus precios. El proceso de cálculo es realmente sencillo y solo sirve para conocer a qué altura deberían ponerse los equipos (la H de las fichas), para conocer las eficiencias de estas y su consumo, y conocer sus presiones máximas de impulsión (las cuales se utilizan como presión de diseño de los recipientes aguas debajo).

El cálculo consiste en partir de un valor de seguridad para que no cavite la bomba, se escoge 3,5m de carga neta positiva de aspiración (CNPA), y se va hacia atrás conociendo el valor de la presión en el recipiente. A su vez, para conocer la presión de impulsión se deben contabilizar pérdidas de presión por la línea, por pasar por equipos como intercambiadores, y por salvar la altura de entrada de los equipos aguas abajo.

Para la eficiencia de la bomba se ha empleado una gráfica típica que relaciona capacidad volumétrica de la bomba con su eficiencia, se escogerá el valor medio del rango que se da en la *Figura 17*.



Figura 17. Bombas. Determinación de la eficiencia de la bomba en función de la capacidad

El resumen de los costes sería el mostrado en la Tabla 42:

Tabla 42. Bombas. Resumen de costes. Al ser parejas de bombas en el conjunto se multiplican por dos.

Equipo	Caudal (m ³ /h)	Caudal (L/s)	Potencia (kW)	Coste bomba (\$)	Coste motor (\$)	Conjunto (\$)
G-101-A/B	4,18	1,16	1,00	7135,72	820,00	15911,44
G-102-A/B	6,10	1,69	4,22	7230,96	3249,06	20960,04
G-103-A/B	6,37	1,77	1,00	7244,05	820,00	16128,10
G-104-A/B	1,47E-02	4,08E-03	1,00	6948,39	820,00	15536,79

Se ha asumido que la potencia mínima debería ser 1kW, pese a que por cálculo diese menor valor.



		PROYECTO:	DISEÑO ANHÍ	Y OPTIMIZ DRIDO SL	ACIÓN DE U ICCÍNICO M ANHÍDR	JNA PLANT IEDIANTE H IDO MALEIO	TA DI HDR CO	E PRODUCCIÓN DE OGENACIÓN DE	Equipo №: Pág.	G-101-A/B 1	de	1
					ној	A DE CÁ	LCU	LO DE BOMBAS				
		BOMBA Nº	G-101-A	/B								
		SERVICIO	Impulsió	n del anl	nídrido ace	ético al me	ezcla	ador				
		ESQUEMA DE FLU	no									
					1							
	1	Naturaleza del fluido)	L								
	T T	lemp. de operaciór	°C	25								
		Sp.Gr.@ 25°C	<u></u>	1,08								
\vdash	_		CSt Ka/m3	0,78								
			Kg/III3	1074	1							
		Normal	Ka/h	4083	1			P impulsión	Circ 1	Circ 2	Circ 3	circ 4
		Normal	m3/h	3.80					Ka/cm2a	Ka/cm2a	Ka/cm2a	Ka/cm2a
		Factor de diseño	-	110%	-			P. destino	0.00	119/011129	rtg/onn_g	<u>g</u>
		Diseño	m3/h	4,2				ΔΗ	0,00			
	Ì		NORMAL	-	MAX(1)			∆P línea	0,50			
		P. aspiración	Kg/cm2g	m	Kg/cm2g	m		∆P cambiador	0,70			
		P. recipiente (1)	0,00	0,00	1,80	16,77]					
		H (2)	-0,64	-5,94	1,16	10,83						
		∆P línea	0,0125	0,116	0,01	0,12						
		Otros ∆P	-	-	-	-		∆P válv. control	0,70			
		P. aspiración	-0,65	-6,06	1,15	27,48		P. impulsión	2,17			
	ļ	NPSH disponible		Kg/cm2a	m			P. diferencial	14 / 0	0.47	I	
		Presion asp. norma		0,38	3,57			P. impulsion	Kg/cm2g	2,17		
		P. vapor a Top		0,01	0,07			P. aspir. norm.	Kg/cm2g	-0,65		
		Direrencia/INPSHA		0,38	3,50			P. difer. norm.	ng/cilizg	2,82		
	P	otencia v consum	•					Allura		20,29		
\vdash	Ť	Eficiencia homba	%	50	1			P. máx. imn			ſ	Criterio
		Eficiencia motor	%	80	1		а	P.asp.nor.@HLL	Kg/cm2g	-0,65		a+d
	4	∆H vapor isoentrop.		-	1		b	P.asp.máx.	Kg/cm2g	1,15		2,74
	_[Eficiencia turbina	-	-]		с	P. difer. norm.	Kg/cm2g	2,82		b+c
		HHP	CV	0,43			d	Pres. difer. máx.	Kg/cm2g	3,39		3,97
	ļ	BHP	CV	0,86		Criterio	2	P. máx. imp.	Kg/cm2g	4,54		b+d
		Electricidad (4)	KW	1,00		Criterio:	1	Mayor de (a+d) o (b+c):	(b+d)	l	4,54
		Vapor	-	-			2	(b+d)				
Not	as	e la diferencia de al	ltura de la	a bomba	respecto	al separa	dor	L-V				
Por	Aprobado	NOTAS:	 (1): Es la (2): Se p (3): Se h la entrac (4): Com 	a presiór bone sob ha consid la del me ho sale m	n que viene re el mism lerado la c ezclador (2 nenor a 1k	e desde el no suelo a carga resu 2,52m). W se apro	l lími I sal Iltan oxim	ite de batería ir una H negativa. te de la diferencia na a este valor.	de altura d	le la bomb	a (0m) res	specto a
Rev.	Fecha											

