

Trabajo Fin de Máster

Máster en Ingeniería Química

Evaluación técnico-económica y ambiental de los procesos de producción de butadieno a partir de bioetanol

Autor: Tomás Pérez Fernández

Tutor: José Fernando Vidal Barrero

José Caraballo Bello

Dpto. Ingeniería Química y Ambiental
Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Universidad de Sevilla

Sevilla, 2021



Trabajo Fin de Máster
Ingeniería Química

Evaluación técnico-económica y ambiental de los procesos de producción de butadieno a partir de bioetanol

Autor:

Tomás Pérez Fernández

Tutor:

José Fernando Vidal Barrero

José Caraballo Bello

Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental

Escuela Técnica Superior de Ingeniería

Universidad de Sevilla

Sevilla, 2021

Proyecto Fin de Máster: Evaluación técnico-económica y ambiental de los procesos de producción de butadieno a partir de bioetanol

Autor: Tomás Pérez Fernández

Tutor: José Fernando Vidal Barrero
José Caraballo Bello

El tribunal nombrado para juzgar el Proyecto arriba indicado, compuesto por los siguientes miembros:

Presidente:

Vocales:

Secretario:

acuerdan otorgarle la calificación de:

El Secretario del Tribunal

Sevilla, 2021

A mi familia

A mis maestros

Agradecimientos

Primero de todo referirme a mi familia y amigos, por su apoyo incondicional durante mis estudios, no solo del máster, sino también durante todas mis etapas de desarrollo académico. Con especial mención Papa, Mama, a Marina, Tita Teresa, Elena y compañeros del Máster.

Por otro lado, agradecer a mis tutores José y Fernando, por su dedicación durante el desarrollo de mi TFM. Para mí realmente fue un reto enfrentarme a este proyecto, pero gracias a su ayuda y apoyo, entre los tres recorrimos un largo camino que me dejó grandes enseñanzas.

Tomás Pérez Fernández

Sevilla, 2021

El 1,3-butadieno producido en la industria hoy en día es generado como subproducto en el craqueo de naftas para la obtención de etileno. Esto hace de este producto un gran dependiente del mercado del crudo, sujeto a su cambiante precio, demanda y disponibilidad.

Para evitar esta dependencia, el uso del bioetanol como reactivo principal surge como una ruta alternativa interesante para la producción del 1,3-butadieno. Además, de esto, es posible conseguir producciones industriales más neutras climáticamente, reduciendo sus impactos en el medio ambiente.

En el presente trabajo se estudian los diferentes procesos para la producción de este producto por dicha vía. Seleccionando cuatro catalizadores que lo consiguen por los dos procesos existentes conocidos, los procesos de dos pasos y los de un paso. De esta forma este proyecto se centra en el análisis técnico-económico y ambiental de los procesos diseñados con dichos catalizadores, para su comparación entre ellos, a fin de poder analizar la posible competencia en dichos tres aspectos de estos procesos diseñados con el del butadieno producido por la vía tradicional, es decir, a partir de recursos fósiles.

Abstract

The 1,3-butadiene produced in the industry nowadays is generated as a by-product in the nafta-cracking to obtain ethylene. For this reason, this product is highly dependent on the crude oil market, subject to its changing price, demand and availability.

To avoid this dependence, the use of bioethanol as the main reagent emerges as an interesting alternative route to produce of 1,3-butadiene. In addition, from this, it is possible to achieve more climate-neutral industrial productions, reducing their impacts on the environment.

The present work reviews the different processes for this product generation using bioethanol. Four catalysts are analyzed with the two known existing processes, the two-step and one-step processes. The technical-economic and environmental assessment of the designed processes allow for a comparison between them and to break down their efficiency in these 3 aspects with the butadiene produced from the traditional pathway, from fossils resources.

Agradecimientos	ix
Resumen	xi
Abstract	xiii
Índice	xiv
Índice de Tablas.....	xvii
Índice de Gráficas	xx
Índice de Figuras	xxi
Notación	xxii
1 ANTECEDENTES, OBJETIVOS, ALCANCE Y METODOLOGÍA	23
1.1 ANTECEDENTES.....	23
1.2 OBJETIVOS.....	23
1.3 ALCANCE.....	23
1.4 METODOLOGÍA.....	24
2 INTRODUCCIÓN	28
2.1 MOTIVACIÓN DEL ESTUDIO.....	28
2.2 BUTADIENO.....	28
2.2.1 Propiedades del butadieno.....	28
2.2.2 Peligros y seguridad.....	29
2.2.3 Usos del butadieno.....	29
2.2.4 Mercado del butadieno.....	31
2.2.5 Producción de Butadieno.....	32
2.3 BIOETANOL.....	36
2.3.1 Usos del bioetanol	37
2.3.2 Mercado del bioetanol.....	38
2.3.3 Producción del bioetanol	38
3 ESTADO DEL ARTE.....	40
3.1 PROCESO DE DOS PASOS.....	40
3.1.1 Primer paso mediante vía oxidativa.....	40
3.1.2 Primer paso mediante vía no oxidativa	41
3.1.3 Segundo paso.....	42
3.1.4 Selección de catalizadores de procesos de dos pasos	43
3.2 PROCESO DE UN PASO	44
3.2.1 Selección de catalizadores de procesos de un paso	45
3.3 CARACTERÍSTICAS DE LOS CATALIZADORES SELECCIONADOS.....	45
3.4 FABRICACIÓN Y COSTE DE LOS CATALIZADORES SELECCIONADOS	46
4 DISEÑO DE LOS PROCESOS	48
4.1 BASES DE DISEÑO	48
4.2 AJUSTE TERMODINÁMICO DEL PROCESO	48
4.2.1 Modelado del equilibrio líquido-vapor.	50
4.2.2 Modelado de solubilidad de gases.....	52

4.2.3	Obtención de parámetros estimados	52
4.2.4	Representación del equilibrio líquido-vapor de los pares de prioridad alta-alta.	55
4.3	<i>DISEÑO CONCEPTUAL DE LOS PROCESOS</i>	57
4.3.1	Procesos de dos pasos:.....	57
4.3.2	Proceso de un paso	63
4.4	<i>DETERMINACIÓN DEL PUNTO NOMINAL DE OPERACIÓN</i>	67
4.4.1	Proceso de dos pasos.	69
4.4.2	Procesos de un paso.	73
4.5	<i>DISEÑO DE EQUIPOS</i>	75
4.5.1	Procesos de dos pasos.....	76
4.5.2	Proceso de un paso	76
4.6	<i>DISEÑO RIGUROSO DE LOS PROCESOS</i>	78
4.6.1	Proceso de dos pasos	79
4.6.2	Proceso de un paso	93
4.7	<i>VALORIZACIÓN ENERGÉTICA DE CORRIENTES RESIDUALES COMBUSTIBLES</i>	108
4.7.1	Análisis energético de las corrientes residuales combustibles	108
4.7.2	Generación de vapor.	110
5	ANÁLISIS ECONÓMICO	115
5.1	<i>COSTES DE CAPITAL</i>	115
5.1.1	Coste de los equipos.....	115
5.1.2	Coste de instalación.....	118
5.1.3	Otros costes de inversión.....	118
5.1.4	Costes de capital de cada proceso	122
5.2	<i>COSTES DE PRODUCCIÓN</i>	122
5.2.1	Costes variables	122
5.2.2	Costes operativos fijos.....	126
5.2.3	Costes de producción total de cada proceso.....	128
5.3	<i>INGRESOS</i>	128
5.3.1	Venta de productos	128
5.4	<i>COSTES E INGRESOS DE LA PRODUCCIÓN DE VAPOR</i>	129
5.4.1	Costes de la producción de vapor	129
5.4.2	Ingresos de la producción de vapor	129
5.5	<i>EVALUACIÓN DE LA RENTABILIDAD DE LOS PROCESOS</i>	130
5.5.1	Cálculo del VAN y la TIR de los procesos.....	130
5.5.2	Precio mínimo de venta	131
5.5.3	Análisis de sensibilidad respecto a productos y materias primas.....	131
6	EVALUACIÓN AMBIENTAL	136
6.1	<i>OBJETIVOS</i>	136
6.2	<i>ALCANCE</i>	136
6.2.1	Definición del sistema	136
6.2.2	Límites del sistema	137
6.2.3	Descripción del sistema.....	137
6.2.4	Expansión de los sistemas.....	138
6.2.5	Categorías de impacto.....	139
6.2.6	Calidad de los datos.....	139
6.2.7	Suposiciones.....	139
6.2.8	Limitaciones	142
6.3	<i>ANÁLISIS DE INVENTARIOS DE CICLO DE VIDA</i>	142
6.3.1	Inventario de la planta con catalizador de Ta ₂ O ₃	144
6.3.2	Inventario de la planta con catalizador de ZrO ₂	145
6.3.3	Inventario de la planta con catalizador de Hf:Zn.....	146
6.3.4	Inventario de la planta con catalizador de Y:Zn	147
6.3.5	Inventarios calculados	147

6.4	<i>EVALUACIÓN DE IMPACTO</i>	150
6.5	<i>INTERPRETACIÓN DE LOS RESULTADOS</i>	153
7	CONCLUSIONES	159
7.1	<i>ANÁLISIS TÉCNICO</i>	159
7.2	<i>ANÁLISIS ECONÓMICO</i>	160
7.3	<i>ANÁLISIS AMBIENTAL</i>	160
7.4	<i>GENERALES</i>	161
	Referencias	162
	Anexos	169
	<i>ANEXO I: Procesos de fabricación y cálculo de coste de los catalizadores</i>	169
	<i>ANEXO II: Código EES del balance de materia para fabricación de los catalizadores</i>	180
	<i>ANEXO III. Datos de equilibrio LV Butadieno-Etanol</i>	184
	<i>ANEXO IV: Parámetros de interacción binaria de los métodos utilizados</i>	186
	<i>ANEXO V: Código EES del balance de materia aproximado de los procesos</i>	197
	<i>ANEXO VI : Resultados de la búsqueda del punto nominal y optimización de los procesos</i>	237
	<i>ANEXO VII : Balances de materia y energía completo de los procesos</i>	259
	<i>ANEXO VIII: Resultado del costes de los equipos</i>	313
	<i>ANEXO IX : CAPEX y OPEX de las plantas de generación de vapor</i>	317
	<i>ANEXO X: Balance de materia y energía de las plantas de generación de vapor</i>	319
	<i>ANEXO XI: Analisis de flujos de caja de los procesos</i>	325
	<i>ANEXO XII: Resumen del análisis económico</i>	349
	<i>ANEXO XIII: Cálculo de las suposiciones para el análisis ambiental</i>	351
	<i>ANEXO XIX: Impactos de los procesos de fabricación de butadieno</i>	354

Índice de Tablas

Tabla 1 – Propiedades del Butadieno.....	28
Tabla 2 – Presión de vapor del 1,3-Butadieno a diferente temperatura.....	29
Tabla 3 – Datos de inflamabilidad del 1,3-Butadieno.....	29
Tabla 4 – Análisis de compuestos C ₄ de una corriente de craqueo de naftas.....	32
Tabla 5 – Catalizadores para la deshidrogenación oxidativa de etanol a acetaldehído.....	41
Tabla 6 – Catalizadores para la deshidrogenación no oxidativa de etanol a acetaldehído.....	42
Tabla 7 – Catalizadores para la producción de BD a partir de etanol y acetaldehído.....	43
Tabla 8 – Catalizadores para la producción de BD a partir de etanol en un paso.....	45
Tabla 9 – Resumen de las características de los catalizadores seleccionados.....	46
Tabla 10 – Balance de materia del proceso de producción del catalizador de Cu/MC.....	46
Tabla 11 – Balance de materia del proceso de producción del catalizador de Ta ₂ O ₃ /SBA-15.....	47
Tabla 12 – Balance de materia del proceso de producción del catalizador de ZrO ₂ /NanoSiO ₂	47
Tabla 13 – Balance de materia del proceso de producción del catalizador de Hf:Zn/SiO ₂	47
Tabla 14 – Balance de materia del proceso de producción del catalizador de Zn:Y/β-Zeolita.....	47
Tabla 15 – Coste estimado de los catalizadores.....	47
Tabla 16 – Algunas propiedades termodinámicas de los compuestos puros a estudiar.....	50
Tabla 17 – Datos de equilibrio del par metanol-1,3-butadieno (NIST Aspen).....	53
Tabla 18 – Datos de Yield del catalizador de Cu/MC calculados.....	59
Tabla 19 – Datos de Yield del catalizador de Ta ₂ O ₃ calculados.....	61
Tabla 20 – Datos de Yield del catalizador de ZrO ₂ calculados.....	63
Tabla 21 – Datos de Yield del catalizador de Hf:Zn calculados.....	65
Tabla 22 – Datos de Yield del catalizador de Zn:Y calculados.....	66
Tabla 23 – Propiedades térmicas y precios de los servicios utilizados.....	69
Tabla 24 – Ingresos vs Costes para la planta de catalizador de Ta ₂ O ₃	70
Tabla 25 – Ingresos vs Costes para la planta de catalizador de ZrO ₂	72
Tabla 26 – Análisis de producción de la planta de catalizador de Hf:Zn con entrada de líquido a 20°C	74
Tabla 27 – Ingresos vs Costes para la planta de catalizador de Hf:Zn.....	75
Tabla 28 – Parámetros óptimos de los equipos de la planta del catalizador de Ta ₂ O ₃	76
Tabla 29 – Parámetros óptimos de los equipos de la planta del catalizador de ZrO ₂	76
Tabla 30 – Parámetros óptimos de los equipos de la planta del catalizador de Hf:Zn.....	77
Tabla 31 – Parámetros óptimos de los equipos de la planta del catalizador de Zn:Y.....	77
Tabla 32 – Definición de corrientes E/S del PFD de la planta con catalizador Ta ₂ O ₃	79

Tabla 33 – Balance de materia y energía de la entradas y salidas de la planta de Ta ₂ O ₃	83
Tabla 34 – Características intercambiadores de calor de la planta de catalizador de Ta ₂ O ₃	84
Tabla 35 – Características bombas y compresores de la planta de catalizador de Ta ₂ O ₃	84
Tabla 36 – Características tanques flash de la planta de catalizador de Ta ₂ O ₃	85
Tabla 37 – Características torres absorción/destilación de la planta de catalizador de Ta ₂ O ₃	86
Tabla 38 – Definición de corrientes E/S del PFD de la planta con catalizador ZrO ₂	87
Tabla 39 – Balance de materia y energía de la entradas y salidas de la planta de ZrO ₂	90
Tabla 40 - Características intercambiadores de calor de la planta de catalizador de ZrO ₂	91
Tabla 41 - Características bombas y compresores de la planta de catalizador de ZrO ₂	91
Tabla 42 - Características tanques flash de la planta de catalizador de ZrO ₂	91
Tabla 43 - Características torres absorción/destilación de la planta de catalizador de ZrO ₂	92
Tabla 44 - Definición de corrientes E/S del PFD de la planta con catalizador Hf:Zn.....	93
Tabla 45 -Balance de materia y energía de las corrientes de E y S de la planta del catalizador de Hf:Zn.....	97
Tabla 46 - Características intercambiadores de calor de la planta de catalizador de Hf:Zn.....	98
Tabla 47 - Características bombas y compresores de la planta de catalizador de Hf:Zn.....	98
Tabla 48 - Características tanques flash de la planta de catalizador de Hf:Zn.....	98
Tabla 49 - Características sistema PSA de la planta de catalizador de Hf:Zn.....	98
Tabla 50 - Características torres absorción/destilación de la planta de catalizador de Hf:Zn.....	99
Tabla 51 - Definición de corrientes E/S del PFD de la planta con catalizador Y:Zn.....	100
Tabla 52 - Balance de materia y energía de las corrientes de entrada y salida de la planta del catalizador de Y:Zn.....	103
Tabla 53 - Características intercambiadores de calor de la planta de catalizador de Y:Zn.....	105
Tabla 54 - Características bombas y compresores de la planta de catalizador de Y:Zn.....	105
Tabla 55 - Características tanques flash de la planta de catalizador de Y:Zn.....	105
Tabla 56 - Características sistema PSA de la planta de catalizador de Y:Zn.....	105
Tabla 57 - Características torres absorción/destilación de la planta de catalizador de Y:Zn.....	107
Tabla 58 - Flujo de compuestos a combustible de cada planta.....	108
Tabla 59 - Resultado de la quema de corrientes residuales de las plantas.....	110
Tabla 60 - Propiedades térmicas gases de combust. de salida de los procesos de producción de 13BD	111
Tabla 61 - Vapor generado por la planta.....	113
Tabla 62 - Características principales de las plantas de producción de vapor.....	113
Tabla 63 - Factor multiplicador para el cálculo del coste instalado de los equipos.....	118
Tabla 64 - Factores multiplicadores para el método de Chilton.....	120
Tabla 65 - Coste de inversión total de las plantas de cada catalizador.....	122
Tabla 66 - Coste de la materia prima (Noviembre 2019).....	123
Tabla 67 - Consumo de materias primar de cada planta.....	123
Tabla 68 - Consumo de servicios de cada planta.....	124
Tabla 69 - Precio de los servicios utilizados en cada planta.....	124
Tabla 70 - Coste y consumo de catalizador para cada una de las plantas.....	125

Tabla 71 - Coste variables de cada planta.....	126
Tabla 72 - Valores para la estimación de los costes fijos de producción.....	127
Tabla 73 - Costes fijos de producción de cada planta.....	127
Tabla 74 - Costes de producción totales de cada caso.....	128
Tabla 75 - Generación de productos de las plantas (t/año).....	128
Tabla 76 - Precio de venta de los productos (Noviembre 2019).....	128
Tabla 77 - Costes de las plantas de producción de vapor.....	129
Tabla 78 - Ingresos generados por la planta de generación de vapor.....	129
Tabla 79 - Parámetros para el cálculo del VAN.....	130
Tabla 80 - VAN y TIR para cada caso.....	131
Tabla 81 - Precio mínimo de venta de butadieno para cada caso.....	131
Tabla 82 - Precio de venta del butadieno y el etanol según el año.....	133
Tabla 83 - Rentabilidades de los procesos de 2 pasos desde el año 2009.....	133
Tabla 84 - Rentabilidades de los procesos de 1 paso desde el año 2009.....	134
Tabla 85 - Emisiones gaseosas de los procesos por la quema de las corrientes residuales.....	140
Tabla 86 - Consumos por el uso de refrigerantes de baja temperatura.....	141
Tabla 87 - Equivalencia en EcoInvent de las fuentes del inventario.....	143
Tabla 88 - Inventario para la producción de BD con proceso de 2 pasos con catalizador de Ta ₂ O ₃	144
Tabla 89 - Inventario para la producción de BD con proceso de 2 pasos con catalizador de ZrO ₂	145
Tabla 90 - Inventario para la producción de BD con proceso de 1 paso con catalizador de Hf:Zn.....	146
Tabla 91 - Inventario para la producción de BD con proceso de 1 paso con catalizador de Y:Zn.....	147
Tabla 92 - Inventario de la fabricación de catalizador de Cu/MC.....	148
Tabla 93 - Inventario de la fabricación del catalizador de Ta ₂ O ₃	148
Tabla 94 - Inventario de la fabricación de catalizador de ZrO ₂	148
Tabla 95 - Inventario de la fabricación de catalizador de Hf:Zn.....	149
Tabla 96 - Inventario de la fabricación de catalizador de Y:Zn.....	149
Tabla 97 - Inventario para el uso de agua de refrigeración (1 kJ).....	150
Tabla 98 - Inventario para el uso de agua de refrigeración (1 kJ).....	150
Tabla 99 - Potencial de calentamiento global de los procesos de producción de 13BD.....	150
Tabla 100 - Agotamiento de recursos fósiles de los procesos de producción de 13BD.....	151
Tabla 101 - Consumo de agua de los procesos de producción de 13BD.....	152
Tabla 102 - Resumen de resultados técnicos, económicos y ambiental.....	159