Figura 18. Hoja de especificaciones de las bombas G-101 A/B

La figura 18 muestra las bombas para la puesta en marcha. Las G-104 son las que se van a utilizar durante el mayor tiempo de operación de la planta (99% del tiempo) en vez de este par. Como poseen un fluido de las mismas características y requerimientos de impulsión, se asume que las G-104 se van a costear como si de 1kW también se tratasen, aunque resultasen en un valor menor.



		PROYECTO:	DISEÑO DE ANH	Y OPTIMIZ ÍDRIDO SU	ZACIÓN DE JCCÍNICO I ANHÍDRII	UNA PLAN MEDIANTE I DO MALEIC	TA D HIDR O	E PRODUCCIÓN ROGENACIÓN DE	Equipo №: Pág.	G-102-A/B 1	de	1
					HOJ	A DE CÁL	CUI	LO DE BOMBAS	3			
		BOMBA Nº	G-102-A	/B								
		SERVICIO	Impulsió	n de la d	isolución	de los anh	ídri	dos maleico y ac	ético al rea	ctor		
		ESQUEMA DE FLU	no									
	1	Naturaleza del fluido)	L								
	 	Temp. de operaciór	°C	50								
		Sp.Gr.@ 25°C	- 01	1,160								
		Viscosidad @ Top	CSt Ka/m3	0,819								
			Kg/IIIS	1105								
		Normal	Ka/h	6124.5				P. impulsión	Circ. 1	Circ. 2	Circ. 3	circ. 4
		Normal	m3/h	5.5				i i inpulcion	Ka/cm2a	Ka/cm2a	Ka/cm2a	Ka/cm2a
		Factor de diseño	-	110%				P. destino	15.79			
		Diseño	m3/h	6,1				ΔH (3)	0,26			
		1	NORMAL	-	MAX(1)			∆P línéa	0,50			
		P. aspiración	Kg/cm2g	m	Kg/cm2g	m	-	ΔP cambiador	0,70			
		P. recipiente (1)	0,00	0,00	1,80	16,30						
		H (2)	-0,61	-5,55	1,19	10,75						
		∆P linea	0,01	0,113	0,01	0,11		A D with a sectoral	0.70			
		Otros ΔP	-	-	-	-		∆P valv. control	0,70			
		P. aspiracion	-0,63	-5,67	1,17	20,94		P. Impuision	17,95			
		NPSH disponible		Kɑ/cm2a	m			P. diferencial				
	L I I	Presión asp. normal		0.41	3.69			P. impulsión	Kg/cm2g	17.95		
		P. vapor a Top	-	0,02	0,19			P. aspir. norm.	Kg/cm2g	-0,63		
		Diferencia/NPSHA		0,39	3,50			P. difer. norm.	Kg/cm2g	18,58		
								Altura	m	168,24		
	P	otencia y consumo	0		1			_ / -			1	
		Eticiencia bomba	%	90			r	P. máx. imp.	K-1- 0	0.07		Criterio
	ļ	Eticiencia motor	%	80			a ⊾	P.asp.nor.@HLL	Kg/cm2g	-0,37		a+d
		Eficiencia turbina		-			0	P.asp.max.	Kg/cm2g	1,43		21,92 b+c
			CV	4 13			4	Pres difer máv	Kg/cm2g	22 29		20.00
		BHP	CV	4.59		Criterio	2	P. máx. imp.	Kg/cm2g	23.72		20,00 b+d
		Electricidad	KW	4,22		Criterio:	1	Mayor de (a+d) o (b	+c):	(b+d)		23,72
		Vapor	-	-			2	(b+d)		()		,
		NOTAS:	(1): Para	a evitar fu	ugas hacia	a el interio	r de	l mezclador se p	resuriza co	on un gas i	nerte a pr	esión
			atmosfé	rica.						-	•	
	ado		(2): Se p	one sob	re el mism	no suelo a	l sal	ir una H negativa	1.			
ъ	prob.		(3): Se h	na consid	erado la c	carga resu	ltan	te de la diferenci	ia de altura	de la bon	nba (0m) r	especto a
д	Ą		la entrac	a del se	barador L	-v (2,36m).					
Rev.	Fecha											

Figura 19. Hoja de especificaciones de las bombas G-102 A/B

Las bombas de la *Figura 19* sí presentan una potencia superior a 1kW, por lo que se escoge el resultado que da de aplicar las eficiencias obtenidas por la *Figura 17* y la *Tabla 9*



		PROYECTO:	DISEÑC DE ANH	Y OPTIMI IÍDRIDO S	ZACIÓN DE UCCÍNICO ANHÍDRI	UNA PLAN MEDIANTE DO MALEIC	TA D HIDR O	E PRODUCCIÓN ROGENACIÓN DE	Equipo №: Pág.	G-103-A/B 1	de	1		
							~							
<u> </u>					HOJ	A DE CAL		LO DE BOMBAS						
		BOMBA Nº	G-103-A	VВ										
		SERVICIO	Impulsić	n del anl	hídrido ac	ético a rec	ircu	lación y a reflujo	de la colu	mna				
		ESQUEMA DE FLU	JJO											
				_	Circ. 1					— I	1			
					411									
					ΔH									
					Circ 2					L	_			
					0110.2					\bigcirc	>			
		₩⊢-(-)					Ļ)					
			2					\bigcirc						
	Naturaleza del fluido L Temp. de operación °C 139.61													
	-	Temp. de operaciór	°C	139,61										
		Sp.Gr.@ 25°C		1,079	-									
		Viscosidad @ Top	cSt	0,309	-									
		Densidad @ Top	Kg/m3	931										
		Normal	Ka/h	5388 0	1			P impulsión	Circ 1	Circ 2	Circ 3	circ 4		
		Normal	m3/h	5.8	-				Ka/cm2a			Ka/cm2a		
		Factor de diseño	-	120%	-			P destino	0.00	0	Rg/omzg	rtg/cm2g		
		Diseño	m3/h	6.9				$\Delta H(1)$	0.37	-0.10				
			NORMAI		MAX(1)			∆P línea	0,25	0,25				
		P. aspiración	Kg/cm2g	m	Kg/cm2g	m		ΔP cambiador	0,00	0,00				
		P. recipiente	0,00	0,00	1,80	19,34								
		Н	0,34	3,63	2,14	22,98								
		∆P línea	0,01	0,134	0,01	0,13	-							
		Otros ΔP	-	-	-	-	-	ΔP válv. control	0,70	0,70				
		P. aspiracion	0,33	3,50	2,13	42,18		P. impulsion	1,32	0,85				
		NPSH disponible		Kg/cm2a	m			P. diferencial						
		Presión asp. norma		1,36	14,60	1,33		P. impulsión	Kg/cm2g	1,32				
		P. vapor a Top		1,03	11,10			P. aspir. norm.	Kg/cm2g	0,33				
		Diferencia/NPSHA		0,33	3,50			P. difer. norm.	Kg/cm2g	0,99				
			_					Altura	m	10,65				
┣	P	Eficioneia homba	0/	E0	1			D máy imp				Critorio		
		Eficiencia pomba	~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~~	0C 80	{		2	Pasp por @UU	Ka/cm2a	0.51		onieno a+d		
		AH vapor iscentrop	70				a h	P asp máx	Ka/cm2a	2.31		1 70		
	Í	Eficiencia turbina	-	-			c	P. difer. norm.	Kg/cm2g	0.99		b+c		
		HHP	CV	0,25			d	Pres. difer. máx.	Kg/cm2g	1,19		3,31		
		BHP	CV	0,50		Criterio	2	P. máx. imp.	Kg/cm2g	3,50		b+d		
		Electricidad (2)	KW	1,00		Criterio:	1	Mayor de (a+d) o (b	+c) :	(b+d)		3,50		
		Vapor	-	-			2	(b+d)						
	0	NOTAS:	(1): Se I	na consid	lerado la	carga resu	Iltan	te de la diferenci	a de altura	de la bon	nba (<u>3,6</u> 1r	n)		
	bado		respecto	o a la ent	rada del o	destilador	(7,5	8m) (circ.1). Ade	emás de la	altura de	la bomba	con la		
or	prot		altura de	el mezcla	dor (2,53) (circ. 2).								
┛	A		(2): Con	no sale n	nenor a 11	w se apr	UXIM	ia a este valor.						
	Ja													
Rev.	Fect													

Figura 20. Hoja de especificaciones de las bombas G-103 A/B

Las bombas de la *Figura 20* tienen una potencia realmente baja por las características del fluido y la baja carga que debe impulsar, por lo que se asume de 1kW la potencia, aunque por cálculos daría un valor menor.

7.4.4 Compresores (puesta en marcha)

Durante la puesta en marcha no se recirculará aun hidrógeno y todo sería hidrógeno fresco. Esto conlleva a que no se tenga que mezclar hidrógeno más caliente con el que se ha considerado que entra por el límite de batería a 25°C. Esto favorece a la cuestión económica un poco, porque por cómo son los cálculos una menor temperatura de partida favorece una menor potencia total, lo que conlleva a un menor consumo eléctrico.

El método de cálculo es el mismo al explicado en el punto *punto 4.4.3*. y utilizado en el *4.4.4.1*. también, los resultados son los recogidos en la *Tabla 43*.