Índice de Gráficas

Gráfica 1- Evolución del precio del 1,3-Butadieno (\$/t).....	31
Gráfica 2 - Usos industriales del etanol desde el año 1975.....	37
Gráfica 3- Precio del bioetanol (\$/gal) en los últimos años.....	38
Gráfica 4- Determinación curva P-xy del Etanol-1,3BD a partir de la de Metanol.....	54
Gráfica 5 - Diagrama T-xy del par Etanol-Agua.....	55
Gráfica 6 - Diagrama T-xy del par Etanol-Acetaldehído.....	55
Gráfica 7 - Diagrama T-xy del par Etanol-1,3-Butadieno.....	56
Gráfica 8 - Diagrama T-xy del par Acetaldehído-1,3-Butadieno.....	56
Gráfica 9 - Diagrama T-xy del par Acetaldehído-Agua.....	56
Gráfica 10 - Beneficio vs Relación de recirculación para la planta de catalizador de Ta ₂ O ₃	71
Gráfica 11 - Beneficio vs Relación de recirculación para la planta de catalizador de ZrO ₂	72
Gráfica 12 - Precio mercado petróleo WTI (izquierda, \$/barril) vs etanol (derecha, \$/gal).....	132
Gráfica 13 - Coste producción del 13BD según año.....	134
Gráfica 14 - Precio mínimo de venta vs Precio etanol para los diferentes procesos.....	135
Gráfica 15 - Potencial de calentamiento global de los procesos de fabricación de BD.....	151
Gráfica 16 - Agotamiento de recursos fósiles de los procesos de fabricación de BD.....	152
Gráfica 17 - Consumo de agua de los procesos de fabricación de BD.....	153

Índice de Figuras

Figura 1 - Flujograma de la Metodología utilizada.....	27
Figura 2- Pictogramas de peligro del 1,3-Butadieno.....	29
Figura 3- Usos Finales del 1,3-Butadieno.....	30
Figura 4 - Consumidores globales de 1,3-Butadieno.....	31
Figura 5 - Diagrama de flujo de proceso para la extracción de 1,3-BD de una corriente de naftas.....	33
Figura 6- Diagrama de extracción de 1,3-BD mediante deshidrogenación de butanos y butenos.....	34
Figura 7 - Mecanismo de reacción del 1,3-BD a partir de etanol.....	35
Figura 8 - Proceso de producción del bioetanol.....	39
Figura 9 - Moléculas de Crotonaldehído (Izquierda) y Butanal (Derecha).....	54
Figura 10 - PFD planta de producción de acetaldehído.....	58
Figura 11 - PFD planta de producción de 1,3-Butadieno de 2 pasos con catalizador de Ta ₂ O ₃	60
Figura 12 - PFD planta de producción de 1,3-Butadieno de 2 pasos con catalizador de ZrO ₂	62
Figura 13 - PFD planta de producción de 1,3-Butadieno de 1 paso con catalizador de Hf:Zn.....	64
Figura 14 - PFD planta de producción de 1,3-Butadieno de 1 paso con catalizador de Y:Zn.....	66
Figura 15 - PFD definitivo de la planta con catalizador de Ta ₂ O ₃	80
Figura 16 - PFD de la sección de purificación de 1,3-BD de la planta con catalizador de Ta ₂ O ₃	81
Figura 17 - PFD definitivo de la planta con catalizador de ZrO ₂	88
Figura 18 - PFD de la sección de purificación de 1,3-BD de la planta con catalizador de ZrO ₂	89
Figura 19 - PFD definitivo de la planta con catalizador de Hf:Zn.....	94
Figura 20 - PFD de la sección de purificación de 1,3-BD de la planta con catalizador de Hf:Zn.....	95
Figura 21 - PFD de la sección de purificación de hidrógeno de la planta con catalizador de Hf:Zn.....	96
Figura 22 - PFD definitivo de la planta con catalizador de Y:Zn.....	101
Figura 23 - PFD de la planta auxiliar de producción de vapor para los procesos de producción de butadieno.....	112
Figura 24 - Diagrama de entradas y salidas del proceso con catalizador de dos pasos.....	137
Figura 25 - Diagrama de entradas y salidas del proceso con catalizador de un paso.....	137
Figura 26 - Red de contribuciones de GWP de uso de 1 MJ de electricidad.....	154
Figura 27 - Red de contribuciones de GWP de uso de 1 kg de DMF.....	155
Figura 28 - Red de contribuciones de ARF de uso de 1 kg de DMF.....	156
Figura 29 - Red de contribuciones de consumo de agua del uso de 1 kg de Bioetanol.....	157

Notación

13-BD	1,3-Butadieno
ARF	Agotamiento de recursos fósiles
ARH	Agotamiento de recursos hídricos/Consumo de agua
BIP	Parámetro de interacción binaria
CAPEX	Costes de inversión
CW	Agua de refrigeración
DMF	N,N-dimetilformamida
GWP	Potencial de calentamiento global
LPS	Vapor de baja presión
MPS	Vapor de media presión
OPEX	Costes de producción
P	Presión
P ⁰	Presión de vapor
Ref.	Refrigerante de baja temperatura
T	Temperatura
u.f	Unidad funcional

1 ANTECEDENTES, OBJETIVOS, ALCANCE Y METODOLOGÍA

1.1 ANTECEDENTES

El proyecto desarrollado en este documento puede considerarse una extensión o continuación de un proyecto de investigación llevado a cabo en la Escuela Técnica de Superior de Ingeniería de la Universidad de Sevilla por el Departamento de Ingeniería Química y Ambiental^{1,2,3}, para el desarrollo de procesos y tecnologías orientadas a la neutralidad desde el punto de vista del clima en el desarrollo industrial, tal y como dicta la estrategia de la comunidad Europea para el año 2050⁴.

Además, el Departamento de Ingeniería Química y Ambiental de la ETSI, cuenta con una larga experiencia en el estudio de catalizadores para el desarrollo de la industria verde, como es el caso de las biorrefinerías, contando con líneas de investigación propias enfocadas a ello como el grupo de bioenergía⁵.

Previos a este proyecto, existen gran cantidad de procesos en los que se utiliza el bioetanol como fuente renovable, para la fabricación de productos de alto valor añadido muy presentes en la industria, que de otro modo, las materias primas provendrían de recursos fósiles no renovables, con la problemática que se sabe a día de hoy que ello conlleva.

De forma más concreta este trabajo se centra en el estudio tecno-económico y ambiental de algunos procesos para la producción de 1,3-Butadieno a partir de bioetanol, según el catalizador utilizado en los equipos de reacción química, y que a partir de las diferentes configuraciones de las plantas diseñadas, se pueda hacer la comparativa entre estas en el aspecto económico y ambiental.

1.2 OBJETIVOS

El objetivo de este proyecto es estudiar la viabilidad técnica, económica y ambiental de diferentes procesos capaces de transformar el bioetanol en 1,3-Butadieno de forma catalítica. Para el estudio, se seleccionarán 4 catalizadores diferenciándolos según la ruta de producción de butadieno: 2 pasos o 1 paso. Se elegirán 2 catalizadores de 2 pasos y 2 catalizadores de 1 paso. Dos de los catalizadores seleccionados (uno de 1 paso y otro de 2 pasos) han sido estudiados y probados por el Departamento de Ingeniería Química y Ambiental y los otros dos elegidos de la bibliografía que aportan resultados que parecen prometedores respecto a los tres aspectos anteriormente comentados pero que dichos resultados no han sido respaldados por segundas fuentes.

1.3 ALCANCE

Partiendo del análisis bibliográfico de los procesos y la toma de una serie de datos se pretende conseguir los siguientes alcances en este proyecto:

- **Búsqueda preliminar:** Previa a los siguientes estudios es necesaria la búsqueda de datos para partir de una base sobre la que construir los análisis pertinentes. Para ello se realizó una búsqueda bibliográfica de artículos sobre estudios donde se desarrollaran catalizadores para la producción de butadieno a partir de etanol. Debido a la gran cantidad de estudios sobre este concepto, tras su presentación, se seleccionaron algunos de estos catalizadores con características interesantes para su posterior comparación.

- **Alcance de los procesos estudiados:** Los procesos estudiados engloban desde la entrada fresca de bioetanol hasta la salida del producto de 1,3-Butadieno preparado para su venta. Entre estos dos puntos, se llevará a cabo el diseño de la planta, con su sistema de separación y purificación de productos, además de la optimización y simulación de todos estos sistemas, consiguiendo la recuperación de otros posibles subproductos o la recirculación de reactivos de alto valor añadido. Para los subproductos de bajo valor añadido o que se encuentren mezclados en bajas cantidades como corrientes residuales del proceso, se le dará salida para la producción de vapor a partir de su combustión, en aquellos procesos que sean posibles. Así se intentará generar plantas autoabastecidas en algunos servicios y con la posibilidad de venta de vapor. Para el diseño de las plantas se realizará un diseño conceptual para comprobar de forma preliminar el comportamiento de cada proceso, posteriormente se realizará el diseño riguroso donde se incluyan todos los aspectos a conocer de la planta por simulación, utilizando métodos termodinámicos obtenidos de bibliografía.
- **Alcance del análisis económico:** El estudio técnico anterior, aportará toda la información necesaria para este análisis. Con los balances de materia de reactivos, junto con los consumos de servicios, sabidos su coste o precio de mercado, a partir de la búsqueda de datos o de su estimación, se calcularán los costes operativos. La simulación de los procesos dará también resultados sobre algunas características que formen los equipos de cada proceso, a partir de ahí y con una serie de correlaciones se calcularán los costes de inversión. Los gastos generales tanto de los costes operativos como de inversión se estimarán por métodos encontrados en la bibliografía. Conocido esto y calculando los ingresos, venta de producto, subproducto y vapor, a partir de análisis de flujo de caja se calculará la rentabilidad de los procesos, así como análisis de sensibilidad como herramientas de predicción o estimación de futuros escenarios económicos de cada proceso diseñado.
- **Alcance del análisis ambiental:** A partir de la herramienta de análisis de ciclo de vida o ACV, se calcularán algunos impactos ambientales que genera el butadieno obtenido a partir de estos procesos con un análisis cradle-to-gate, es decir desde el inicio de los procesos necesarios para la fabricación del butadieno, hasta la salida final de este producto desde el proceso. Para el desarrollo del ACV, se obtendrán inventarios aportados por los balances de materia y energía del análisis técnico de cada proceso, también serán necesarias algunas suposiciones o hipótesis por el requerimiento de datos que con el alcance del proyecto no podrán ser determinados de forma directa.

1.4 METODOLOGÍA

El trabajo consistió en un análisis multicriterio de la producción de 1,3-butadieno a partir de bioetanol, empleando información bibliográfica. La metodología que se siguió para la realización del presente proyecto se muestra a continuación:

- **Búsqueda bibliográfica:** El primer paso para el desarrollo del trabajo fue la búsqueda de datos bibliográficos acerca del estado del arte de los procesos de fabricación del 1,3-Butadieno a partir de bioetanol, a fin de encontrar procesos (o en este caso catalizadores), para realizar una comparación entre ellos. Se decidió evaluar 4 catalizadores de las dos vías de producción existentes, de dos pasos y de uno, seleccionando dos de cada uno de estos. Se seleccionó un catalizador de un paso y otro de dos pasos, que a priori muestran buenas características en cuanto a conversión, selectividad o generación de subproductos. Los otros dos catalizadores (uno de cada vía de producción), fueron elegidos basándose en la refutación de los resultados encontrados por líneas investigación diferentes. Una vez seleccionados los 4 catalizadores, se llevó a cabo la determinación de los materiales

necesarios para su fabricación, a fin de poder estimar el coste de estos, a partir de un método encontrado en bibliografía, y poder calcular su impacto ambiental, conocidos dichos materiales y sus procesos de producción, cuya información viene siempre aportada en los datos bibliográficos consultados para esos catalizadores. Los datos de los catalizadores se tomaron de artículos de investigación, por lo que se da por hecho que el nivel tecnológico de desarrollo de los procesos correspondientes puede ser muy preliminar.

- **Diseño y simulación de procesos:** Una vez seleccionados los catalizadores a considerar, haciendo uso de sus datos disponibles, se procedió al diseño de los procesos, ya que al tratarse de catalizadores de un proceso de producción industrial en desuso, no existen diseños de plantas que los usen actualmente.

1) Para ello se hizo un diseño secuencial ordenado por la lógica que se siguió hasta el diseño definitivo, donde primero se describió de forma cualitativa el proceso ideado para cada catalizador, en el apartado de diseño conceptual, a fin de conseguir una buena comprensión de cada una de las plantas. En esta fase de diseño preliminar de los procesos, se hizo uso del software de cálculo EES, para observar el comportamiento aproximado de estos y usar dichos valores aproximados para mejorar la convergencia de las plantas cuando, posteriormente, se realice la simulación real de cada proceso en AspenPlus. También se calcularon datos relevantes de los reactores como las denominadas Yield (definidas en su correspondiente apartado), que son necesarias para la simulación de estos equipos.

2) A continuación se montaron los procesos diseñados anteriormente en AspenPlus. Una vez realizado este paso, para determinar la operación de cada caso al menor coste posible, se realizó la optimización de los procesos a partir de esos modelos del simulador anteriormente mencionados. A partir de estos, se consiguió encontrar el punto de operación óptimo, a través de un modelo económico simplificado (utilizando herramientas como Aspen Economic Analysis) de las plantas con la obtención de la variación del beneficio frente variables internas de las mismas, que afecten directamente al balance de materia, como caudales de purgas o temperaturas. Por último se llevó a cabo el diseño de equipos (como columnas de destilación) para determinar algunas características de estos que consigan un compromiso entre sus costes operativos y de capital, manteniendo su funcionamiento requerido.

3) Posteriormente, conseguido lo anterior y teniendo ya los balances de materia y energía cerrados de los procesos, se procedió a la simulación definitiva de estos, añadiendo algunos complementos a las plantas que no se consideraron en el diseño conceptual para facilitar los estudios anteriores, como son las zonas de purificación de productos, para alcanzar la concentración de venta requerida, y la integración energética de los procesos. En este caso, para reducir la dificultad de diseño de los procesos, la integración energética se aplicó a los reactores entre sus corrientes de entrada y salida para el precalentamiento de la de entrada de forma regenerativa con la de salida. Por último, en este apartado de diseño final de los procesos se aportaron algunas de las características de los equipos utilizados en los procesos para el posterior cálculo de su coste de inversión, así como sus requerimientos energéticos para el cálculo de los costes operativos. Estos resultados (de balance de materia y características de equipo), fueron las utilizadas como valores definitivos para los siguientes apartados (análisis económico y ambiental).

4) De los balances de materia anteriores se observó que, en tres de los cuatro casos estudiados, sobran una serie de corrientes residuales orgánicas de bajo valor añadido o con una gran mezcla de compuestos difícil de separar. Por lo tanto, se hizo un análisis energético de estas corrientes para analizar si son capaces de sustituir algunos servicios calientes utilizados en las plantas (vapor de baja y media

presión y gases de combustión a partir de gas natural), a partir de la combustión de estas. En el caso de los servicios calientes de vapor, es necesario producirlo en una planta auxiliar para después utilizarlo en el proceso principal. Así, es necesario el diseño de una última instalación para la producción de vapor para su uso en el proceso de producción de butadieno y para su venta, en caso de que sobre calor de la combustión estas corrientes. Esta instalación auxiliar de generación de vapor aprovechará, no solo las corrientes residuales combustibles de los procesos, sino que también usará para precalentamiento de sus corrientes, los gases procedentes de los reactores y hornos del proceso principal.

- **Evaluación económica:** Del procedimiento anterior, se extrajeron los datos para estimar los costes operativos y de inversión de la planta (datos de los equipos, consumos de servicios y materias primas, etc.), que, junto con estimaciones presentes en la literatura, estimar los costes de inversión y operación total de cada uno de los procesos.

Se estimaron los costes de inversión totales, empleando datos de las simulaciones y aplicando métodos típicos de fases de desarrollo preliminares como el método de Chilton, en el cual es necesario conocer los costes de los equipos del proceso, por lo que previamente se realizó la estimación de este coste a partir de correlaciones presentes en la literatura y con los datos extraídos del apartado anterior.

Asimismo, se estimaron los costes operativos a partir de los consumos de los equipos de los procesos ya calculados anteriormente, y a partir de la estimación de su coste con correlaciones de precios encontrados en la bibliografía. Además, aplicando una serie de factores para la determinación de otros costes indirectos, se obtuvieron finalmente el coste total de producción requerido.

Los ingresos de las plantas se calcularon con los datos del balance de materia de los productos, principalmente 1,3-Butadieno, Hidrógeno, Etileno y Propileno, del diseño final y con los precios de mercado de esos mismos productos. Otra fuente de ingreso derivó de la decisión de utilizar las corrientes residuales o de poco valor, generadas por las plantas, para la producción de vapor. Para ello con los datos obtenidos del diseño de la planta de producción de vapor en el apartado de diseño, se calcularon los ingresos por autoconsumo y venta de este vapor y todos los costes descritos anteriormente (operativos y de inversión) que repercuten en la economía del proceso, por la adición de este proceso auxiliar a los procesos principales de producción del 1,3-butadieno.

Una vez se dispuso de datos de inversión, ingresos y gastos se realizó una proyección de flujos de caja comparativo de cada una de las instalaciones, y a partir de ahí aplicar fórmulas de evaluación de rentabilidad como el TIR y el VAN.

Por último, se llevó a cabo un análisis de sensibilidad respecto a la variación de los aspectos más volátiles, que son los precios de productos y materias primas.

- **Evaluación ambiental:** Para la evaluación ambiental se aplicó la metodología del Análisis de Ciclo de Vida (o ACV) comparativo empleando el software Simapro y la base de datos de EcoInvent. Para ello se realizó un inventario de emisiones de cada uno de los casos, extrayendo los datos de los balances de materia y energía, u obteniéndolos a partir de suposiciones en caso de no disponer de los datos necesarios. Estos datos se introdujeron en el programa y se calcularon los diferentes impactos, de los cuales se centró la atención en tres categorías de impacto significativas para la comparación entre los cuatro procesos y entre el butadieno producido a partir de vías no renovables, cambio climático, agotamiento de recursos y recursos hídricos, ya que, como se justificó en este apartado, son los más relevantes en esta comparación.
- **Conclusiones:** Para finalizar el estudio, se sacaron una serie de conclusiones referentes a los aspectos técnicos, económicos y ambientales de los procesos, a fin de destacar los aspectos

más relevantes obtenidos de todos los estudios anteriores, consiguiendo así el objetivo final del proyecto, la comparación entre procesos de fabricación del 1,3-Butadieno a partir de bioetanol.

En el siguiente flujograma se representan de forma más gráfica los pasos seguidos en este proyecto y los flujos de información (línea discontinua) entre los distintos bloques de estudio llevados a cabo.