				·						
	T1	T2	P1	m	P2	P*	Wi,t (kJ/kg)	Wi,t (kW)	Wi,r (kW)	WR (kW)
Etapa 1	216,87	25	1,01	0.226	4,44	4,35	2261,75	92,28	108,57	119,92
Etapa 2	250,18	59	4,35	0,336	16,84	16,50	2261,81	92,29	108,57	119,92

Tabla 43. Compresores. Obtención de la potencia en la puesta en marcha

Como la diferencia de potencia es muy pequeña respecto a los compresores calculados para el estado estacionario, no compensaría comprar sustitutos para la puesta en marcha, sobre todo al ser compresores, equipos muy caros.

Por un lado, el hecho de partir de una menor temperatura hace que la temperatura de salida no deba ser tampoco tan alta, por lo que el gasto de agua de refrigeración en el intercambiador asociado (E-104) disminuirá (se verá en el próximo apartado), el E-103 no se utilizará en la puesta en marcha porque es el que reduce la temperatura del hidrógeno recirculado.

7.4.5 Intercambiadores

El proceso de cálculo de los intercambiadores es idéntico al realizado en el punto 4.4.10., por lo que solo se comentarán los resultados y se dirá el tipo de intercambiador que debería emplearse. A rangos generales, simplemente mencionar que se ha empleado un $\Delta T_{aproach} \approx 10 a \ 15^{\circ}C$.

Primero se utiliza el E-101 para calentar el anhídrido acético que va al mezclador (solo se utiliza en la puesta en marcha), su mezcla con el maleico resultará en 50°C en el mezclador M-101. Se calienta con vapor de calefacción que entra saturado a 131,47°C y a 2,817 bar y condensa a 125°C porque pierde 0,5 bar en el proceso. Los resultados se recogen en la *Tabla 44*.

Tabla 44. Intercambiador E-101. Propiedades físicas de los fluidos. Vapor de calefacción (caliente) y anhídrido acético (frío)

E-101: Fluido	T1' (ºC)	T2' (ºC)	∆Tml	F' (Kg/h)	λ (kJ/Kg)	h _e (W/m ² K)	f _e (m ² K/W)
caliente	131,47	125,00	48,11	11092,02	2188,40	7500	1,00E-04
E-101: Fluido	T1" (ºC)	T2" (ºC)	Q' (kW)	F" (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _i (W/m ² K)	f _i (m ² K/W)
frío	25,00	113,16	6742,71	4082,98	67,43	650	2,00E-04

Se observa que se toman valores típicos de suciedad para un líquido orgánico y vapor destilado. El ejemplo del proceso de cálculo de los parámetros de diseño para el intercambiador de calor se hizo en el punto 4.4.10. por lo que se disponen directamente los resultados en la *Tabla 45*.

Tabla 45. Intercambiador E-101. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste

E-101											
1/U (m ² K/W)	U (W/m ² K)	Z	η _c =P	FT	Хр	W	N	A (m ²)	Coste (\$)		
1,97E-03	507,15	0,07	0,83	1,00	0,90	7,04	0,87	303,98	118345,35		

Se asume de nuevo $FT_1 = 1$ por el cambio de fase, el número de carcasas es aproximadamente de 1, con un área de $A_{E-101} = 303,98 \text{ m}^2$, y coste asociado de $C_{E-101} = 118345,35 \text{ }$.

Respecto al intercambiador E-102, sirve para terminar de acondicionar térmicamente los anhídridos que alimentan al reactor. Se llevan a 72,67°C porque su mezcla con el hidrógeno a muy alta temperatura proveniente del compresor K-102 ya resulta en una mezcla a 100°C. Se muestra en la *Tabla 46*.

Tabla 46. Intercambiador E-102. Propiedades físicas de los fluidos. Va	apor de calefacción (caliente) y alimento mezclador(frío)
--	---

E-102: Fluido	T1' (ºC)	T2' (ºC)	ΔTml	F' (Kg/h)	λ (kJ/Kg)	h _e (W/m ² K)	f _e (m ² K/W)
caliente	131,47	125,00	66,57	96,73	2188,40	7500	1,00E-04
E-102: Fluido	T1'' (ºC)	T2" (ºC)	Q' (kW)	F" (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _i (W/m ² K)	f _i (m ² K/W)
frío	50,00	72,67	63,97	6124,46	1,66	650	2,00E-04

Se pasa a calcular los parámetros de diseño del E-102, se recogen los resultados en la Tabla 47.

Tabla 47. Intercambiador E-102. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste

E-102										
1/U (m ² K/W)	U (W/m ² K)	Z	η _c =P	FT	A (m ²)	Coste (\$)				
1,97E-03	507,15	0,29	0,28	1,00	2,08	5977,22				



Esta vez se obtiene un área realmente pequeña, por lo que en este caso se utiliza un intercambiador de doble tubo.

El intercambiador E-103 se utiliza para enfriar el hidrógeno que sale del separador de membrana M-102 para que pueda mezclarse con el hidrógeno fresco y pasar a la primera etapa de la compresión. Se recogen los resultados en la *Tabla 48*.

Tabla 48. Intercambiador E-103. Propiedades físicas de los fluidos. Hidrógeno (fluido caliente) y agua de refrigeración (frío)

E-103: Fluido	T1' (ºC)	T2' (ºC)	ΔTml	F' (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _i (W/m ² K)	f _i (m ² K/W)
caliente	99,98	59,00	37,73	105,11	14,42	120	1,00E-04
E-103: Fluido	T1" (ºC)	T2" (ºC)	Q' (kW)	F" (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _e (W/m ² K)	f _e (m ² K/W)
frío	32,00	49,00	17,26	874,08	4,18	3250	2,00E-04

Una vez obtenidas las propiedades físicas (para el hidrógeno se han cogido las de gas a presión atmosférica), se obtienen los parámetros de diseño y coste asociado recogidos en la *Tabla 49*.

Tabla 49. Intercambiador E-103. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste

E-103										
U (W/m ² K)	Z=R	η _c =P	FT	Хр	W	N	A (m ²)	Coste (\$)		
111,84	2,41	0,25	0,925*	0,90	0,40	0,69	4,50	11047,83		

Esta vez no se podía asumir un FT = 1 al no haber cambio de fase, y se ha tenido que sacar a través de la *Figura 21*.



Figura 21. Intercambiadores, factor de corrección en función de R (Z), y el rendimiento de calefacción

El área es tan pequeña que se emplea un doble tubo, y en estos se puede asumir que no hace falta aplicar el factor de corrección, por lo que es FT = 1 de nuevo.

De forma análoga se haría el E-104, que es el segundo equipo que enfría el hidrógeno. Los resultados se muestran en la *Tabla 50*.



Tabla 50. Intercambiador E-104. Propiedades físicas de los fluidos. Hidrógeno (fluido caliente) y agua de refrigeración (frío)

E-104: Fluido	T1' (ºC)	T2' (ºC)	∆Tml	F' (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _i (W/m ² K)	f _i (m ² K/W)
caliente	248,80	59,00	86,34	146,74	14,50	225	1,00E-04
E-104: Fluido	T1" (≌C)	T2" (ºC)	Q' (kW)	F'' (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _e (W/m ² K)	f _e (m ² K/W)
frío	32,00	49,00	112,16	5680,94	4,18	3250	2,00E-04

Esta vez se ha utilizado un coeficiente individual de transmisión mayor porque aplica a gases bajo presión (porque en el anterior se cogió la media de los de a presión atmosférica). Básicamente quiere decir que una mayor presión favorece el intercambio de calor con un mayor coeficiente global de transmisión de calor (U). Los parámetros de diseño calculados se muestran en la *Tabla 51*.

Tabla 51. Intercambiador E-104. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste

E-104										
1/U (m ² K/W)	U (W/m ² K)	Z=R	η _c =P	FT	A (m ²)	Coste (\$)				
5,05E-03	197,94	11,16	0,08	1,00	7,22	16761,48				

Se vuelve a asumir doble tubo por el área tan baja, y se justifica de esa manera el FT = 1.

Se calcula la disminución del gasto de agua mencionada en el punto 7.7.4. por una menor salida de temperatura del compresor K-101 en la puesta en marcha. Se obtienen los resultados de la *Tabla 52*.

Tabla 52. Intercambiador E-104. Disminución gasto de agua.

E-104: Fluido	T1' (ºC)	T2' (ºC)	∆Tml	F' (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)
caliente	216,87	59,00	77,09	146,74	14,50
E-104: Fluido	T1" (ºC)	T2" (ºC)	Q' (kW)	F'' (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)
frío	32,00	49,00	93,29	4725,24	4,18

Se observa que se emplean 955,7 kg/h menos de agua respecto al estado estacionario.

Se pasa al precalentador que se ha implementado como reintegración energética del proceso. El cual es el E-105, recogidos sus resultados en la *Tabla 53*.

Tabla 53. Intercambiador E-105. Propiedades físicas de los fluidos. Anhídridos succínico (caliente), salida del reactor (frío)

E-105: Fluido	T1' (ºC)	T2' (ºC)	ΔTml	F' (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _e (W/m ² K)	f _e (m ² K/W)
caliente	282,98	139,80	85,81	2087,84	0,98	650	2,00E-04
E-105: Fluido	T1" (ºC)	T2" (ºC)	Q' (kW)	F" (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _i (W/m ² K)	f _i (m ² K/W)
frío	99,98	124,80	81,75	6127,48	1,93	650	2,00E-04

Se evitan de esta manera tener que utilizar vapor para que condense equivalente a 81,75kW cuando se opera en estado estacionario. Además, se enfría bastante de esta forma el succínico el cual va a comenzar a solidificarse a los 120°C, se cuenta por tanto con un margen de aproximadamente 20°C para su transporte a un cristalizador. Se pasa a calcular los parámetros de diseño recogidos en la Tabla 54.