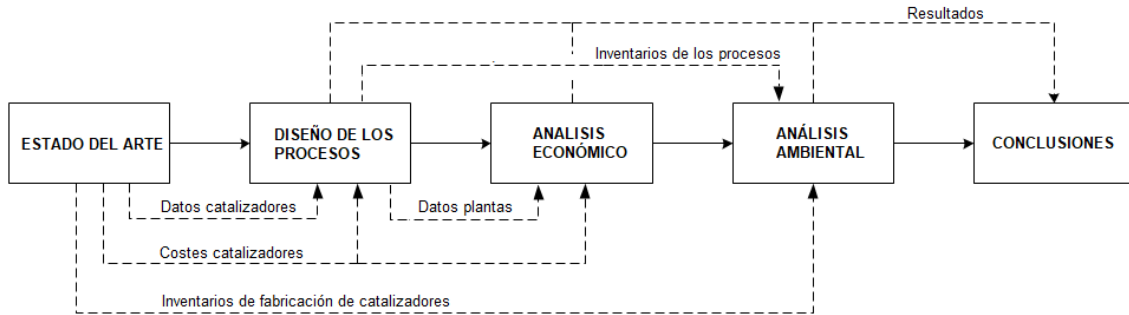


Figura 1- Flujograma de la Metodología utilizada

2 INTRODUCCIÓN

2.1 MOTIVACIÓN DEL ESTUDIO

La motivación para la realización de este estudio es la nueva tendencia para la desvinculación de la industria tradicional del petróleo. Esto es debido a que la dependencia de este producto puede producir situaciones de déficit de productos por la variación de las existencias de petróleo disponible. Esta independencia también consigue que regiones con difícil acceso a este producto, pueda desarrollar una industria propia sin depender de otros grupos con el control de la industria de extracción y procesamiento de crudo.

En el caso de la Unión Europea, además, se pretende conseguir para el año 2050 una economía neutra en carbono⁴, por ello es necesario que en el caso de la industria, además de ser necesaria la utilización de energía renovable, se deben buscar rutas alternativas para la neutralidad en los mismos procesos de producción, lo que conlleva en otras palabras, al uso de materias primas de origen no fósil.

2.2 BUTADIENO

El butadieno (1,3-BD) o 1,3-butadieno es un gas incoloro perteneciente al grupo de los alquenos, es un gas incoloro con leve olor a gasolina, con unos grandes volúmenes de producción (aproximadamente 18 millones de toneladas métricas por año⁶), puesto que es utilizado como monómero en la polimerización de cauchos sintéticos o como producto intermedio en la industria química, ya que sus dobles enlaces le confieren una gran reactividad, aunque no ocurre así con su isómero el 1,2-butadieno por lo que no tiene tanto interés comercial.

2.2.1 Propiedades del butadieno

Algunas de las propiedades físicas y químicas más destacables del 1,3-butadieno son:

Tabla 1 – Propiedades del butadieno

Peso molecular (g/mol)	54,09
Temperatura normal de ebullición (°C)	-4,4 ⁷
Temperatura normal de fusión (°C)	108,9 ⁷
Punto Crítico (°C, atm)	161,8 ; 42,6 ⁹
Solubilidad en agua a 20 °C (mg/L)	735 ⁸
Constante de Henry a 20 °C (kPa·m ³ /mol)	20,7 ¹³
Soluble en	Etanol, Éter, Benceno y Acetona ⁸
Densidad líquido a 20°C (kg/m ³)	621 ¹⁰
Viscosidad del gas a 20°C, 1 atm (cP)	0,00754 ¹¹
Viscosidad líquido a -40°C (cP)	0,33 ¹¹
Calor de combustión (kJ/mol)	-2541,5 ¹⁰
Calor de evaporación a 25 °C (kJ/mol)	20,86 ¹⁰

De forma más detallada, la presión de vapor del 1,3-butadieno presenta los siguientes valores:

Tabla 2 – Presión de vapor del 1,3-Butadieno a diferente temperatura ¹²

Presión de vapor (kPa)	0,1	1	10	100
Temperatura (°C)	-106	-83	-51,9	4,7

2.2.2 Peligros y seguridad

En cuanto a otras cuestiones de seguridad, respecto a peligros físicos, hay que saber que el 1,3-butadieno es un gas altamente inflamable con código H220, que en contacto con aire y/o sustancias oxidantes puede producir deflagraciones, por ello hay que tener en cuenta la siguiente información para su manejo y uso:

Tabla 3 – Datos de inflamabilidad del 1,3-butadieno

Flash Point (°C)	-76,1 ⁷
Temperatura de autoignición (°C)	420 ¹⁴
LEL (% v/v)	2 ⁷
UEL (% v/v)	11,50 ⁷

Respecto a peligros para la salud humana, se sabe que esta sustancia puede producir cáncer y alteraciones genéticas, además causan irritación del sistema respiratorio a concentraciones de 10000 ppm en periodos de 1 minuto, e irritación del tracto respiratorio superior y los ojos a 8000 ppm en una exposición de 8 horas¹⁵. Para estos peligros, tiene los códigos H340 y H350.

Por todo ello, los pictogramas que deben acompañar a esta sustancia son los siguientes:



Figura 2- Pictogramas de peligro del 1,3-Butadieno

2.2.3 Usos del butadieno

La ilustración a continuación muestra los usos más comunes de 1,3-Butadieno la producción de polímeros.

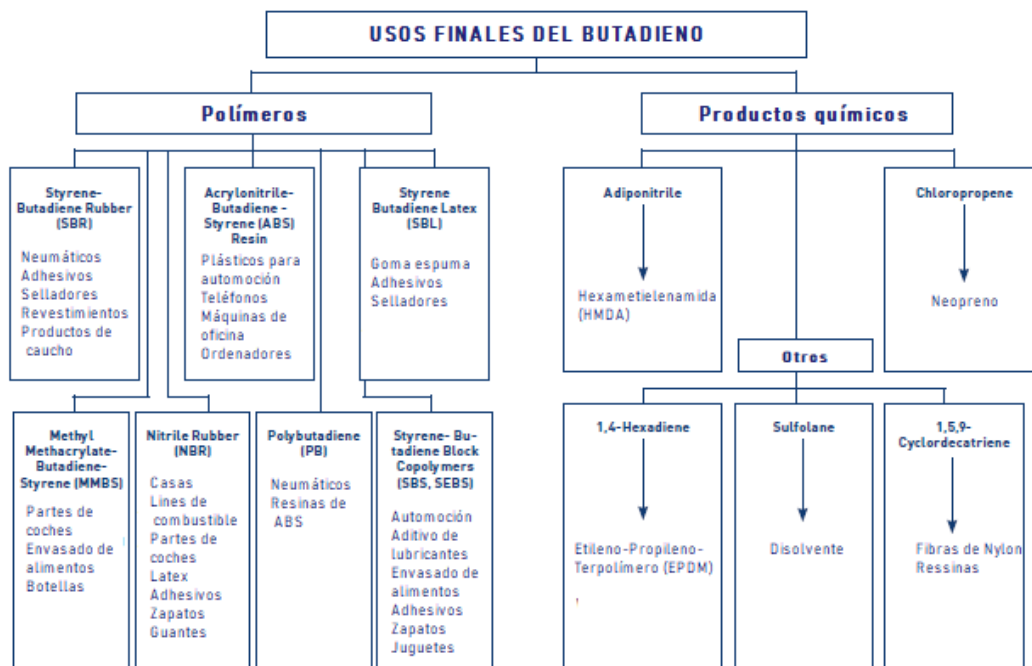


Figura 3- Usos Finales del 1,3-butadieno¹⁶

SBR: o caucho estireno-butadieno por sus siglas en inglés, puesto que se trata de un copolímero de butadieno y estireno. Es el mayor consumidor de butadieno, alrededor del 32% del total producido. Este elastómero que pretende sustituir el caucho natural, su uso principal es la fabricación de neumáticos, revestimiento de cables y suelas de zapatos.

PB o Polibutadieno: Se trata de otro caucho sintético producido a partir de la polimerización de la molécula de 1,3-Butadieno. Este utiliza el 22% del butadieno producido aproximadamente y tiene unos usos muy similares al SBR, y además es utilizado como producto intermedio para la producción de acrilonitrilo-butadieno-estireno (ABS).

También es utilizado en otros polímeros como látex de estireno-butadieno con un consumo mundial de butadieno de aproximadamente (10%)¹⁷, u otros como: resinas de ABS (4%)¹⁷ o caucho de nitrilo (3%)¹⁷ entre otros minoritarios.

El resto del porcentaje de butadieno producido es utilizado principalmente para la síntesis del adiponitrilo y en menor proporción, en la del cloropreno.

De forma global, los territorios con más consumo de este producto, y sus porcentajes, son los mostrados en la figura 4.

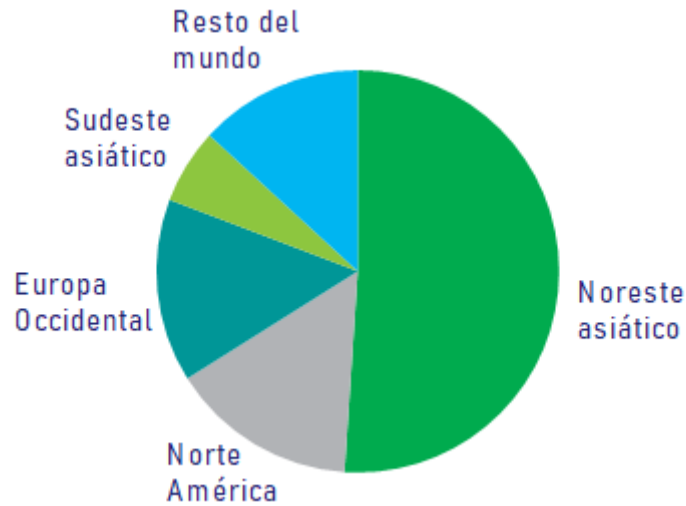
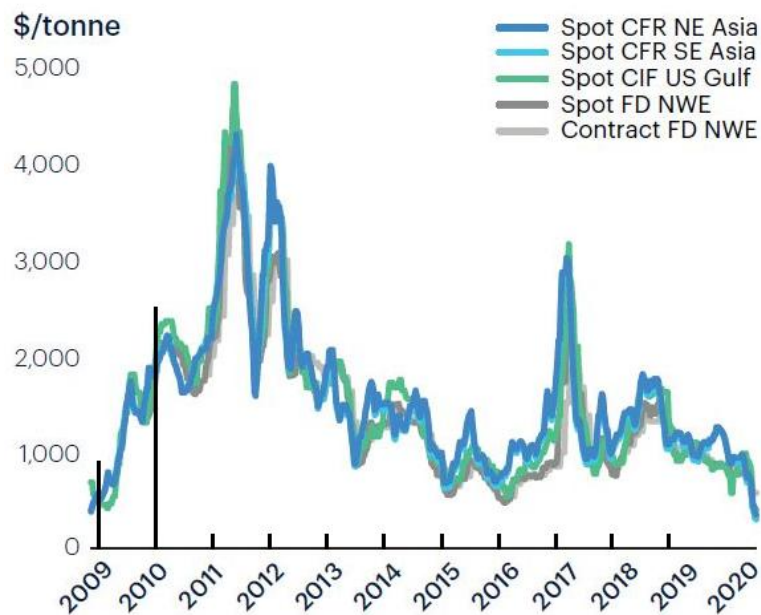


Figura 4 - Consumidores globales de 1,3-butadieno¹⁸

En términos globales, la producción de butadieno fue de 12 millones de toneladas por día para el año 2019, y con una estimación de incremento en su demanda de alrededor del 2% de media anual⁹⁸

2.2.4 Mercado del butadieno

El mercado de butadieno, a lo largo de su historia de producción industrial, ha tenido muchas variaciones de precio por tonelada¹⁹ debido al lugar geográfico de producción o su demanda, entre otros factores. A pesar de esto, la razón principal de su gran variación de precio es derivado del cambio en el etileno disponible puesto que, como se verá más adelante, la mayor parte del butadieno producido es obtenido como subproducto en la producción de etileno en el craqueo de hidrocarburos. Esta gran variación puede apreciarse perfectamente en la siguiente gráfica.



Gráfica 1- Evolución del precio del 1,3-butadieno (\$/t)²⁰

El precio de este producto en junio de 2018 fue el siguiente según zonas geográficas²¹:

- Europa: 750 €/t
- Asia: 1150\$/t (977,5 €/t)
- América 0,41 \$/lb (767,6 €/t)

2.2.5 Producción de Butadieno

Existen dos rutas de producción industrial principales para la obtención del 1,3-butadieno: la petroquímica y la ruta a partir de la transformación de alcoholes.

2.2.5.1 Obtención de 13BD mediante ruta petroquímica

Esta primera, utiliza como materia prima las corrientes de procesamiento del petróleo crudo, como la del craqueo de naftas para la obtención de Etileno obteniendo el butadieno como subproducto de este proceso, como se observa en la Tabla 4. Esta es la ruta preferida y más utilizada desde siempre para la obtención de este compuesto debido a sus altos rendimientos y a su sencillez respecto a otras rutas químicas.

Tabla 4 – Análisis de compuestos C₄ de una corriente de craqueo de naftas²²

	Cracking intensity			
	moderate	medium	high	very high
C ₃ -Hydrocarbons	0.3	0.3	0.3	0.16
Butane	4.2	5.2	2.8	0.54
Isobutane	2.1	1.3	0.6	0.53
1-Butene	20.0	16.0	13.6	9.18
<i>cis</i> -2-Butene	7.3	5.3	4.8	1.61
<i>trans</i> -2-Butene	6.6	6.5	5.8	3.63
Isobutene	32.4	27.2	22.1	10.13
1,3-Butadiene	26.1	37.0	47.4	70.10
1,2-Butadiene	0.12	0.15	0.2	0.40
Methylacetylene	0.06	0.07	0.08	0.10
Vinylacetylene	0.15	0.3	1.6	2.99
Ethylacetylene	0.04	0.1	0.2	0.53
C ₅ -Hydrocarbons	0.5	0.5	0.5	0.1

En ella, se distinguen a su vez, dos métodos para la obtención del butadieno:

MÉTODO EXTRACTIVO

Este proceso supone el 75 % de la producción mundial de butadieno²³ y consiste en obtención de este compuesto a partir de su separación directa de las corrientes de craqueo/descomposición de las naftas como subproducto de la reacción para producir etileno. Esta corriente está formada por una gran variedad de hidrocarburos, como los C₄, entre los que está 1,3-BD, y que, como se observa en la tabla anterior, el butadieno se presenta en cantidades nada despreciables, resultando rentable su obtención a partir del aislamiento de éste con respecto al resto.

Para conseguir la extracción del 1,3-butadieno del resto de compuestos de la tabla (ya que se considera que el resto de hidrocarburos son muy fácilmente separables) se emplea inicialmente una

destilación extractiva con disolvente, que debido a la diferencia de solubilidad del n-butano y los butenos con el resto de compuesto, es fácil separarlos en un primer paso.

Tras esta primera separación, la volatilidad relativa del resto de componentes y el solvente utilizado es la suficiente como para separarlos entre sí aplicando simplemente un tren de destilación convencional, obteniéndose en la última columna de destilación el 1,3-butadieno por cabeza y 1,2-butadieno y los residuales de C₄+ residuales, que entraron también por la alimentación al sistema. Este proceso podría resumirse de forma simplificada con el siguiente diagrama de bloques.

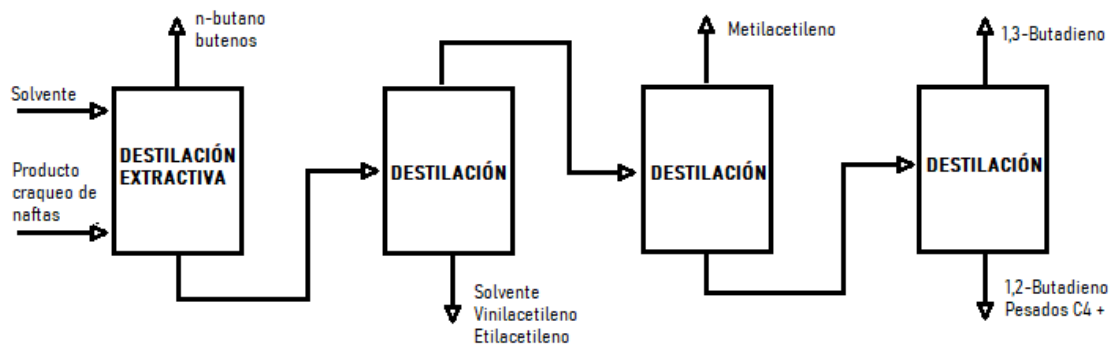
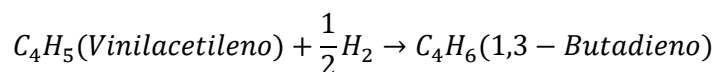
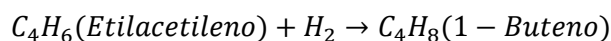
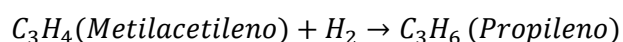


Figura 5 - Diagrama de flujo de proceso para la extracción de 1,3-BD de una corriente de naftas

Como se observa en el diagrama anterior y en la Tabla 4, también existen cantidades significativas de compuestos de acetileno en el proceso, es por ello, que a estos sistemas se les suele acoplar un tratamiento previo de eliminación de estos compuestos, llamado Proceso KLP desarrollado por Dow Chemical Company en 1984. Este proceso de tratamiento previo de la corriente anterior a la destilación extractiva, tiene como objetivo la transformación de los compuestos de acetileno en Propileno, 1-Buteno e incluso en 1,3-Butadieno, como el caso de la reacción del Vinilacetileno, que sumado a que este proceso suele tener unas conversiones de acetilenos prácticamente del 100%, esta tecnología tiene un gran interés económico por el aumento del rendimiento de obtención del producto deseado y a la simplificación del tren de separación que se requerirá posteriormente.

Las reacciones involucradas son las siguientes:



Todas ellas, se llevan cabo en fase líquida, introduciendo hidrógeno en dos reactores en serie, a presiones de operación moderadas y temperaturas reducidas, para aumentar la solubilidad de éste hidrógeno²⁴.

DESHIDROGENACIÓN DE BUTANOS Y BUTENOS

La última vía de obtención del 1,3-butadieno a partir de procesos petroquímicos, es la deshidrogenación catalítica de n-butano y butenos, ya que como se observa anteriormente, es una de

las corrientes resultantes en la separación directa del 1,3-butadieno anteriormente comentada. El diagrama de bloques simplificado de este procedimiento podría ser:

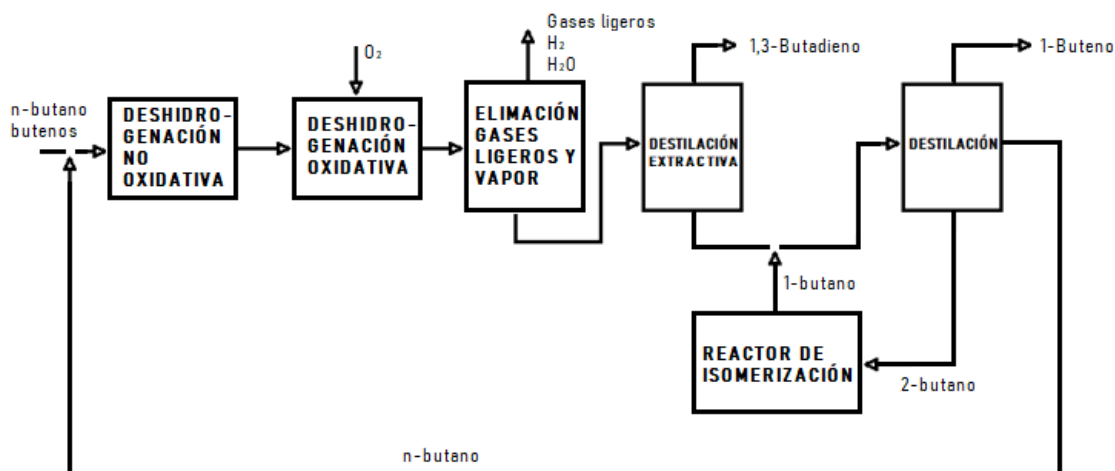
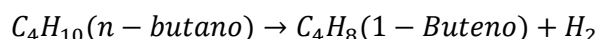
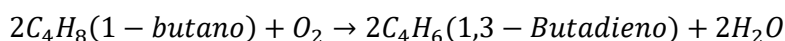


Figura 6- Diagrama de extracción de 1,3-BD mediante deshidrogenación de butanos y butenos

Este proceso consiste en una deshidrogenación no oxidativa para convertir el n-butano en 1-buteno y 2-buteno gracias a la reacción endotérmica:



Posteriormente, se realiza una deshidrogenación oxidativa, introduciendo oxígeno o una corriente de oxígeno más algún gas inerte como puede ser N_2 a partir de aire, para conseguir:



Una vez se obtiene el efluente del reactor de deshidrogenación oxidativa, esta corriente pasa a una unidad de separación de los gases con bajo punto de ebullición, como hidrógeno e inertes y agua del resto.

La corriente resultante, compuesta principalmente por n-butano, 1,3-butadieno y butenos, se envía a una columna de destilación extractiva donde se obtiene el 1,3-BD por cabeza y el resto por cola, que se lleva a una destilación convencional donde se obtienen 3 cortes.

En esta última columna de destilación del sistema, se separa el 1-buteno (por cabeza) de los otros componentes (2-buteno y n-butano). Puesto que el 1-buteno sí tiene interés, la corriente de cabeza de la columna será vendida como subproducto muy puro. La corriente de fondo de la torre, que contiene el 2-buteno, es conducida a un reactor de isomerización, para convertir ese 2-buteno a 1-buteno. Tras el reactor de isomerización, esta corriente no se mezcla con la de producto de 1-buteno, puesto que al no ser su conversión y selectividad del 100%, quedarán trazas del resto de componentes que podrían empeorar la calidad del subproducto obtenido, por lo tanto, esta se vuelve a introducir en la alimentación de la última columna de destilación²⁵.

2.2.5.2 Producción de 13BD mediante la transformación de alcoholes

La ruta restante alternativa para la obtención de 1,3-Butadieno es la transformación de alcoholes,

donde los más utilizado es el Etanol.

Esta ruta para la obtención del 1,3-BD, aunque ya obsoleta, comenzó a usarse a escala industrial en la Unión Soviética durante la II Guerra Mundial para evitar la dependencia del petróleo en la fabricación de cauchos, con el proceso denominado Lebedev, que, en un paso conseguía la conversión del etanol a 1,3-BD²⁶.

Posteriormente, en Estados Unidos se comenzó a utilizar el proceso de 2 pasos llamado Ostromislenskiy. Este proceso incluía una deshidrogenación parcial del Etanol a Acetaldehído, seguido por una transformación de la mezcla de este último y Etanol directamente a 1,3-BD²⁷.

Se han reportado a lo largo de la historia otras materias primas para la generación de 1,3-BD a partir de Alcoholes, como por ejemplo con crotonaldehído, aunque este nunca llegó a escala industrial respecto a otros procesos porque, aunque se consiguen reacciones más rápidas, su elevado consumo de etanol por tonelada de 1,3-BD producido es más alto, aunque su desarrollo sí sirvió como base para plantear el mecanismo de la figura 7²⁸.

Aunque se encuentra en fase de estudio y discusión, el mecanismo generalmente más aceptado para la formación del 1,3-BD a partir de etanol es el siguiente:

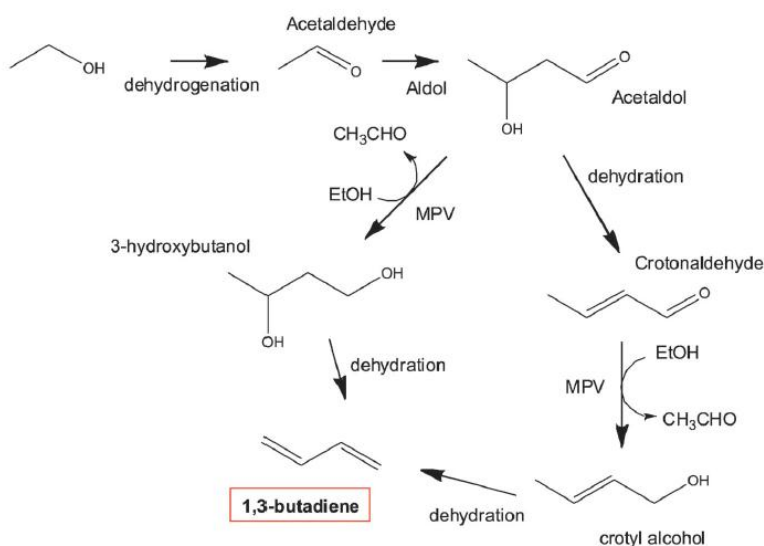
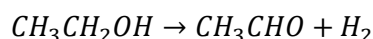


Figura 7 - Mecanismo de reacción del 1,3-BD a partir de etanol²⁹.

Esos procesos anteriormente comentados, tienen las siguientes características:

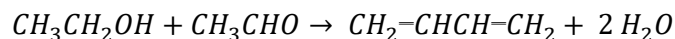
OSTROMISLENSKY:

Este es el proceso de dos etapas, donde en la primera etapa se pretende conseguir la deshidrogenación catalítica del Etanol a Acetaldehído según la reacción endotérmica:



En este primer paso, la reacción se suele llevar a cabo a temperaturas moderadas, mayores a 560 K, establecida como compromiso entre evitar la desactivación del catalizador y por consiguiente la bajada de selectividad, que además, en esta etapa es muy alta (>90%) y una alta conversión de Etanol³⁴. Los catalizadores utilizados en los reactores que engloban esta etapa, suelen ser de Cu, Ag o Cr sobre un soporte de sílice.

El segundo paso suele llevarse a cabo a una temperatura de 350-400 °C, aunque en este caso no existe un tipo específico de catalizador, puesto que a día de hoy la investigación en este campo se centra en la búsqueda de catalizadores que permitan mejores conversiones y selectividades. Entre todos los catalizadores analizados, los que presentan mejores características son los de Ta y Zr³⁵. En este paso, se da la reacción:



Ambas reacciones a escala industrial se dan a presiones cercanas o iguales a las atmosféricas, ya que como se observa en las reacciones anteriores, la disminución de la presión beneficia al equilibrio químico de esas reacciones deseadas, puesto que ambas son en fases gas.

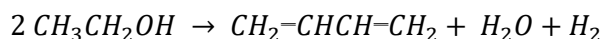
Por último, los productos secundarios más abundantes en esta ruta, generados principalmente por la reacción del segundo paso de etanol y acetaldehído a 1,3-BD son el dietiléter, ácido acético, n-butanol, 1-buteno, etileno y hexadieno³⁶.

La producción de 1,3-BD a partir de etanol ha sido tradicionalmente menos utilizada que la petroquímica, debido a que su proceso conlleva unos mayores costes de separación por la generación de diversos productos secundarios³⁷. A pesar de ello, este tipo de vías de obtención vuelven a estar en auge por el requerimiento del desarrollo de productos renovables que consigan menos emisiones de gases de efecto invernadero o incluso emisiones de CO₂ neutras nulas. Siendo muy prometedora la opción de uso de bioetanol para la producción de 1,3-BD³⁸, consiguiendo además, no hacer depender la producción del 1,3-BD del fluctuante mercado del petróleo.

LEBEDEV:

Este proceso de 1 paso pretende conseguir la conversión directa del Etanol a 1,3-BD de forma catalítica a una temperatura de entre 350 y 450³⁰ °C y dependiendo del catalizador, alcanzando hasta conversiones cercanas al 90 % y rendimientos del 60 %³¹, siendo al parecer los más prometedores los de Zn y Ta³².

La reacción que sigue el etanol en el proceso Lebedev de 1 paso es la siguiente:



Los productos secundarios principales generados a raíz en el proceso (y por tanto, esta reacción) son: acetaldehído, crotonaldehído, etileno, dietiléter, butanol, butenos y otros hidrocarburos pesados³³

2.3 BIOETANOL

En la industria del etanol se hace la diferencia entre dos tipos, dependiendo de cuál sea su origen, estos son el bioetanol y el etanol sintético, la diferencia entre uno y otro es el origen de la materia prima, siendo en el primer caso de origen renovable y no renovable en el segundo:

Dentro del bioetanol, el proceso de fabricación utilizado es la fermentación de una serie de materias primas con levaduras u otros microorganismos. Estas materias primas pueden clasificarse en⁷⁶:

- **Lignocelulísicos:** Aquí se encuentran los materiales de biomasa con alto contenido en celulosas y hemicelulosas, como pueden ser residuos agrícolas, bagazo, madera etc.
- **Melazas:** Es decir materias con alto contenido en azúcares como puede ser la remolacha,

caña de azúcar.

- **Amiláceos:** Donde la fuente de azúcares para la fermentación viene de la presencia de almidón. En este grupo entran todos los tipos de cereales (trigo, cebada, maíz...) u otros cultivos como patata.
- **Vinazas:** Puede ser en sí mismo un residuo de la posterior fermentación de las materias primas anteriores o residuos de destilerías, que todavía contienen azúcares para hacer posible la fermentación, y por lo tanto, con su uso se mejora el rendimiento del proceso de obtención del etanol del que provenga.

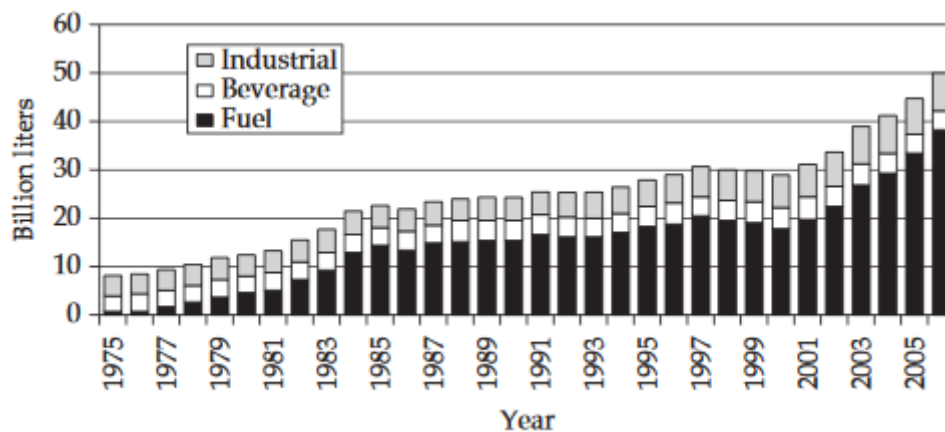
La otra tendencia para la producción de etanol, el etanol sintético, se lleva a cabo a partir de productos petroquímicos o relacionados con la industria petroquímica. Entre estos procesos están: la oxidación de metano a etanol, la hidratación de etileno a etanol y la producción a partir de gas de síntesis¹⁰⁰.

2.3.1 Usos del bioetanol

El uso principal del bioetanol es su utilización como combustibles, como un esfuerzo para evitar la dependencia de las economías de los países en el ámbito del transporte, la energía y la industria de factores externos, ya que como en el caso de la gasolina, el 42% de este combustible es importado o adquirido en el exterior⁷⁷, además mitigando los efectos del cambio climático por la generación de emisiones prácticamente nulas, comparado con otros combustibles de origen fósil⁷⁸.

Otro uso del bioetanol puede ser su uso como materia prima en la industria química cuyo uso puede justificarse por las mismas razones anteriores, ya que el 95 % de las materias primas utilizadas en la química orgánica provienen de fuentes no renovables⁷⁹. De esta forma, se puede utilizar este bioetanol para por ejemplo la producción de etileno, que acapara el 73 % de las materias primas usadas en la industria de los plásticos, o para su conversión directa a otros productos de alto valor añadido como puede ser el butanol, algunos productos aromáticos o el butadieno, como en el caso de este proyecto.

Los consumos de este etanol a lo largo del tiempo han tenido los siguientes usos:



Gráfica 2 - Usos industriales del etanol desde el año 1975⁸⁰

Como se observa en la Gráfica 2, y como se mencionó al inicio del apartado, el uso principal es su utilización como combustible, experimentando un gran incremento a lo largo del tiempo. También se observa un crecimiento en su uso industrial, aunque no tanto como el del caso anterior, ya que la industria para el uso de este producto como materia prima no está lo suficientemente consolidada ni madurada, de ahí que sean necesarios análisis como el del presente proyecto.

2.3.2 Mercado del bioetanol

Existe competencia entre Brasil y Estados Unidos por ser el principal productor de etanol del mundo. Hasta ahora, Brasil ha sido el mayor productor de etanol, pero las estadísticas de 2006 implican que Estados Unidos es el mayor productor de etanol con 19,1 GL, seguido de Brasil con 16,7 GL. Ambos países produjeron cantidades casi idénticas de etanol en 2005 (16,2 y 16,0 GL, respectivamente). Los continentes americanos produjeron el 72% de la producción mundial de etanol, seguidos por Asia, Europa, Oceanía y los continentes africanos.⁷⁸

Se prevé que en los próximos tiempos aumente esta demanda de forma exponencial. Las principales razones de este fuerte aumento en la producción y la demanda de etanol en el futuro podrían ser⁸⁰:

- Posible aumento de los precios del petróleo.
- Mayor demanda de combustibles líquidos.
- Escasez de crudo por el agotamiento de los yacimientos fósiles.
- Legislación ambiental en diferentes países para incentivar el uso de biocombustibles.
- Producción de materiales bioplásticos a partir de etanol u otros productos de origen petroquímico.

En los últimos años, el precio de este producto puede resumirse en la siguiente gráfica:



Gráfica 3- Precio del bioetanol (\$/gal) en los últimos años¹⁰⁶

Se puede observar una gran variación del coste debido a la gran variabilidad de la demanda, influenciado por los hechos anteriormente comentados.

2.3.3 Producción del bioetanol

En la producción industrial del bioetanol, se puede utilizar como entrada al proceso zumos con alto contenido en azúcares (como el de la uva, caña o remolacha), productos almidonados como distintos tipos de cereales, o a partir de celulosas vegetales.

En general, el proceso de producción del bioetanol a partir de cereal se puede resumir con el siguiente esquema (En caso de producción a partir de otra materia prima, la única diferencia en el esquema siguiente es la preparación de la materia prima):

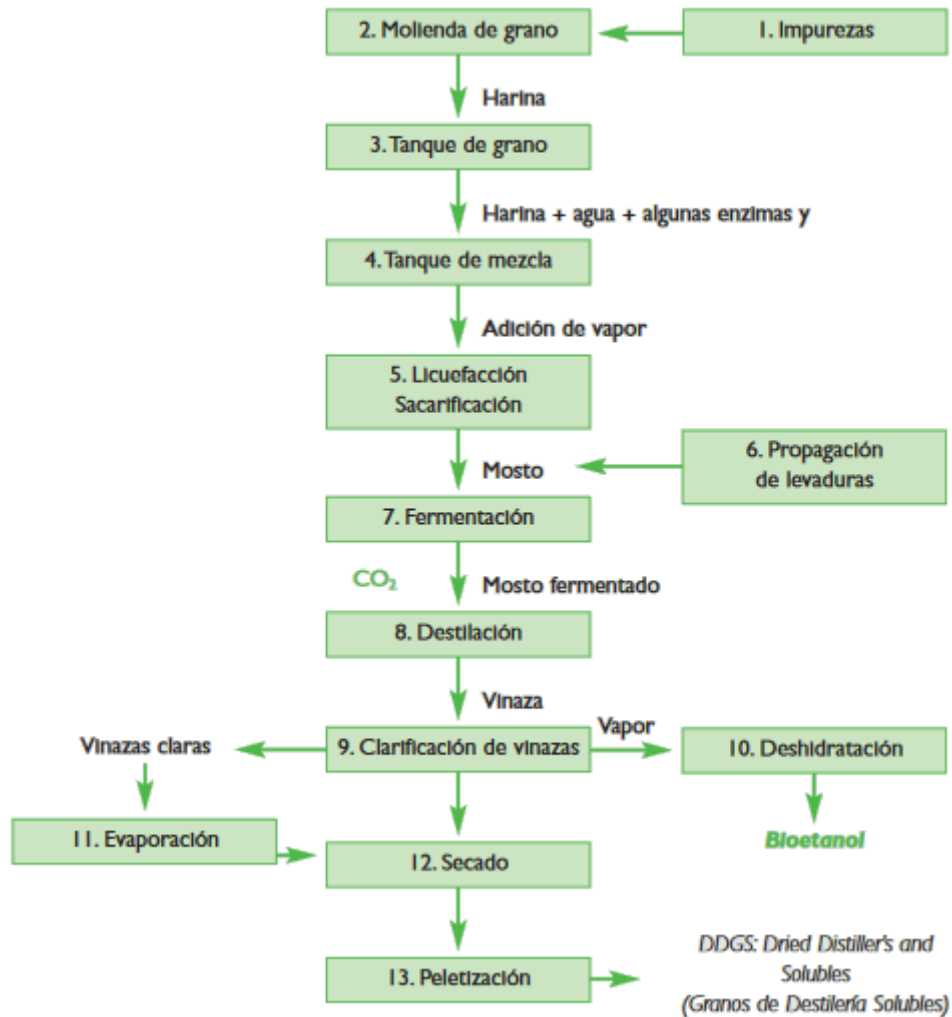


Figura 8 - Proceso de producción del bioetanol ⁸¹

El 40% del etanol producido en el mundo se obtiene a partir de cereales, con altas conversiones de aproximadamente el 95%. La materia prima utilizada suele variar respecto al área geográfica donde se encuentra la planta de producción de bioetanol influenciado por la abundancia del tipo de cultivo de sus alrededores, siendo en EEUU el maíz como la fuente principal (20,4 % de su producción global destinado a producción de bioetanol), la caña de azúcar en los países latinoamericanos (48,3%) y una mezcla de cereales y remolacha (1,2%) en el continente europeo.⁹⁹

3 ESTADO DEL ARTE

Para la producción de 1,3-Butadieno a partir de etanol, existen dos alternativas de procesos ya introducidos. En ambos casos, las reacciones se llevan a cabo de forma catalítica, por lo que a continuación el estado del arte se va a centrar en precisamente los catalizadores existentes para llevar a cabo estas reacciones.

Como ya también se comentó, estos procesos existen desde mediados del siglo XX, es por ello que existe una amplia gama de catalizadores investigados o incluso utilizados en plantas reales. Debido también a la antigüedad de los procesos y al bajo desarrollo en el desarrollo de nuevos catalizadores desde hace décadas (hasta los últimos tiempos), muchos de estos catalizadores presentan rendimientos y selectividades muy bajas³⁹ para lo que se esperaría en un proceso industrial moderno, mientras que, respecto a los estudiados más recientemente, cuya variedad es igualmente amplia⁴⁰, se consiguen en cada uno potenciar las características que debe tener un catalizador en un proceso, como puede ser, la alta conversión, selectividad y rendimiento o la baja generación de productos secundarios que dificulten el sistema de separación post-reacción.

También cabe destacar, que a mayor antigüedad de un catalizador, mejor conocidas serán sus características para poder utilizarlo en un proceso a gran escala.

A día de hoy no existen experiencias de utilización de etanol para la producción del butadieno, siendo la única ruta comercial la del craqueo de naftas. Esta vía de producción existe solo a nivel de investigación, por lo que se puede decir que aunque sea un proceso de producción ya desarrollado con anterioridad, como ya se mencionó, debido a la materia prima utilizada (que no depende de ningún recurso de origen fósil) ha sido nuevamente rescatada y se encuentra en fases tempranas de impulso para conseguir la competencia con la otra ruta actual de producción. Por ello existe una enorme lista de catalizadores, por lo que se hizo una selección de estos tomando como criterio aquellos que destacan por algún aspecto como puede ser su selectividad, que conllevará menos dificultad de separación, y más aprovechamiento de los reactivos, una alta conversión para evitar en la medida de lo posible recirculaciones de reactivos y generación de productos de reacción fáciles de separar o de alto valor añadido.