Tabla 54. Intercambiador E-105. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste

E-105										
1/U (m ² K/W)	U (W/m ² K)	Z=R	η _c =P	FT	A (m ²)	Coste (\$)				
3,48E-03	287,61	5,77	0,14	1,00	3,64	9251,56				

Se obtiene de nuevo un área muy pequeña, por lo que se asume que es un doble tubo de nuevo.



El intercambiador E-106 se realizó en la propia memoria técnica, por lo que se pasa al E-107. Este intercambiador realmente es el condensador del destilador multietapa C-102. La *Tabla 55* muestra los resultados obtenidos.

E-107: Fluido	T1' (ºC)	T2' (ºC)	∆Tml	F' (Kg/h)	λ (kJ/Kg)	h _e (W/m ² K)	f _e (m ² K/W)
caliente	145,41	139,61	101,91	5388 <i>,</i> 88	409,48	2000	1,50E-04
E-107: Fluido	T1'' (ºC)	T2'' (ºC)	Q' (kW)	F'' (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _i (W/m ² K)	f _i (m ² K/W)
frío	32,00	49,00	612,96	31046,04	4,18	3250	2,00E-04

Tabla 55. Intercambiador E-107. Propiedades físicas de los fluidos. Anhídridos acético (caliente), agua de refrigeración (frío)

Se ha utilizado como novedad la media del factor de ensuciamiento de un orgánico en fase gas y en fase líquida, por su condensación. Se pasa a sus parámetros de diseño, mostrados en la *Tabla 56*.

Tabla 56. Intercambiador E-107. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste

	E-107										
1/U (m ² K/W)	U (W/m ² K)	Z	η _c =P	FT	Хр	W	N	A (m ²)	Coste (\$)		
1,16E-03	863,79	0,34	0,15	1,00	0,90	2,98	0,10	7,66	17685,79		

Vuelve a escogerse doble tubo y todo lo que conlleva, por las mismas razones que anteriormente respecto al área de intercambio necesaria.

En penúltimo lugar, se llega al E-108 que es el hervidor del destilador C-102. Se disponen sus resultados en la *Tabla 57*.

Tabla 57. Intercambiador E-108. Propiedades físicas de los fluidos. Fondo destilador (frío), vapor de calefacción (caliente)

E-108: Fluido	T1' (ºC)	T2' (ºC)	ΔTml	F' (Kg/h)	λ (kJ/Kg)	h _e (W/m ² K)	f _e (m ² K/W)
caliente	300,82	300,00	15,26	803,04	1404,90	7500	1,50E-04
E-108: Fluido	T1'' (ºC)	T2'' (ºC)	Q' (kW)	F'' (Kg/h)	λ (kJ/Kg)	h _i (W/m ² K)	f _i (m ² K/W)
frío	284,64	285,67	313,39	1980,22	569,73	1750	2,00E-04

De forma análoga a los casos anteriores se pasa a calcular sus parámetros de diseño, recogidos en la *Tabla 58*.

Tabla 58. Intercambiador E-108. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste

	E-108										
1/U (m ² K/W)	U (W/m ² K)	Z	η _c =P	FT	Хр	W	N	A (m ²)	Coste (\$)		
1,05E-03	948,08	0,79	0,06	1,00	0,90	1,29	0,05	23,83	28294,25		

Esta vez se observa que se necesita que sea un intercambiador de carcasas y tubos, pero por el cambio de fase se asume FT = 1.

Finalmente, se pasa a calcular el reactor R-101, el cual contiene unas dimensiones fijadas por su propio diseño, estas dimensiones derivan en un área determinada de $A = 28,41 \text{ m}^2$. Si se hubiese excedido el área necesaria a este valor, se habría tenido que redimensionar el reactor para poder utilizarlo de forma isoterma. Las propiedades calculadas se recogen en la *Tabla 59*.

Tabla 59. Intercambiador R-101. Propiedades físicas de los fluidos. Alimento reactor (caliente), agua de refrigeración (frío)

R-101: Fluido	T1' (ºC)	T2' (ºC)	∆Tml	F' (Kg/h)	-	h _i (W/m ² K)	f _i (m ² K/W)
caliente	100,80	100,00	59,53	6298,28	-	1000*	2,00E-04
R-101: Fluido	T1" (ºC)	T2" (ºC)	Q' (kW)	F'' (Kg/h)	Cp (kJ/kg K)	h _e (W/m ² K)	f _e (m ² K/W)
frío	32,00	49,00	808,27	40938,21	4,18	3250	2,00E-04



Esta vez la energía proviene de la reacción química, la cuál es exotérmica y produce 808 kW, más que de un cambio de temperatura respecto a la entrada y a salida. Pero como justo la entrada en estado estacionario está a 100,8°C se ha permitido no tener que ajustarlo y asumirlo como isotermo, pese a los 0,8°C de diferencia (valor bastante bajo).

Se destaca que se considera que gracias al catalizador metálico hay mucha mayor superficie y conducción que favorece al coeficiente individual de transmisión de calor dentro del tubo, por lo que se ha cogido el rango máximo del coeficiente para un orgánico líquido (1000 W/m²K).