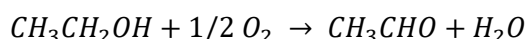
3.1 PROCESO DE DOS PASOS

En este proceso, se encuentran dos etapas en la producción del butadieno, la deshidrogenación de etanol realizado en reactores y condiciones diferentes.

El primer paso, de deshidrogenación para la conversión del etanol en acetaldehído, se puede llevar a cabo de dos formas, por la vía oxidativa, es decir, introduciendo junto con el etanol una cierta cantidad de oxígeno, y no oxidativa, dándose la reacción solo a partir del etanol.

3.1.1 Primer paso mediante via oxidativa

Esta primera vía consigue la conversión de etanol a acetaldehído mediante la oxidación parcial del primero, según la reacción:



Para esta primera vía de obtención del acetaldehído se encontraron los siguientes catalizadores disponibles:

Los siguientes datos presentados corresponden a las condiciones de operación de catalizadores como

la temperatura siendo en todos los casos la presión de operación igual a 1 atm. Con la WHSV, decir la velocidad espacial calculada por peso que determina la cantidad de catalizador utilizada en cada experimento. La fila fuente, indica el lugar donde se reportaron esos datos:

Tabla 5 – Catalizadores para la deshidrogenación oxidativa de etanol a acetaldehído.

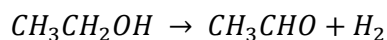
Tipo	Co (OMS-1)	V₂O₅/TiO₂(SiO₂)
Composición	-	2%/7% (97%)
Oxígeno (% v/v)	1%	0,80%
Temperatura (°C)	300	160
Velocidad espacial (mol_{ETANOL}/g_{CAT}·h)	0,11	0,00514
Conversión (%)	76,6	99,59
Acetaldehído	86,8	88,29
Selectividad (%)^a		
Acetal (CH₃CH(OCH₂CH₃)₂)	0	10,41
Dietiléter	0	1,3
CO₂	13,2	0
Conversión (%)^b	76,6	99,59
Rendimiento (%)	66,5	87,9
Fuente	41	42

^a: Definida como moles de producto producidos entre moles de etanol alimentados

^b: Definida como número de moles de etano reaccionados entre los moles de etanol introducidos

3.1.2 Primer paso mediante vía no oxidativa

Por otro lado, se encuentra la vía no oxidativa, donde también existe una gran variedad de catalizadores, pero a pesar de ello, la búsqueda se centró principalmente en catalizadores a partir de cobre, ya que estos son los que mejor rendimiento presentan siempre en este proceso⁴³. En este caso la reacción química es la siguiente:



Los siguientes datos presentados corresponden a las condiciones de operación de catalizadores como la temperatura siendo en todos los casos la presión de operación igual a 1 atm. Con la WHSV, decir la velocidad espacial calculada por peso que determina la cantidad de catalizador utilizada en cada experimento. La fila fuente, indica el lugar donde se reportaron esos datos:

Tabla 6 – Catalizadores para la deshidrogenación no oxidativa de etanol a acetaldehído

Tipo	Zn(β -Zeolita)	Zn(β -Zeolita)	Cu(MC)	Cu(ZnAlO ₃)
Composición (%) ^b	5%	5%	10%	30%
Temperatura (°C)	350	350	260	350
WHSV (1/h)	1,3	1,3	2,4	10000 ^a
1,3-BD	33	1	0	0
Etileno	14	44	0	0
Propileno	11	2	0	0
Acetaldehído	33	44	95,1	95,3
Selectividad al carbono (%)	Butanona	0	0	0,7
	Acetona	0	0	0,7
	Dietiléter	4	8	0
	Acetato de etilo	0	0	1,7
	Butanal	0	0	0
	Crotonaldehído	5	1	0
	Otros	0	0	1,8
	Conversión (%)	81	93	83
Rendimiento (%)	26,73	40,92	79	89,3
Fuente	44	44	45	46

^a: GHSV

^b: % referido a su óxido metálico

3.1.3 Segundo paso

Aquí la transformación se produce, una vez producido el acetaldehído, desde éste y con etanol a butadieno según la reacción:



Para el segundo paso del proceso de producción de butadieno, los catalizadores en fase de investigación encontrados en bibliografía fueron los siguientes:

Los siguientes datos presentados corresponden a las condiciones de operación de catalizadores como la temperatura siendo en todos los casos la presión de operación igual a 1 atm. Con la WHSV, decir la velocidad espacial calculada por peso que determina la cantidad de catalizador utilizada en cada experimento. La fila fuente, indica el lugar donde se reportaron esos datos:

Tabla 7 – Catalizadores para la producción de BD a partir de etanol y acetaldehído

Tipo	Ta (SBA-15)	ZrO2 (SiO ₂)	ZrO2 (Nano.SiO ₂)	MgO (SiO ₂)	Y (SiO ₂)	Ta (SiBEA)
Composición	2%	2%	2%	1:1.	5%	3%
Ratio Et/Ac (molar)	1,5:1	3,5:1	3,5:1	2,9:1	2,9:1	2,2:1
Temperatura (°C)	350	320	320	350	320	325
WHSV (1/h)^a	1	1,8	1,8	0,36	0,6	0,8
1,3-BD	79,8	69,7	91,43	75,9	81	90,3
Etileno	4,5	16	2,26	3,2	2,8	0,3
Propileno	1,8	2	0,48	2,6	1,4	0
Acetaldehído	0	0	0	0	0	0
Butenos	2	0,9	0	2,9	0	0
Selectividad al carbono al carbono (%)^b						
1-Butanol	0	0,5	0,73	9,2	10,5	0
Acetato de Etilo	1,1	0,8	0,51	0	0	0
Crotonaldehído	1	0	0	0	0	4,7
Ácido acético	0,2		0	0	0	0
Dietiléter	4	8,2	3	1,7	1,7	0,1
Acetona	0,2	0	0	0	0	0
Otros	5,8	2,2	1,6	4,5	0,5	4,6
Conversión global (%)	46,9	45,4	52,39	31,5	31,4	30,7
Rendimiento (%)	37,43	31,64	47,9	23,91	25,434	27,7
Fuente	47	48	49	50	50	51

^a: referido solo al caudal másico de etanol introducido

^b: Moles de etanol más acetaldehído reaccionados entre los introducidos

3.1.4 Selección de catalizadores de procesos de dos pasos

Una vez mostrados los principales catalizadores con mejores características para estos procesos de obtención de acetaldehído, para este paso se decidió elegir la vía no oxidativa, ya que aunque como se observa en las tablas en la oxidativa se obtienen buenas conversiones y selectividades con producciones bajas de subproductos, el oxígeno introducido, es normal que se introduzca a partir de aire, el cual tiene un alto porcentaje de gas nitrógeno inerte, y como en este paso, también se produce hidrógeno, que es un gas de alto valor añadido. Sería necesario separar este nitrógeno del hidrógeno para su comercialización, siendo ambos gases ligeros con puntos de ebullición muy bajos, y por lo tanto difíciles de separar. Además, la vía no oxidativa genera hidrógeno, que es un subproducto de alto valor añadido.

Dicho esto, una vez elegida la vía de obtención del acetaldehído, entre los catalizadores disponibles para la vía no oxidativa, se eligió el Cu/MC (cobre soportado por carbones mesoporosos), debido a su elevado rendimiento (así como conversión y selectividad), y su producción de productos secundarios fáciles de separar. Para este catalizador, podría ser igualmente interesante el de

Cu/ZnAlO₃ por tener características similares, o incluso mejores, pero se eligió el primero porque para su funcionamiento requiere de condiciones de temperaturas mucho menos severas.

En este primer paso, solo se analizará el catalizador anteriormente elegido, puesto que es un proceso industrial bien conocido y utilizado, y no necesita de un análisis de comparación económico o ambiental que respalden el uso de uno u otro, puesto que ya se sabe que es un proceso viable en todos los sentidos.

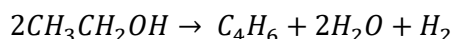
Para el segundo paso de deshidratación del etanol y el acetaldehído a butadieno, se eligió el catalizador de Ta (SBA)-15 (Catalizador de óxido de tantalio sobre soporte de zeolítico).

La motivación para ello es que a pesar de no tener el rendimiento más alto, tiene una buena selectividad, y principalmente, porque es un catalizador que estudios muy recientes, consiguen reproducir los resultados hallados en la bibliografía, que a priori da mayor credibilidad a los datos reportados.

En contrapunto, está el catalizador de ZnO₂ en base de nano sílice, que promete la selectividad más alta encontrada pero que sus resultados no se encuentran del todo probados, por lo que hace interesante su análisis y comparación con el anterior.

3.2 PROCESO DE UN PASO

En este caso, la transformación se da directamente desde etanol a butadieno apartir de la siguiente reacción:



Para el proceso Levedeb o de un paso, también existe una gran cantidad de catalizadores descritos en literatura, y por lo general, más estudiados en los últimos tiempos, por ser el proceso para la producción de bioetanol en principio más prometedor en el aspecto económico y ambiental⁵².

Los siguientes datos presentados corresponden a las condiciones de operación de catalizadores como la temperatura siendo en todos los casos la presión de operación igual a 1 atm. Con la WHSV, decir la velocidad espacial calculada por peso que determina la cantidad de catalizador utilizada en cada experimento. La fila fuente, indica el lugar donde se reportaron esos datos:

Dicho esto, los catalizadores más interesantes de los encontrados son los siguientes:

Tabla 8 – Catalizadores para la producción de BD a partir de etanol en un paso

Tipo	Zn:Zr (MgO:SiO ₂)	Cu:Hf:Zn	Hf:Zn	Mg:Al	Hf:Zn	Ag:Zr (BEA)	Zn:Y	
Composición	85:15	1:3:0,5	2,5:16	40:60	3:9,3	1%:1%	2%:8%	
T (°C)	325	360	360	400	380	320	350	
WHSV (1/h)	0,3	0,21	0,64	1,8	1,12	0,32	0,3	
Selectividad al carbono (%)	1,3-BD	62,6	72	71	15,63	50,04	55,6	75
	Etileno	15,2	7,9	5,8	40,17	10,26	1,5	17
	Propileno	2,7	3,4	3,6	0	0	3,9	8
	Acetaldehído	5,9	2,6	4	6,31	15,85	0	0
	Butenos	6,7	6,4	3,8	0,52	5,43	8,7	0
	Butanoles	6,5	0,28	0,42	9	3,8	0,3	0
	Dietiléter	0	1	0,7	26,97	1,54	5,6	0
	Butanal	0	0,21	2,5	0	3,8	0	0
	Acetona	0,5	0	0	0	3,8	0	0
	Otros	0	6,4	8,1	1,4	5,41	24	0
Conversión (%)	40	99	99,2	49	97,65	47,9	100	
Rendimiento (%)	25,04	71,6	70,2	7,7	49,43	26,63	75	
Fuente	53	54	54	55	56	57	58	

3.2.1 Selección de catalizadores de procesos de un paso

De los catalizadores estudiados, se observa claramente que hay uno que destaca con creces frente a los otros, como es el de Zinc e Itrio, consiguiendo tanto la selectividad como la conversión más altas de la tabla.

Frente al catalizador anterior, está el catalizador de Hf:Zn, que no aporta resultados tan prometedores pero sí se puede decir también que reales, puesto que como se observa en la tabla se han realizado dos experimentaciones independientes diferentes, uno encontrado en bibliografía⁵⁴ y otro por el Departamento de Ingeniería Química y Ambiental de la Universidad de Sevilla¹, y por lo tanto, vuelve a ser de gran interés su comparación para esta ruta de producción de butadieno.

A partir de los catalizadores seleccionados anteriormente, se pretende realizar una comparación entre resultados más realistas y catalizadores con resultados menos fiables, de forma que se consiga determinar, si resultará interesante en un futuro, nuevas experimentaciones para el contraste de estos catalizadores más prometedores, pero menos estudiados hasta la fecha.

3.3 CARACTERÍSTICAS DE LOS CATALIZADORES SELECCIONADOS

Como resumen de lo anterior, las características de los catalizadores seleccionados y a partir de los cuales se desarrollará el presente proyecto son las siguientes. No se muestran la generación de subproductos, para ello ver las tablas 6, 7 y 8 en las columnas correspondientes de cada catalizador:

Tabla 9 – Resumen de las características de los catalizadores seleccionados

Tipo	Cu (MC)	Ta₂O₃ (SBA-15)	ZrO₂ (NanoSiO₂)	Hf:Zn	Y:Zn
Proceso	2 paso (1 ^{er} paso)	2 pasos (2 ^o paso)	2 pasos (2 ^o paso)	1 paso	1 paso
Composición (%)	10%	2%	2%	2,5:16	2%, 8%
Ratio Et/Ac (molar)	-	1,5:1	3,5:1	-	-
Temperatura (°C)	260	350	320	360	350
WHSV (1/h)	2,4	1	1,8	0,64	0,3
Conversión (%)	83	46,9	52,39	99,2	100
Selectividad al Carbono (%)	78,9	79,8	91,43	71	75
Rendimiento (%)	79	37,43	47,9	70,2	75
Fuente	45	47	49	52	58

3.4 FABRICACIÓN Y COSTE DE LOS CATALIZADORES SELECCIONADOS

En este apartado, se analizará el procedimiento de obtención de cada catalizador proporcionado en la bibliografía expuesta anteriormente.

Esto es importante puesto que la preparación de cada catalizador, dependiendo de cuál sea su procedimiento para la obtención, tendrá repercusiones directas tanto en el aspecto económico, ya que este proceso determinará su precio, y en el ámbito ambiental, los cuales son objeto de análisis del presente trabajo.

El primer paso es determinar los materiales y procesos, así como las emisiones de estos, necesarios para la fabricación de cada catalizador extraído de la bibliografía. El requerimiento de cada material para cada caso por kg de catalizador se obtendrá a partir del balance de materia incluido en el Anexo II.

Por otro lado, como se trata de catalizadores de nuevo desarrollo, no existe un mercado de estos y por lo tanto es imposible buscar un precio de venta de estos. Por lo tanto, será necesaria su estimación mediante un método encontrado en la bibliografía⁶² desarrollado en el Anexo I.

Por lo tanto, de los cálculos mencionados anteriormente, respecto a los materiales y a las emisiones de los procesos de fabricación, se obtiene:

Tabla 10 –Balance de materia del proceso de producción del catalizador de Cu/MC

MATERIALES			EMISIONES
MC (g)	Cu(NO₃)₂·3H₂O (g)	H₂ (g)	Agua evaporada (g)
0,7047	0,3803	8,457	0,085 ^a

Tabla 11 –Balance de materia del proceso de producción del catalizador de Ta₂O₃/SBA-15

MATERIALES			EMISIONES
SBA-15 (g)	TaCl ₅ (g)	Etanol (mL)	Etanol Evaporado ^a (mL)
0,965	0,035	10,93	10,93

Tabla 12 –Balance de materia del proceso de producción del catalizador de ZrO₂/NanoSiO₂

MATERIALES				EMISIONES	
NanoSiO ₂ (g)	ZrOCl ₂ ·8H ₂ O (g)	Agua DI (mL)	Urea (g)	Agua Residual ^a (g)	Agua Evaporada (g)
0,8953	0,1047	18,91	0,001951	18,912	0,04683

Tabla 13 –Balance de materia del proceso de producción del catalizador de Hf:Zn/SiO₂

MATERIALES						EMISIONES
Car-O-Sil M5 (g)	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (g)	HfCl ₄ (g)	SiO ₂ (g)	Na ₂ O (g)	Agua DI (mL)	Agua Evaporada (g)
0,3869	0,7311	0,04483	0,0739	0,0292	8,807	9,073

Tabla 14 –Balance de materia del proceso de producción del catalizador de Zn:Y/β-Zeolita

MATERIALES					EMISIONES	
β-Zeolita (g)	Y(NO ₃) ₃ ·6H ₂ O (g)	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (g)	Nítrico (60 %) (mL)	Agua DI (mL)	Agua Residual (mL) ^a	Agua Evaporada (g)
0,7091	0,3335	0,08769	0,3546 (mL)	0,7091	1,064	0,1303

Por otro lado, aplicando el método ya mencionado calculado en el Anexo I, el coste de cada catalizador es:

Tabla 15 – Coste estimado de los catalizadores

	CATALIZADOR				
	Cu/MC	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
Precio (\$/kg)	116,98	95,48	16,46	7,32	11,43

4 DISEÑO DE LOS PROCESOS

4.1 BASES DE DISEÑO

Previo a la realización del diseño de las plantas, es necesario establecer una serie de datos de cierta libertad de elección comunes para los 4 procesos a diseñar.

Algunos de estos datos de las plantas son los siguientes:

- Se establecerá como base de cálculo el consumo de materia prima, que en todos los casos es Etanol. La cantidad que deberán procesar las plantas será de 50.000 m³/año (exentos de agua) en su concentración azeotrópica (95 % v/v)
- Las concentraciones de venta de los productos principales, 1,3-Butadieno e Hidrógeno, serán de 99% y 95% molar respectivamente y superando el 99% molar para otros posibles subproductos generados para su venta en los procesos.
- El tiempo de operación anual, tendrá un valor típico de 8000 h/año y las plantas serán proyectadas para una vida útil de 15 años.
- Las condiciones del exterior de las plantas (desde donde se provienen, por ejemplo, la materia prima) serán de 20°C de temperatura y una presión de 1 atm.
- Los datos necesarios cambiantes en el tiempo, como pueden ser, el precio de los productos y reactivos, serán los correspondientes a la fecha de Noviembre de 2019.
- Se procederá al diseño de una planta auxiliar a los procesos principales para la generación de vapor en aquellas plantas donde se decida el aprovechamiento térmico de corrientes de subproducto de bajo valor económico.

4.2 AJUSTE TERMODINÁMICO DEL PROCESO

Para la simulación en software que se realizará posteriormente para el modelado de las diferentes plantas para la producción de butadieno, el primer paso es el ajuste termodinámico.

Esto es, intentar predecir a partir de modelos termodinámicos el comportamiento de los compuestos y sus interacciones entre ellos, por lo que resulta ser un paso primordial que determinará el parecido de la simulación con la realidad.

Estos modelos son capaces de predecir el comportamiento de un grupo de compuestos a partir del comportamiento entre cada par presente en la mezcla a partir de los parámetros de interacción binaria (BIP). Por lo tanto, existirán más BIP cuantos más compuestos presentes existan. El número necesario de estos se pueden calcular como:

$$n_{BIP}^{\circ} = \left(\sum_{n=1}^c n \right) - C$$

Donde:

- n_{BIP}° : Número de parámetros de interacción binaria
- C : Número de compuestos presentes.

En los casos que se estudiar, este número de compuestos en algunos casos asciende hasta los 16, debido a la variedad de subproductos generados en la reacción, aplicando la fórmula anterior, el

número de BIP necesarios sería de 120.

Por ello, la búsqueda y cálculo de todos estos BIP sería un trabajo casi imposible, no solo por la cantidad de estos sino porque también sería difícil encontrar estos parámetros para pares de compuestos menos comunes en la industria química como podría ser el Crotonaldehído, la Metil Etil Cetona, etc.

Una forma de resolver este problema es agrupar estos compuestos en función de su relevancia en las plantas, determinándose esta por su función o por su mayor presencia en el proceso.

Se le podrá dar una relevancia Alta a los reactivos y productos como son: el etanol, acetaldehído (para las plantas de dos pasos), agua e hidrógeno, y relevancia Baja al resto de subproductos.

Por ello, en las plantas existirán pares de compuestos, y por tanto de BIPs, de relevancia Alta-Alta (por ejemplo: Etanol-Agua), de relevancia Alta-Baja (por ejemplo: Etanol-Acetona) y de relevancia Baja-Baja (Acetato de Etilo-Butanol).