Los parámetros de diseño obtenidos se muestran en la Tabla 60.

Tabla 60. Reactor/intercambiador R-101. Resultados del equipo: Parámetros de diseño y coste

R-101										
1/U (m ² K/W)	U (W/m ² K)	Z=R	η _c =P	FT	Хр	W	N	A (m ²)	Coste (\$)	
1,71E-03	585,59	0,05	0,25	1,00	0,90	7,91	0,13	25,50	55157,29	

Se obtiene un área ligeramente menor a la necesaria definida por los propios tubos, por lo que cumple el criterio y no hace falta redimensionar el reactor. En este caso FT = 1 porque se puede observar en la *figura 17* que si se tiene un rendimiento de calefacción de 0,25 y se tiene una Z inferior a 2,5 (y se tiene muchísimo menor) el factor de corrección da 1.



7.5 Anexo V. Evaluación económica. VAN y TIR

Finalmente, los resultados de la evaluación económica del proyecto se recogen en la Tabla 61. Estos se comentaron en la sección 4.5., evaluándolo viable.

Año	0	1	2	3	4	5	6	7	8
Inmovilizado	3.954.290	6.590.483	2.636.193						
Circulante			1.719.256						
Inversion	3.954.290	6.801.379	2.807.609						
Costes			2.764.029	14.048.816	20.275.688	20.924.511	21.594.095	22.285.106	22.998.229
Ventas			7.363.879	17.732.220	26.142.358	26.978.913	27.842.239	28.733.190	29.652.652
Beneficios			4.599.849	3.683.404	5.866.669	6.054.403	6.248.144	6.448.084	6.654.423
Amortización			1.356.328	1.356.328	1.356.328	1.356.328	1.356.328	1.356.328	1.356.328
Beneficios antes de impuestos			3.243.522	2.327.076	4.510.342	4.698.075	4.891.816	5.091.757	5.298.095
Impuestos			810.880	581.769	1.127.585	1.174.519	1.222.954	1.272.939	1.324.524
Beneficios despues de impuestos			2.432.641	1.745.307	3.382.756	3.523.556	3.668.862	3.818.817	3.973.571
FNC	-3.954.290	-6.801.379	981.360	3.101.635	4.739.084	4.879.884	5.025.190	5.175.145	5.329.899
FCA	1	0,91	0,83	0,75	0,68	0,62	0,56	0,51	0,47
FNCA	-3.954.290	-6.183.071	811.041	2.330.304	3.236.858	3.030.024	2.836.589	2.655.668	2.486.437
ΣϜΝϹΑ	-3.954.290	-10.137.361	-9.326.320	-6.996.016	-3.759.158	-729.134	2.107.455	4.763.122	7.249.560
VAN	23.080.766,24								
TIR	31%								
Año	9	10	11	12	13	14	15	16	17
Año Inmovilizado	9	10	11	12	13	14	15	16	17
Año Inmovilizado Circulante	9	10	11	12	13	14	15	16	17 2.936.943
Año Inmovilizado Circulante Inversion	9	10	11	12	13	14	15	16	17 2.936.943
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes	9 23.734.173	10 24.493.666	11 25.277.463	12 26.086.342	13 26.921.105	14 27.782.581	15 28.671.623	16 29.589.115	17 2.936.943 30.535.967
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas	9 23.734.173 30.601.537	10 24.493.666 31.580.786	11 25.277.463 32.591.372	12 26.086.342 33.634.295	13 26.921.105 34.710.593	14 27.782.581 35.821.332	15 28.671.623 36.967.614	16 29.589.115 38.150.578	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios Amortización	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365 1.356.328	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120 1.356.328	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908 1.356.328	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios Amortización Beneficios antes de impuestos	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365 1.356.328 5.511.037	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120 1.356.328 5.730.792	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908 1.356.328 5.957.580	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953 7.547.953	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488 7.789.488	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751 8.038.751	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991 8.295.991	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463 8.561.463	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430 8.835.430
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios Amortización Beneficios antes de impuestos Impuestos	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365 1.356.328 5.511.037 1.377.759	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120 1.356.328 5.730.792 1.432.698	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908 1.356.328 5.957.580 1.489.395	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953 7.547.953 1.886.988	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488 7.789.488 1.947.372	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751 8.038.751 2.009.688	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991 8.295.991 2.073.998	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463 8.561.463 2.140.366	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430 8.835.430 2.208.857
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios Amortización Beneficios antes de impuestos Impuestos Beneficios despues de impuestos	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365 1.356.328 5.511.037 1.377.759 4.133.278	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120 1.356.328 5.730.792 1.432.698 4.298.094	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908 1.356.328 5.957.580 1.489.395 4.468.185	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953 7.547.953 1.886.988 5.660.965	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488 7.789.488 1.947.372 5.842.116	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751 8.038.751 2.009.688 6.029.063	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991 8.295.991 2.073.998 6.221.993	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463 8.561.463 2.140.366 6.421.097	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430 8.835.430 2.208.857 6.626.572