Una vez agrupados, solo se mostrarán aquellos BIP de relevancias Alta-Alta y Alta-Baja. Consiguiendo así pasar de 120 BIP para una planta de 16 compuestos, a 41 y manteniendo una buena aproximación a la realidad, ya que los compuestos de relevancia baja estarán en muy pequeña cantidad respecto a los otros, y por lo tanto los pares de relevancia baja-baja no jugarán prácticamente ningún papel en la termodinámica del proceso.

Aquí, se adjunta la Tabla 16, donde se encuentran algunas propiedades termodinámicas de todos los compuestos puros a estudiar como los parámetros de la Ley de Antoine para el cálculo de la presión de vapor que siguen la siguiente expresión:

$$\log[P_i^o(\text{bar})] = A - \frac{B}{C + T(^{\circ}\text{C})}$$

También están representados en la tabla la denominación de cada compuesto que se utilizará posteriormente con su número CAS para una identificación inequívoca del compuesto, así como también su punto crítico.

Tabla 16 –Algunas propiedades termodinámicas de los compuestos puros a estudiar

Compuesto	Denominación	Nº CAS	Punto Crítico ⁶⁶		Ley de Antoine ⁶⁷		
			T _C (°C)	P _C (bar)	A	B	C
Etanol	ETANOL	64-17-5	243,1 ⁶³	63,84 ⁶³	5,260	1662,48	238,131
Acetaldehído	ACETALDE	75-07-0	181,5 ⁶⁵	64 ⁶⁵	4,380	1110,4	233,451
1,3-Butadieno	13-BD	106-99-0	161,8 ⁶⁴	43,15 ⁶⁴	4,147	998,751	245,563
Hidrógeno	H2	12385-74-0	239,9 ⁶⁴	12,97 ⁶⁴	3,543	99,395	280,726
Agua	AGUA	7732-18-5	374,2 ⁶⁴	220,8 ⁶⁴	5,083	1663,125	227,378
Acetona	ACETONA	67-64-1	235	47	4,439	1315,67	240,479
Acetato de Etilo	ACETATO	141-78-6	250,6	38,8	4,384	1338,46	228,608
Crotonaldehído	CROTONAL	123-73-9	253,2	45,9	4,407	1460,08	227,652
Dietiléter	DEE	60-29-7	192,7	36,06	4,470	1354,913	267,463
n-Butanol	BUTANOL	71-36-3	289,9	44,1	4,342	1317,94	229,115
1-Buteno	1-BUTENO	106-98-9	146,6 ⁶⁴	40,2 ⁶⁴	4,159	1013,94	250,292
2-Buteno	2-BUTENO	107-01-7	155,5 ⁶⁴	41,04 ⁶⁴	4,152	1028,06	244,234
Ácido Acético	PESADOS	64-19-7	318,6	57,9	4,940	1800,03	246,894
Etileno	ETILENO	74-85-1	9,2	50,6	4,091	649,806	262,73
Propileno	PROPILENO	115-07-1	91,75	45,9	4,142	860,992	255,895
Metil Etil Cetona	BUTANONA	78-93-3	263,6	41,8	4,419	1400,37	237,655

4.2.1 Modelado del equilibrio líquido-vapor.

Para el modelado del equilibrio líquido vapor (VLE) se optó por la elección del método termodinámico NRTL, acorde con el método de selección propuesto por Eric C. Carlson, 1996, puesto que se trata de procesos en los que existen compuestos polares (sobre todo agua y etanol), no electrolítico, y con una presión⁶⁸ siempre menor a 10 bar. Además, este método de coeficientes de actividad elegido es acorde con otros trabajos para el estudio de la producción de 1,3-Butadieno⁶⁹. Siguiendo el algoritmo de selección del método termodinámico anterior, para la separación de gases ligeros se optó por el uso de método de ecuación de estado de SRK.

Los BIP que se utilizaros para este método termodinámico fueron obtenidos de diversas fuentes, de la base de datos de NIST integrada en el software ASPEN Plus, obtenidos directamente de bibliografía, a partir de datos termodinámicos de la literatura y posteriormente tratados mediante regresión con el mismo software ASPEN o en última instancia supuestos o estimados. Estos se muestran en el Anexo IV.

4.2.1.1 Método NRTL

Para el método termodinámico NRTL, Aspen introduce los siguientes parámetros para el cálculo del coeficiente de actividad:

$$G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} \cdot \tau_{ij})$$

$$\frac{\Delta g_{ij}}{RT} = \tau_{ij} = A_{ij} + \frac{B_{ij}}{T} + E_{ij} \cdot \ln T + F_{ij} \cdot T$$

$$\alpha_{ij} = C_{ij} + D_{ij}(T - 273,15)$$

Los BIP de todos los pares de todos los compuestos producidos por los catalizadores elegidos, así como sus reactivos, modelados por VLE para el formato del método termodinámico de ASPEN descrito anteriormente vienen expresados en el Anexo IV:

4.2.1.2 Método Soave-Redlich-Kwong (SRK)

Por otra parte, en la planta de un paso del catalizador de Y:Zn, se realiza una separación de gases ligeros entre etileno, propileno y butadieno en gran parte de la planta.

Debido a que se trata de hidrocarburos apolares que además se encuentran a presión en la planta, no es correcto utilizar un método de coeficiente de actividad como el NRTL de los casos anteriores⁸². Por ello, se eligió para la zona de separación de esos gases de estado la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK), para el resto de la planta se utilizó el método anterior NRTL con sus mismos componentes de Henry presentados en el siguiente apartado.

El formato de los BIP presentados es el siguiente respecto a los parámetros del método:

$$k_{ij} = k_{ij}^A + k_{ij}^B \cdot T + \frac{k_{ij}^C}{T}$$

$$a_0 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij})$$

Donde a_0 es el término de mezcla cuadrático estándar.

Los BIP de este método se encuentran presentados en el Anexo IV.

4.2.1.3 Método de Wilson

Para el modelado de la destilación extractiva con DMF (utilizada en algunos procesos y explicada en los apartados 4.6.1.1 y 4.6.2.1) se utilizó el método termodinámico de Wilson. En este caso, al tratarse de otro método de coeficientes de actividad, esta destilación podría haber sido modelada por el método NRTL, explicado anteriormente, pero se utilizó este para que los datos fueran acordes con la bibliografía encontrada. Se presentarán los BIP del método de los compuestos con el DMF, ya que este es el compuesto principal en los equipos de destilación.

Los datos presentados de parámetros de interacción, siguen la siguiente forma con respecto al método de Wilson:

$$\ln \Lambda_{ij} = a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T}$$

A partir de donde se calculan los coeficientes de actividad como:

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left(\sum_j \Lambda_{ij} x_j \right) - \sum_j \frac{\Lambda_{ji} x_j}{\sum_k \Lambda_{jk} x_k}$$

Siendo estos parámetros de interacción binaria los presentados en el Anexo IV.

4.2.2 Modelado de solubilidad de gases.

En las plantas a estudiar, existirán una serie de compuestos que se encontrarán por encima de sus puntos críticos, es por ello que no pondrán modelarse a partir del equilibrio líquido vapor.

Por esta razón, estos compuestos serán modelados a partir de la ley de Henry. Como se observa en la Tabla 16, estos compuestos serán el Hidrógeno (de prioridad alta), el etileno y el propileno (prioridad baja).

Esta ley de Henry será modelada a partir de una serie de parámetros en la forma que proporciona el simulador ASPEN que es la siguiente:

$$\ln \left(\frac{H_i}{\gamma_i^\infty} \right) = \sum_A w_A \ln \left(\frac{H_i}{\gamma_i^\infty} \right)$$

$$w_A = \frac{x_A (V_{cA})^{2/3}}{\sum_B x_B (V_{cB})^{2/3}}$$

$$\ln H_{iA}(T, P_i^o) = a_{iA} + \frac{b_{iA}}{T} + c_{iA} \cdot \ln T + d_{iA} \cdot T + \frac{e_{iA}}{T^2}$$

En este caso, se representarán solo los pares de compuestos de Henry con prioridad Alta-Alta con el hidrógeno y Alta-Baja para el etileno y el propileno, ya que por ejemplo en el caso del hidrogeno, el par, hidrógeno-Butanol, a pesar de ser un par de Alta-Baja, no tendría sentido representarlo puesto que al ser el Butanol un subproducto se encuentra en cantidades muy bajas y su capacidad de disolución del hidrógeno será prácticamente despreciable.

Por otro lado, no se mostrarán los parámetros de los pares de estos compuestos de Henry con el 1,3-Butadieno porque no se encontraron datos para determinarlos, igualmente no existe un gran problema para esto, ya que en casi ningún punto las plantas estudiadas, no existirá 1,3-Butadieno en estado líquido, y por lo tanto esta ley no aplica.

Estos parámetros son los presentados en el Anexo IV.

4.2.3 Obtención de parámetros estimados

En este apartado se analizarán las estimaciones de datos que ha sido necesario llevar a cabo de los parámetros de los modelos anteriormente presentados.

En todos los casos anteriores, siempre es preferible utilizar una base de datos de la fuente que sea para la determinación de los parámetros, pero en algunos casos esto se hace imposible por la poca información existente de los compuestos, como es el caso del 1,3-Butadieno, que a pesar de ser el producto principal, sufre de una gran escasez de datos termodinámicos en la literatura.

4.2.3.1 Estimación de parámetros del equilibrio líquido-vapor.

El principal par de compuestos que es necesario estimar de forma correcta debido a la ausencia de datos termodinámicos por ser un par de alta-alta prioridad es el del 1,3-Butadieno y etanol.

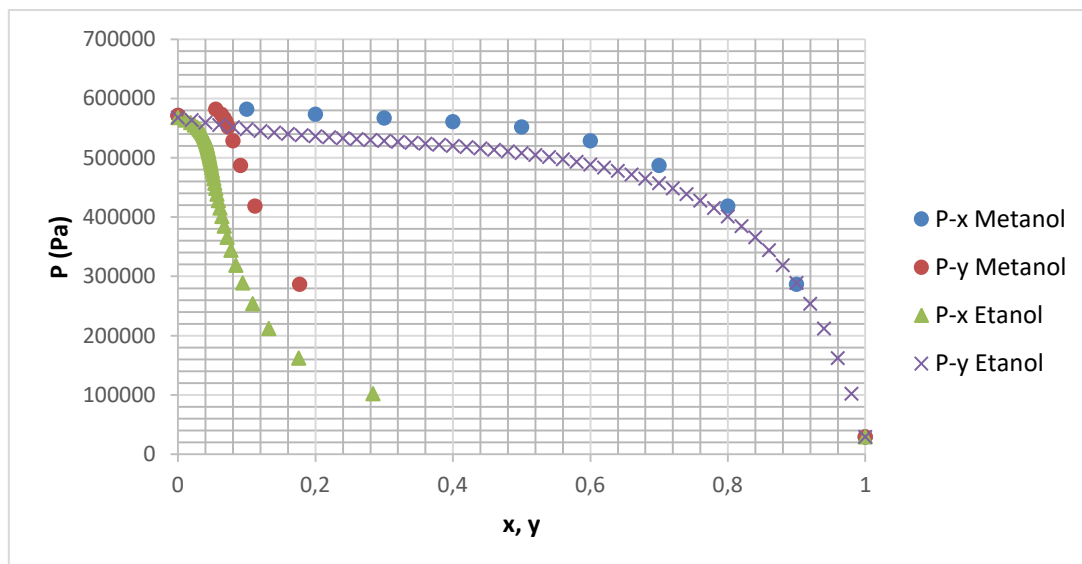
A pesar de no encontrarse datos para este par, si se encontró en cambio para el par metanol-butadieno de la Tabla 17. A pesar de no tratarse del mismo par, el etanol y el metanol son dos compuestos de la misma familia, además tienen pesos moleculares (46 y 32 g/mol), densidades (789 y 792 kg/m³) y puntos de ebullición normal parecidos (78 y 64,7 °C), por lo que podrán dar una buena aproximación.

Estos datos de equilibrio son los siguientes:

Tabla 17 – Datos de equilibrio del par metanol-1,3-butadieno (NIST Aspen)

Frac. Molar Vapor METANOL	Temperatura (K)	Frac. Molar Vapor METANOL	Presión total (N/m ²)
0	323,137055	0	571690
0,1	323,137055	0,055	582220
0,2	323,137055	0,063	573690
0,3	323,137055	0,067	567290
0,4	323,137055	0,07	561150
0,5	323,137055	0,073	552220
0,6	323,137055	0,08	528890
0,7	323,137055	0,091	487290
0,8	323,137055	0,112	418770
0,9	323,137055	0,177	286910
1	323,137055	1	55330

Para mejorar la suposición de los datos de equilibrio, en la regresión para obtener la curva de equilibrio del etanol-butadieno, se cambió el último punto de la tabla anterior por la presión de vapor que corresponde al etanol a 50 °C (323,14 K), la cual es de 30886 N/m². Por lo que finalmente se obtuvo la siguiente gráfica:



Gráfica 4- Determinación curva P-xy del Etanol-1,3BD a partir de la de Metanol

Se observa que se consigue una aproximación adecuada a partir de la regresión de los datos del metanol con el método termodinámico NRTL, con una curva en el caso del etanol ligeramente desplazada hacia abajo con respecto a la de etanol como cabría esperar en este caso, al tratarse de un gráfico P-xy donde el etanol es menos volátil que el Metanol. Los parámetros obtenidos de la regresión son los presentados en la Tabla 17 cuyos resultados pueden encontrarse en el Anexo III.

Otra suposición relacionada con el VLE es la referida al butanal, cuyos valores no se encontraron tampoco de ninguna forma para el caso del acetaldehído y el 1,3-butadieno. Debido a esto, se tuvo que recurrir a la extrapolación de los mismos resultados de los BIP de NRTL entre estos dos compuestos y el crotonaldehído, que en este caso si se encontraron datos. Esto es, no solo porque son compuestos parecidos en las propiedades descritas anteriormente para el etanol y el metanol, sino también porque la morfología de su molécula es muy parecida como se observa en la Figura 9.

Por todo ello, los BIP para estos dos pares con el butanal, se podrán suponer iguales a los de sus pares con el crotonaldehído.

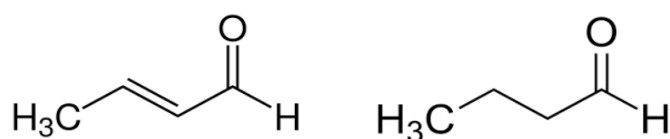


Figura 9 - Moléculas de Crotonaldehído (Izquierda) y Butanal (Derecha)

El resto de BIP perdidos para el modelado del VLE, como último recurso, se usó un método que proporciona el mismo software que es una estimación a partir de otros métodos como el UNIQUAC (Presentados en la tabla de BIP de NRTL como: "Estimación Aspen"). Los resultados de estos no se pueden esperar del todo fiables, pero por otro lado, no afecta a ningún par de Alta-Alta prioridad, con lo cual, no afectará mucho a los resultados su uso, en ausencia de otros métodos de determinar los BIP de esos pares.

4.2.3.2 Estimación de parámetros de ley de Henry.

Para este caso, como el número de parámetros era mucho más reducido, se consiguieron hallar casi todos, y además con un mucho mejor ajuste, como se observa en la sección de estos parámetros en el

Anexo IV.

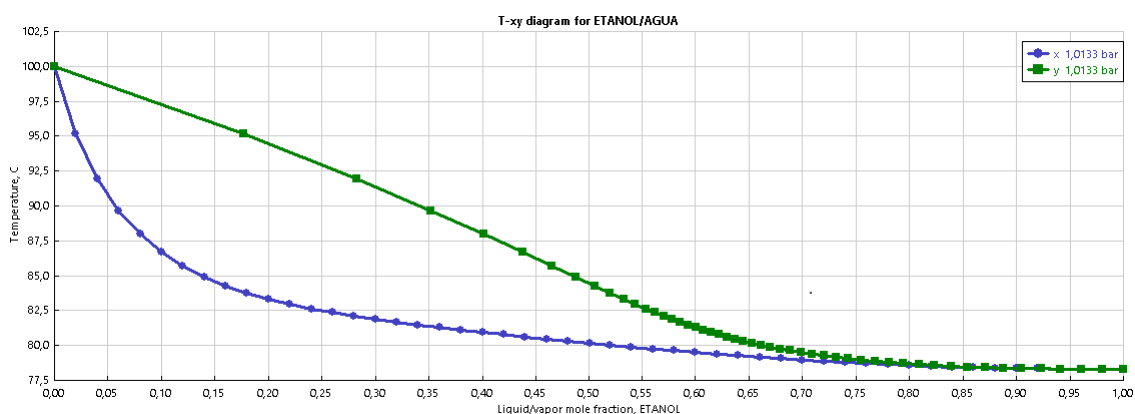
Los únicos que no se encontraron fueron los parámetros de los pares de acetaldehído con propileno y acetaldehído etileno.

Por otro lado, sí se encontró en la base de datos de NIST de Aspen los pares de acetona tanto con propileno como con etileno. Por ello, tras hacer regresión de estos datos con la ley de Henry descrita anteriormente, se adoptaron como iguales los parámetros obtenidos de estos dos pares con los de acetaldehído-propileno y acetaldehído-etileno.

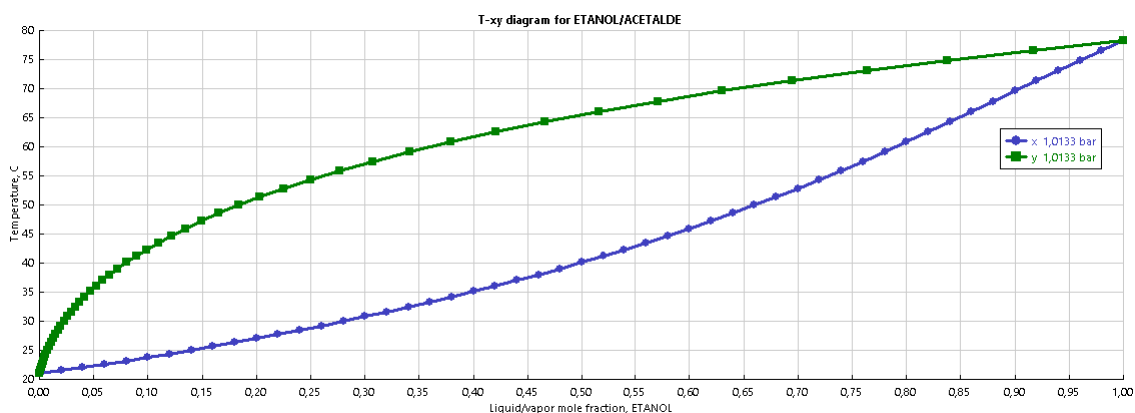
Se puede decir, que esto es una buena aproximación debido a que la acetona y el acetaldehído no solo tienen parecido en propiedades como su densidad (788 y 784 kg/m^3), su peso molecular (44 y 58 g/mol) y su punto de ebullición (20 y $56 \text{ }^\circ\text{C}$), sino que también, y más importante si cabe en el sentido de la solubilidad (que es lo que modela esta ley), un gran parecido en su momento dipolar ($2,7$ Y $2,91 \text{ D}$).

4.2.4 Representación del equilibrio líquido-vapor de los pares de prioridad alta-alta.

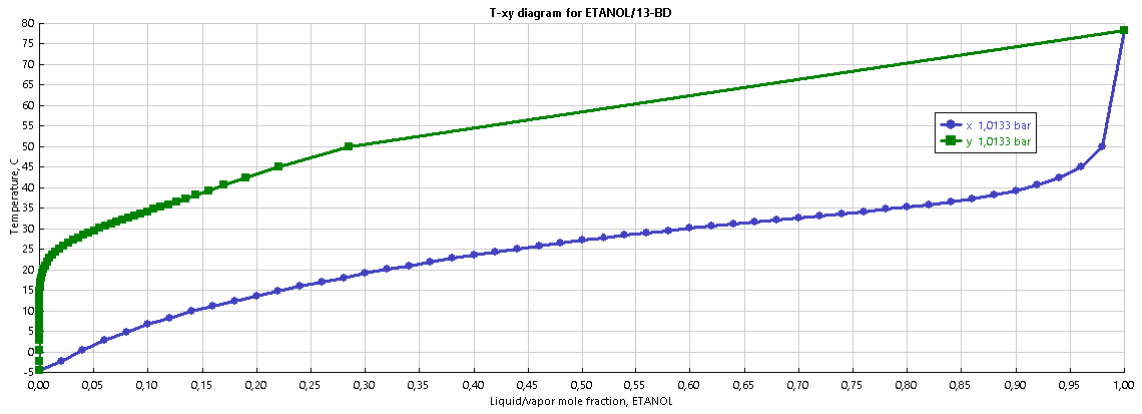
En este apartado, se representarán los diagramas de equilibrio T-xy a 1 atm de los compuestos de pares de prioridad alta-alta para dilucidar la bondad del ajuste termodinámico, o en su caso de de las suposiciones.



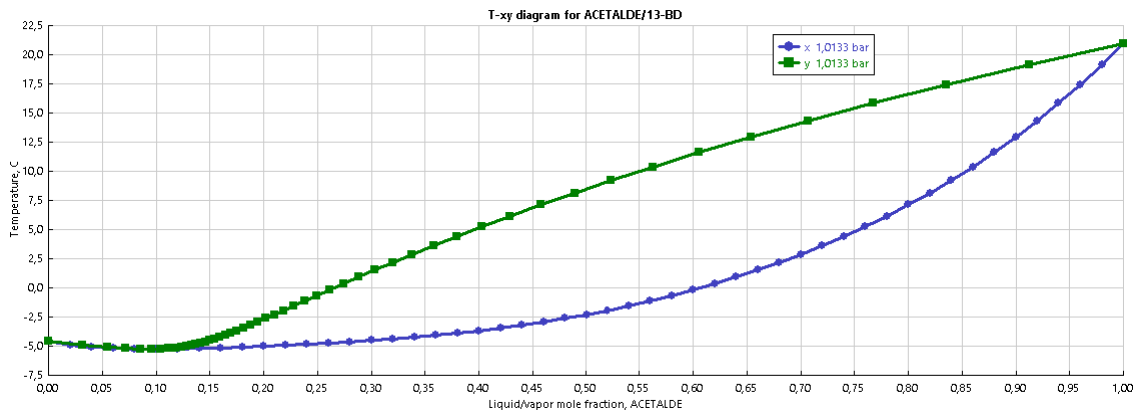
Gráfica 5 - Diagrama T-xy del par Etanol-Agua



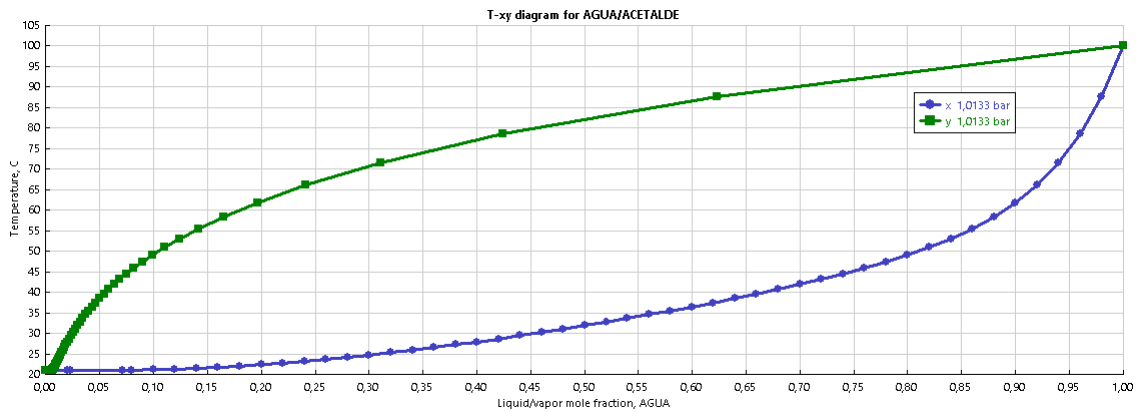
Gráfica 6 - Diagrama T-xy del par Etanol-Acetaldehído



Gráfica 7 - Diagrama T-xy del par Etanol-1,3-Butadieno



Gráfica 8 - Diagrama T-xy del par Acetaldehído-1,3-Butadieno



Gráfica 9 - Diagrama T-xy del par Acetaldehído-Agua

4.3 DISEÑO CONCEPTUAL DE LOS PROCESOS

En este apartado se explicará de forma cualitativa el sentido del diseño elegido para cada proceso, a fin de entender la lógica que se siguió para el desarrollo de cada una de las cuatro plantas químicas diferentes que se estudiarán, sin aportar aún valores exactos de diseño de estas y obviando la integración energética de las corrientes. Esto último será objeto del Apartado 4.6.

Por otro lado, en el Anexo V se puede encontrar el conjunto de ecuaciones, con formato de software EES, utilizadas para cada planta para obtener unos resultados preliminares del balance de materia de estas y mejorar la convergencia al simular con AspenPlus.

Para la simulación de los reactores en este software simulador serán necesarios una serie de datos que también serán calculados en este apartado.

Estos reactores, serán simulados con el software AspenPlus, en el cual se utilizará la herramienta RYield. Es por esto que con los datos de las Tablas 6, 7 y 8 de selectividades al carbono de los catalizadores seleccionados y conocida la conversión de los reactivos que consigue ese catalizador en esas condiciones determinadas, se aplican las ecuaciones del Anexo V entre las corrientes de entrada y salida de los reactores (según la numeración de las Figuras 11, 12, 13, 14 y 15) para calcular las Yield, que se requieren introducir. Estas ecuaciones no son más que un balance atómico entre la salida y la entrada al reactor, dando las Yield correspondientes que sean capaces de satisfacer el balance atómico de carbono, oxígeno y hidrógeno de los compuestos producidos. Estas ecuaciones tienen la siguiente forma genérica en todos los reactores para los productos y subproductos:

$$F_{3,i} = F_{2,i} + (F_{2,b} \cdot x_b + F_{2,a} \cdot x_a) \frac{2 \cdot Sc_i}{n^{\circ}c_i}$$

Donde:

- $F_{3,i}$: Caudal molar de salida del reactor del compuesto "i" (kmol/h)
- $F_{2,i}$: Caudal molar a la entrada del reactor del compuesto "i" (kmol/h)
- $F_{2,a}$: Caudal molar a la entrada del reactor del reactivo "a" (kmol/h)
- $F_{2,b}$: Caudal molar a la entrada del reactor del reactivo "b" (kmol/h)
- x_a : Conversión del reactivo "a"
- x_b : Conversión del reactivo "b"
- Sc_i : Selectividad al carbono del compuesto "i" (Carbonos a producto "i"/Carbonos reaccionados)
- $n^{\circ}c_i$: Número de carbonos de la molécula del compuesto "i"

Tras este cálculo, el oxígeno necesario para cumplir el balance se ajusta con el agua (H₂O), y los átomos de hidrógeno con hidrógeno (H₂)

Una vez calculados estos caudales, los Yield que se piden de entrada para el uso del reactor se calcularán siguiendo la siguiente expresión:

$$Yield_i = \frac{F_{3,i}}{F_{2,TOTAL}}$$

4.3.1 Procesos de dos pasos:

Estos dos procesos son los pertenecientes a los catalizadores de ZrO₂ y Ta₂O₃. En estas plantas, existen dos zonas diferenciadas, la primera y común a los dos catalizadores que es la zona de producción del acetaldehído a partir del etanol y la otra, donde se encuentra el reactor que contiene dichos catalizadores que transformará ese acetaldehído producido, junto con otra parte de etanol en

1,3-Butadieno. El funcionamiento de estas plantas será el siguiente:

4.3.1.1 Planta de acetaldehído.

Como ya se mencionó anteriormente, esta planta es común a los dos catalizadores de dos pasos puesto que en ambos casos, aquí, se utilizará el mismo catalizador que será el de Cu/MC, descrito en apartados anteriores.

Para mejorar la integración del proceso, esta planta se podría haber entrelazado más con la parte de la planta de producción de 1,3-Butadieno en los dos casos, consiguiendo así que no se tratara como una zona independiente del proceso. Teniendo esto en cuenta, se comprobó que al intentar esta mayor integración, la producción del 1,3-Butadieno se reducía además de provocar un aumento en los caudales de esta zona de la planta por la introducción de recirculaciones de reactivos no convertidos del otro reactor, por lo que se descartó esta opción y por eso se optó por tratarla de forma independiente al resto.

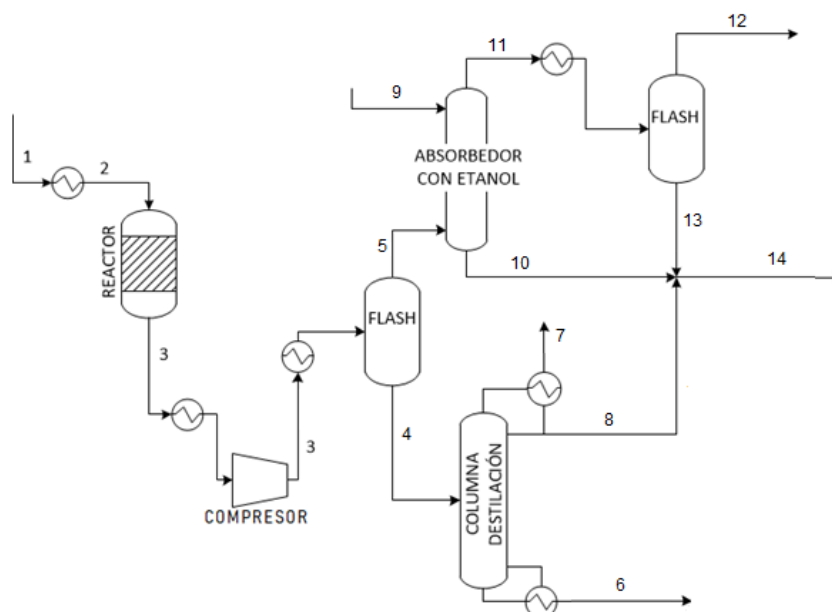


Figura 10 - PFD planta de producción de acetaldehído

Como se observa en la Figura 10, se introduce etanol azeotrópico (89% molar de etanol y 11% molar de agua), puesto que este será mucho más barato que el puro, por la corriente 1.

Esta corriente es calentada hasta los 260 °C a 1 atm, en un horno de combustión, que son las condiciones de operación de este catalizador.

De esta forma, introduciendo etanol azeotrópico por la corriente de entrada a la planta 1, las Yield, calculadas para cada compuesto son:

Tabla 18 –Datos de Yield del catalizador de Cu/MC calculados

COMPUESTO	Sc _i (%)	Yield _i
Etanol	-	0,1514
Agua	-	0,1007
Acetaldehído	95,1	0,7027
Hidrógeno	-	0,7479
Butanona	0,7	0,002586
Acetona	0,7	0,001995
Acetato de etilo	1,7	0,006281
Pesados	1,8	0,0133

Posteriormente, una vez producida la reacción química deseada que contiene los compuestos presentados en la Tabla 29, se enfría con agua de refrigeración hasta solo el punto de rocío de la corriente, para que no entre líquido dentro del compresor.

Acto seguido, esta mezcla en forma de vapor entra al compresor. Este compresor le transfiere la presión suficiente a esta corriente para que en la columna de destilación aguas abajo se pueda utilizar agua de refrigeración en el condensador, evitando así el uso de refrigerantes de bajas temperaturas, más caros. Otra opción sería comprimir con una bomba la corriente de entrada a dicha columna de destilación para conseguir lo anterior, ya que al ser líquida, es menos costoso energéticamente. Aún así, se decidió colocar el equipo aguas arriba, cuando aún es gaseosa la corriente, y utilizar un compresor, puesto que en la zona de purificación del hidrógeno (vapor del flash), también tiene unidades que se ven favorecidas a altas presiones, como la absorción y la condensación.

Esta columna de destilación se utilizará para separar compuestos pesados y agua del etanol no convertido y el acetaldehído producido en el reactor. Esa primera corriente de colas de agua y demás compuestos de alto punto de ebullición se irá a aguas residuales, mientras que el destilado, se introducirá en la planta del reactor del segundo paso. También se coloca un venteo para evacuar posibles gases incondensables (como el hidrógeno) y evitar su acumulación en el circuito.

La zona de purificación del hidrógeno, a partir de la corriente 5, consiste primero en la absorción con etanol. Esta absorción se utiliza para retirar todos los compuestos solubles en este, que puedan quedar presentes en el vapor separado del flash. Esto se hace para aprovechar el etanol fresco que es necesario introducir en la planta para continuar la reacción en el segundo paso, por lo tanto, este caudal de etanol estará determinado por el requerimiento de este en el reactor del segundo paso, es decir, para ajustar la relación etanol/acetaldehído que requiere el catalizador del reactor para la producción del 13BD. Segundo, se utiliza un refrigerante de baja temperatura para purificar este hidrógeno y llevarlo a una concentración de 90% molar en la corriente, para su venta. El etanol separado en esta condensación se reintroduce en la planta de producción de 1,3-Butadieno.

Se presenta un balance de materia preliminar completo de la planta en el Anexo V realizado con el software de cálculo EES, así como las ecuaciones utilizadas, asumiendo las hipótesis preliminares de: una relación a la salida 1:1 de acetaldehído:etanol, un consumo de etanol de 107,2 kmol/h y factores de separación en los equipos aproximados según el punto de ebullición del compuesto.

4.3.1.2 Planta de deshidratación de etanol y acetaldehído con catalizador de Ta2O3

Tras la planta de producción de acetaldehído explicada anteriormente, se dispone la segunda fase de producción de 1,3BD. Esta zona de la planta tendrá la siguiente estructura, que vendrá determinada por el catalizador en concreto, en tanto que afecta la propia conversión de este que influirá en las recirculaciones de producto y en el patrón de productos y subproducto, que determinará todas las

operaciones de separación:

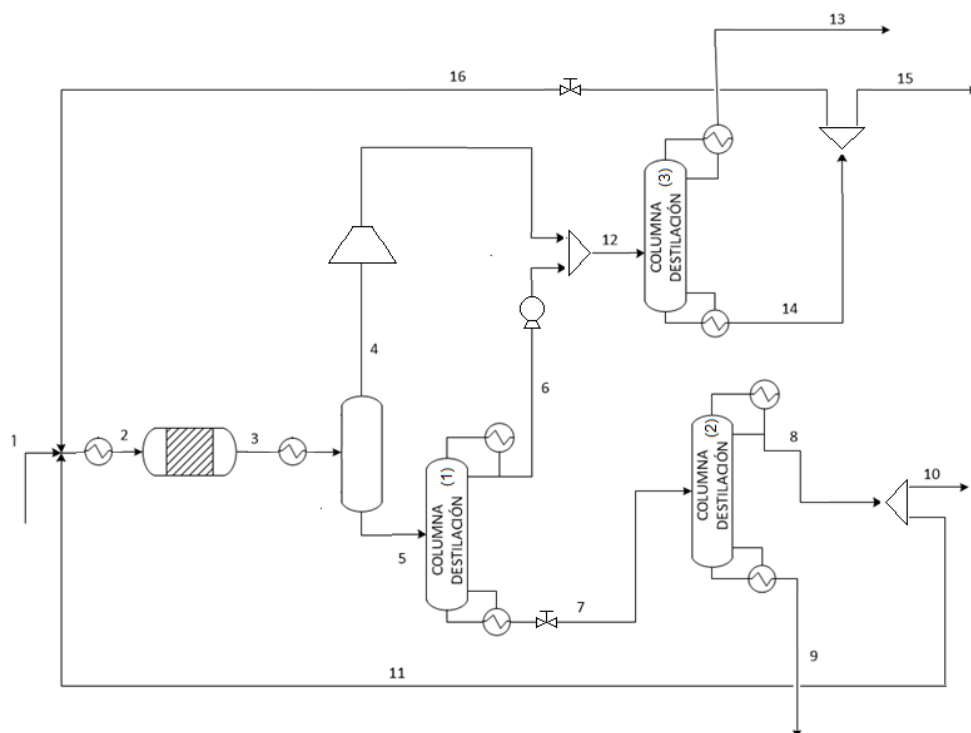


Figura 11 - PFD planta de producción de 1,3-Butadieno de 2 pasos con catalizador de Ta_2O_3

La corriente 1, que es la salida de la planta de acetaldehído, efluente de la primera fase de conversión de etanol en acetaldehído, y que contiene una mezcla de estos dos últimos, se mezcla con las corrientes de reciclo de etanol y acetaldehído (11 y 16 respectivamente), provenientes de los reactivos no convertidos en el reactor, formando la corriente 2, la alimentación del segundo reactor).

Esta corriente 2, deberá tener una relación molar etanol/acetaldehído de 1,5 según las especificaciones de este catalizador. Esta relación se conseguirá introduciendo más o menos etanol fresco en la planta de acetaldehído en la zona de absorción (corriente 9 de la Figura 10).

Esta corriente con la relación etanol/acetaldehído deseada se calentará en un horno a 1 atmósfera (que también es la presión de operación del reactor) para conseguir la temperatura de operación de este catalizador de 360 °C. Tras su paso por el reactor será enfriada con agua de refrigeración.

Igualmente que en el caso anterior, se presentan las Yield del reactor calculadas. Se calcularán con las ecuaciones del Anexo V a partir del software EES, correspondientes a este catalizador entre las corrientes 2 y 3 (entrada y salida del reactor). En este caso, como existen recirculaciones en la planta, las Yield presentadas corresponden a la conversión de solo el etanol y el acetaldehído en la relación molar requerida, exentas de otros productos para que las Yield no varíen por la entrada de otros subproductos a la entrada del reactor. Tomando como datos de cálculo de estas, una relación de etanol/acetaldehído de 1,5 y una relación de recirculación de etanol del 100%, utilizando la entrada de la planta de acetaldehído ya calculada, siendo F_{a_14} , del primer bloque de ecuaciones la salida de la planta de acetaldehído que a su vez es la entrada a esta planta (F_1):

Tabla 19 –Datos de Yield del catalizador de Ta₂O₃ calculados

COMPUESTO	Sci (%)	Yield _i
Etanol	-	0,3684
Agua	-	0,3731
1,3-BD	79,8	0,176
Butenos	2	0,004412
Etileno	4,5	0,01985
Propileno	1,8	0,005294
Acetaldehído	-	0,1904
Hidrógeno	-	0,01688
Acetona	0,2	0,0005883
Acetato de Etilo	1,1	0,002427
Crotonaldehído	1	0,002206
DEE	4	0,01103
Pesados	6	0,02471

Una vez se tiene el efluente del reactor con los compuestos mostrados en la tabla 30, se realizará una separación flash a la temperatura de enfriamiento de esta agua de refrigeración (35 °C), por el cual saldrán por colas los compuestos pesados y por cabeza los más ligeros, como etileno, propileno, hidrógeno, 1,3-butadieno etc.

Por cabeza saldrá también una gran parte de acetaldehído no convertido, por lo tanto, como esta corriente también será rica en Butadieno, se mandará a la columna de destilación aguas arriba de separación de estos dos productos (3), previamente se comprimirá para poder utilizar agua de refrigeración en el condensador y evitar uso de refrigerantes más caros, teniendo presente en este aumento de la presión de operación de la columna que también es conveniente utilizar vapor de baja presión en el reboiler de ésta.