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios Amortización Beneficios antes de impuestos Impuestos Beneficios despues de impuestos FNC	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365 1.356.328 5.511.037 1.377.759 4.133.278 5.489.605	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120 1.356.328 5.730.792 1.432.698 4.298.094 5.654.422	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908 1.356.328 5.957.580 1.489.395 4.468.185 5.824.513	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953 7.547.953 1.886.988 5.660.965 5.660.965	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488 7.789.488 1.947.372 5.842.116 5.842.116	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751 2.009.688 6.029.063 6.029.063	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991 2.073.998 6.221.993 6.221.993	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463 2.140.366 6.421.097 6.421.097	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430 2.208.857 6.626.572 6.626.572
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios Amortización Beneficios antes de impuestos Impuestos Beneficios despues de impuestos FNC FCA	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365 1.356.328 5.511.037 1.377.759 4.133.278 5.489.605 0,42	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120 1.356.328 5.730.792 1.432.698 4.298.094 5.654.422 0,39	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908 1.356.328 5.957.580 1.489.395 4.468.185 5.824.513 0,35	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953 1.886.988 5.660.965 5.660.965 0,32	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488 1.947.372 5.842.116 5.842.116 0,29	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751 2.009.688 6.029.063 6.029.063 0,26	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991 2.073.998 6.221.993 6.221.993 0,24	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463 2.140.366 6.421.097 6.421.097 0,22	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430 2.208.857 6.626.572 6.626.572 0,20
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios Amortización Beneficios antes de impuestos Impuestos Beneficios despues de impuestos FNC FCA FNCA	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365 1.356.328 5.511.037 1.377.759 4.133.278 5.489.605 0,42 2.328.129	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120 1.356.328 5.730.792 1.432.698 4.298.094 5.654.422 0,39 2.180.024	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908 1.356.328 5.957.580 1.489.395 4.468.185 5.824.513 0,35 2.041.456	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953 1.886.988 5.660.965 5.660.965 0,32 1.803.758	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488 1.947.372 5.842.116 5.842.116 0,29 1.692.253	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751 2.009.688 6.029.063 6.029.063 0,26 1.587.641	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991 2.073.998 6.221.993 6.221.993 0,24 1.489.496	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463 2.140.366 6.421.097 6.421.097 0,22 1.397.418	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430 2.208.857 6.626.572 6.626.572 0,20 1.311.032
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios Amortización Beneficios antes de impuestos Impuestos Beneficios despues de impuestos FNC FCA FNCA FNCA	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365 1.356.328 5.511.037 1.377.759 4.133.278 5.489.605 0,42 2.328.129 9.577.688	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120 1.356.328 5.730.792 1.432.698 4.298.094 5.654.422 0,39 2.180.024 11.757.713	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908 1.356.328 5.957.580 1.489.395 4.468.185 5.824.513 0,35 2.041.456 13.799.169	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953 1.886.988 5.660.965 5.660.965 0,32 1.803.758 15.602.927	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488 7.789.488 1.947.372 5.842.116 0,29 1.692.253 17.295.180	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751 2.009.688 6.029.063 6.029.063 6.029.063 0,26 1.587.641 18.882.821	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991 2.073.998 6.221.993 0,24 1.489.496 20.372.316	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463 2.140.366 6.421.097 0,22 1.397.418 21.769.734	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430 2.208.857 6.626.572 6.626.572 0,20 1.311.032 23.080.766
Año Inmovilizado Circulante Inversion Costes Ventas Beneficios Amortización Beneficios antes de impuestos Impuestos Beneficios despues de impuestos FNC FCA FCA FNCA FNCA VAN	9 23.734.173 30.601.537 6.867.365 1.356.328 5.511.037 1.377.759 4.133.278 5.489.605 0,42 2.328.129 9.577.688	10 24.493.666 31.580.786 7.087.120 1.356.328 5.730.792 1.432.698 4.298.094 5.654.422 0,39 2.180.024 11.757.713	11 25.277.463 32.591.372 7.313.908 1.356.328 5.957.580 1.489.395 4.468.185 5.824.513 0,35 2.041.456 13.799.169	12 26.086.342 33.634.295 7.547.953 1.886.988 5.660.965 5.660.965 5.660.965 0,32 1.803.758 15.602.927	13 26.921.105 34.710.593 7.789.488 7.789.488 1.947.372 5.842.116 5.842.116 0,29 1.692.253 17.295.180	14 27.782.581 35.821.332 8.038.751 2.009.688 6.029.063 6.029.063 0,26 1.587.641 18.882.821	15 28.671.623 36.967.614 8.295.991 2.073.998 6.221.993 0,24 1.489.496 20.372.316	16 29.589.115 38.150.578 8.561.463 2.140.366 6.421.097 6.421.097 0,22 1.397.418 21.769.734	17 2.936.943 30.535.967 39.371.397 8.835.430 2.208.857 6.626.572 6.626.572 0,20 1.311.032 23.080.766

Tabla 61 Evaluación económica. Obtención del VAN y TIR. (Unidades en euros, €)