Por la cola del flash, se recogerá sobre todo, etanol con compuestos pesados y algo de acetaldehído y 1,3-BD disuelto (ya que este último es fuertemente soluble en etanol). Por ello en la columna aguas abajo (1), se separará el butadieno y el acetaldehído por cabeza para enviarlos a la columna de separación de estos dos (3), mencionada anteriormente.

La cola de la columna (1) se expandirá a presión atmosférica, y se separará el etanol del agua y demás compuestos pesados en la columna (2), para así recircular este etanol separado en dicha columna.

Una vez simulada la planta en cálculos posteriores, se observó que era posible cerrar una de las dos purgas de la planta (la de recirculación de acetaldehído o de etanol). Aunque es principio sería más conveniente cerrar la de acetaldehído por ser un reactivo de mayor valor, para aprovechar este lo máximo posible, se decidió, cerrar la de etanol, ya que con conseguía mejores producciones de butadieno, aumentando menos los caudales internos de la planta, y por lo tanto el coste de esta.

4.3.1.3 Planta de deshidratación de etanol y acetaldehído con catalizador de ZrO_2

La siguiente planta de dos pasos diseñada es la que usa el catalizador de ZrO_2 , cuyo PFD se presenta a continuación, se observa que posee un gran parecido con la planta de Ta_2O_3 , aunque sus condiciones internas serán muy diferentes como se explicará a continuación. Esto es debido esencialmente a la diferencia de condiciones que necesita este catalizador respecto al anterior, como por ejemplo la relación etanol/acetaldehído principalmente, y la diferente generación de subproductos.

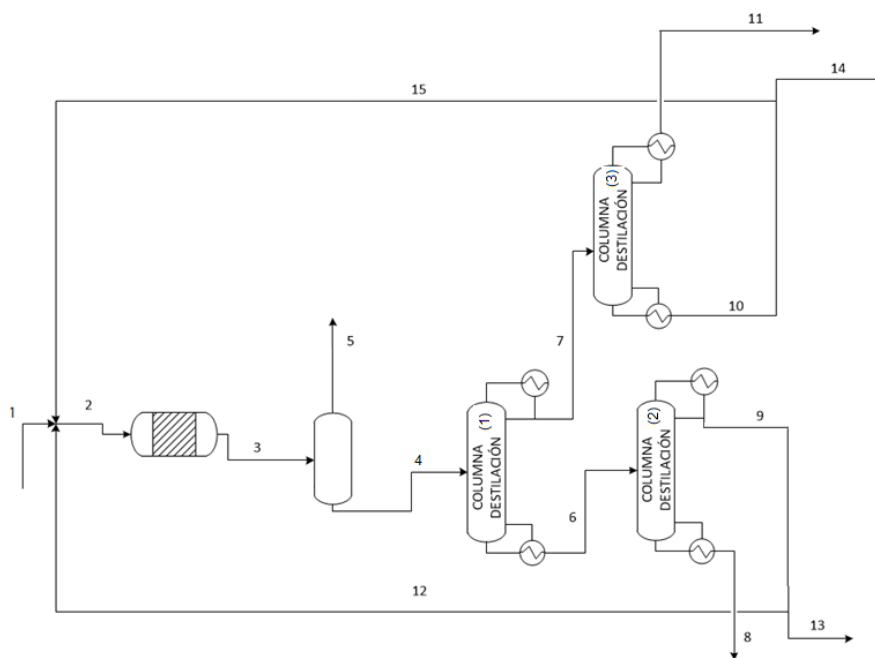


Figura 12 - PFD planta de producción de 1,3-Butadieno de 2 pasos con catalizador de ZrO_2

Como se observa en la Figura 12 corriente 1 es la entrada a la planta y también la salida de la planta de acetaldehído (Corriente 10 de la figura 10). Esta se mezcla con las corrientes de reciclo de etanol y acetaldehído (12 y 15 respectivamente), para formar la corriente 2.

En la corriente 2 se requiere una relación molar etanol/acetaldehído de 3,5 según las especificaciones de este catalizador. Esta relación se conseguirá de la misma forma que en la planta de dos pasos de catalizador de Ta_2O_3 .

Dicha corriente, con esta relación etanol/acetaldehído, se calentará en un horno con gas natural a 1 atmósfera para conseguir la temperatura de operación del catalizador de $320\text{ }^\circ\text{C}$. Tras su paso por el reactor será enfriada con agua de refrigeración.

Las Yield del reactor calculadas con las ecuaciones del Anexo V en este caso serán las siguientes. En este caso, como existen recirculaciones en la planta, las Yield presentadas corresponden a la conversión de solo el etanol y el acetaldehído en la relación molar requerida, exentas de otros productos para que las Yield no varíen por la entrada de otros subproductos a la entrada del reactor. Como hipótesis de cálculo, se impuso una relación de recirculación de etanol del 99%, un ratio etanol/acetaldehído de 3,5 molar y utilizando la entrada de la planta de acetaldehído ya calculada, siendo F_{a_14} , del primer bloque de ecuaciones la salida de la planta de acetaldehído que a su vez es la entrada a esta planta (F_1):

Tabla 20 –Datos de Yield del catalizador de ZrO₂ calculados

COMPUESTO	Sci (%)	Yield _i
Etanol	-	0,6613
Agua	-	0,2184
1,3-Butadieno	91,43	0,1071
Butenos	0	0
Etileno	2,26	0,005356
Propileno	0,48	0,0007763
Acetaldehído	-	0,1058
Hidrógeno	-	0
Acetato de Etilo	0,51	0,0005822
DEE	3	0,002329
Pesados	1,6	0,004658
Butanol	0,73	0,00163

Posterior al reactor, la corriente que contiene todos los compuestos anteriores, se separa en un flash a la temperatura de enfriamiento de esta agua de refrigeración (35 °C), por el cual saldrán por colas los compuestos pesados y por cabeza los más ligeros, como etileno, propileno, hidrógeno.

En este caso, a diferencia de la planta de Ta₂O₃, no se necesita llevar esta corriente de cabeza del flash a separación, puesto que la mayoría del 1,3-Butadieno producido en el reactor sale por cola, porque al ser el caudal de etanol tan alto en este caso debido a la alta relación etanol/acetaldehído que se requiere, este producto irá disuelto en este etanol puesto que son muy solubles. La cabeza del flash, donde van los gases incondensables, será desechada de la planta por su bajo contenido en 13-BD.

Por la cola del flash, se recogerá sobre todo etanol con compuestos pesados, acetaldehído y el 1,3-butadieno disuelto. Esta se llevará a la columna (1) para la separación del 13-BD y el acetaldehído (cabeza) del etanol y resto de pesados (fondo). Este fondo se llevará a la columna (2), que al ser necesario separar tanto etanol de tan poca agua comparado con el caso del catalizador de Ta₂O₃, por cabeza de esta columna (2), la composición se acercará al azeótropo entre el alcohol y el agua (89% molar de etanol). Por ello, será necesario utilizar una columna de mayores dimensiones que en el caso anterior, para así también evitar otros métodos de separación más costosos, e implicará tener más agua en recirculación para evitar en la medida de lo posible la pérdida de reactivo (etanol). Esto último es debido a que para conseguir una mayor recuperación de etanol, para evitar el azeótropo habrá que sacar también más agua por la cabeza de la torre (2).

La otra zona de separación, la columna (3), se encargará de la separación del de la cabeza de la columna (1), entre el acetaldehído, para su recirculación, y el producto de butadieno.

Para esa planta, debido a la mayor recirculación de agua en el sistema, no se podrá cerrar completamente la purga de etanol. Además, al igual que en el caso anterior, será más conveniente cerrar al máximo posible la purga de etanol y controlar la purga de acetaldehído, debido a la gran relación etanol/acetaldehído que se requiere.

4.3.2 Proceso de un paso

Como ya se comentó anteriormente a este proceso le corresponden los catalizadores de Hf:Zn y el de Y:Zn. En este caso no existe un proceso previo de producción de acetaldehído puesto que toda la

reacción de transformación de etanol en 1,3-Butadieno viene dada en el mismo reactor. El funcionamiento de estas plantas será el siguiente:

4.3.2.1 Planta con catalizador de Hf:Zn

Para este primer catalizador para procesos de 1 paso, se diseñó una planta como la mostrada en el PFD siguiente, al igual que los catalizadores anteriores este operará a 1 atm de presión pero a una temperatura 360 °C, con una generación de productos substancialmente diferente:

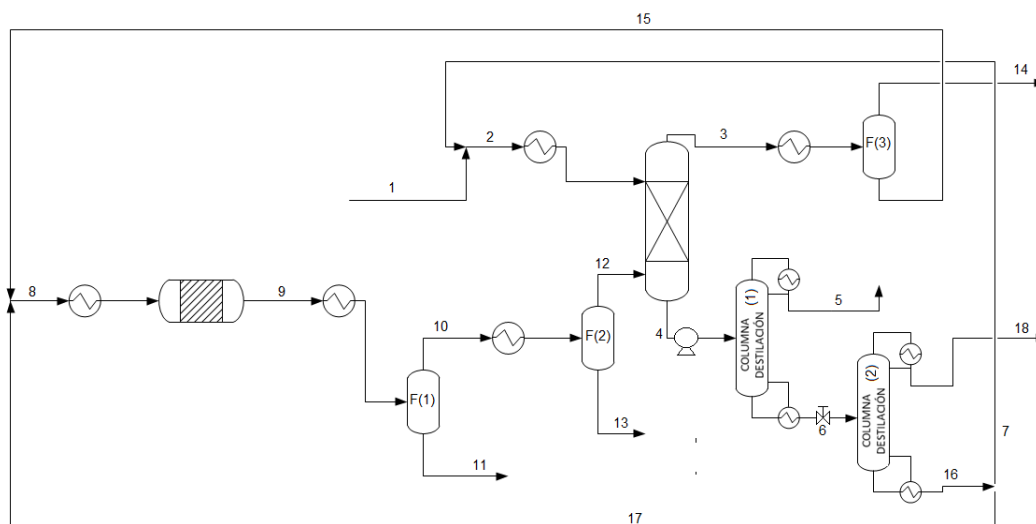


Figura 13 - PFD planta de producción de 1,3-Butadieno de 1 paso con catalizador de Hf:Zn.

Como se ve en el PFD de la Figura 13, en este caso, al realizarse la conversión del etanol en 1,3-Butadieno en el mismo reactor, además de todos los productos secundarios que se dan, también se produce hidrógeno. Por lo tanto, en esta mezcla se hace más difícil de separar el butadieno que en el caso de los procesos de dos pasos. Por ello, aprovechando la gran solubilidad que tiene el butadieno en etanol, se aprovecha la entrada de este último reactivo fresco en la planta (corriente 1) para separar el butadieno del resto de gases en una torre de absorción. Debido a que esta corriente que debe de ser de 107,2 kmol/h, para no superar el consumo de etanol establecido en todas las plantas, no es etanol suficiente para disolver todo el butadieno, por lo tanto, también es necesario utilizar etanol recirculado (corriente 7) como agente absorbedor del productor que se mezcla con el reactivo fresco.

Tras la absorción, el butadieno se desorbe en la torre de destilación (1) que opera a una presión suficiente como para utilizar agua de refrigeración en el condensador y evitar el uso de refrigerantes más caros, obteniendo un producto muy purificado por cabeza.

La cola de la columna (1) que es rica en etanol, se destila a presión atmosférica en la torre de destilación (2) para eliminar compuestos ligeros como DEE o acetaldehído y evitar su acumulación en el sistema o su interferencia con la reacción deseada.

El fondo de la columna de destilación (2), se separa en dos corrientes, una en la corriente 7, utilizada para absorber el etanol y en la corriente 17 que es enviada al reactor para llevar a cabo la reacción. Será necesario elegir bien esta división de la corriente, puesto que si se abre demasiado para la corriente 17, se producirá mucho 1,3-butadieno pero se perderá mucho producto por cabeza de la torre de absorción porque no habrá suficiente etanol para disolver ese butadieno producido, y en viceversa para el supuesto contrario.

El reactor en esta planta operará a una temperatura de 360 °C y presión atmosférica con su corriente

de entrada calentada en un horno. Este reactor trabajará con las siguientes Yield de la Tabla 21, calculadas con las ecuaciones del Anexo V a partir del software EES, entre las corrientes 8 y 9 del apartado de la planta correspondiente. En este caso, como existen recirculaciones en la planta, las Yield presentadas corresponden a la conversión de solo el etanol y el acetaldehído en la relación molar requerida, exentas de otros productos para que las Yield no varíen por la entrada de otros subproductos a la entrada del reactor. En este caso, la entrada a la planta (corriente 1), proviene directamente del exterior, ya que en este caso se convierte directamente el etanol en 1,3-BD. La hipótesis de cálculo en este caso, es el consumo de etanol de 107,2 kmol/h, una relación entre las corrientes 16 y 7 de 0,76, valor elegido por reportar buenos resultados de producción de 1,3-Butadieno (corriente 5).

Tabla 21 – Datos de Yield del catalizador de Hf:Zn calculados

COMPUESTO	Sci (%)	Yield _i
Etanol	-	0,008
Agua	-	0,7748
1,3-Butadieno	71	0,3522
Butenos	3,8	0,01885
Etileno	5,8	0,05754
Propileno	3,6	0,02381
Acetaldehído	4	0,03968
Hidrógeno	-	0,564
Butanal	2,5	0,01339
DEE	0,7	0,003472
Pesados	8,1	0,07936
Butanol	0,42	0,001984

Tras la reacción, se refrigerará la salida del reactor (corriente 9) primero con agua de refrigeración eliminando de esta forma la mayoría de los compuestos pesados y una buena cantidad de agua (flash 1).

Para purificar más la salida del reactor y además para mejorar la posterior absorción, se volverá a refrigerar esta corriente (corriente 10) con un refrigerante de baja temperatura (0 °C).

Por otra parte, por la cabeza de la columna de absorción (corriente 3) saldrá algo de etanol, puesto que aunque las corrientes de entradas han sido refrigeradas, al tratarse de un proceso exotérmico, implicará un aumento de la temperatura y por lo tanto una pequeña vaporización de etanol. Para evitar la pérdida de este etanol, se realizará una separación del resto de gases por condensación (flash 3) con un refrigerante de baja temperatura, y este etanol recuperado se reintroducirá en el reactor junto con la corriente 17.

4.3.2.2 Planta con catalizador de Y:Zn

El proceso del segundo catalizador de 1 paso diseñado seguirá el siguiente PFD, el cual resulta muy diferentes a los anteriores ya que la característica más llamativa de este catalizador es que consigue una conversión total del etanol, y los subproductos generados son todos gases ligeros, provocando que esta sea una planta de corrientes gaseosas exclusivamente.

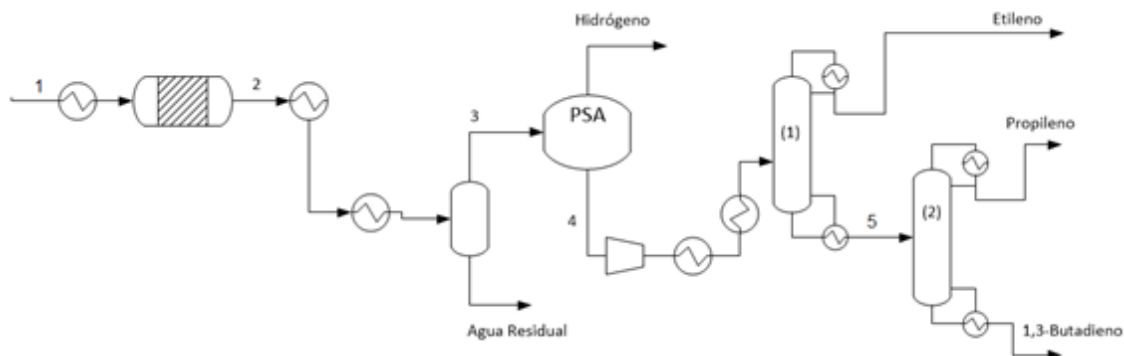


Figura 14 - PFD planta de producción de 1,3-Butadieno de 1 paso con catalizador de Y:Zn.

Este catalizador tiene la característica especial respecto a los demás, que consigue una conversión completa del etanol introducido en el reactor, es por ello que será una planta mucho más simple que las anteriores al no ser necesario la recirculación de reactivos.

En contra a esta gran ventaja, se puede decir que este catalizador genera subproductos gaseosos, que serán mucho más difíciles de separar para obtener el producto de butadieno final.

En esta planta, al no existir recirculaciones de etanol, no se puede aprovechar de ninguna forma la entrada de etanol fresco a la planta, como por ejemplo para separar el butadieno del resto de gases como en el caso anterior. Por esta, la corriente fresca, tras calentarla en un horno hasta la temperatura de operación, será introducida directamente al reactor.

Las Yield, sin bypass de subproductos por la ausencia de corrientes de recirculación en toda la planta, de este reactor serán las siguientes:

Tabla 22 – Datos de Yield del catalizador de Zn:Y calculados

COMPUESTO	Sci (%)	Yield _i
Etanol	-	0
Agua	-	1
1,3-Butadieno	75	0,3338
Etileno	17	0,07565
Propileno	8	0,0712
Hidrógeno	-	0,4138

Posteriormente, se enfría con agua de refrigeración para intentar eliminar el agua producida en el reactor, seguido de otro enfriamiento a 20°C con un refrigerante de baja temperatura para mejorar dicha eliminación de agua.

La cabeza del flash posterior, se llevará a un sistema de PSA (Pressure Swing Adsorption), para eliminar el hidrógeno, ya que con esa cantidad de este gas incondensable en la corriente, se hace imposible la separación a partir de otros métodos tradicionales como la destilación, obteniendo en esta unidad un hidrógeno muy puro (>98%)⁸⁴ respecto al resto de compuestos orgánicos. Las trazas de agua que lleve las corrientes, serán separadas en la unidad PSA junto con el hidrógeno, ya que el adsorbente será carbón activo que es hidrófobo. El resto de componentes orgánicos, afines al adsorbente, serán separados juntos por la otra corriente.

La corriente de orgánicos, se llevará a destilación, aprovechando también la baja temperatura conseguida en el PSA previo a un proceso de compresión para aumentar las temperaturas de los condensadores y no utilizar refrigerantes de demasiada baja temperatura, separando así el etileno primero por cabeza, y posteriormente en la columna 2 (aguas abajo), el propileno por cabeza y el producto de butadieno por colas. Tras la compresión, debido al aumento de la temperatura primero se realiza un enfriamiento con agua de refrigeración y otro posterior con refrigerante para que la mezcla entre como líquido saturado en la columna y mejore la separación.

Esta separación de gases se realiza porque existe una elevada cantidad de etileno y propileno producida en el reactor, y por lo tanto puede merecer la pena su separación para su.

Como esta planta no contiene recirculaciones, es sencilla su convergencia en software de simulación, por lo tanto solo se presenta en el Anexo V el balance atómico para el cálculo de las Yield del reactor.

4.4 DETERMINACIÓN DEL PUNTO NOMINAL DE OPERACIÓN

En este apartado, se pretende encontrar el punto óptimo de operación de las diferentes plantas a estudiar, estudiando una serie de variables de los procesos que afectarán directamente al balance de materia, como pueden ser caudales de purga (como se analizó en las dos plantas de dos pasos en los apartados 4.4.1.1 y 4.4.1.2) o las relaciones de caudales de la planta y temperaturas de operación de equipos (apartado 4.4.2.1).

Para ello, se trata de determinar relaciones de recirculación o incluso temperaturas, que afectan a los caudales internos de los procesos, generando una implicación directa en los costes de operación, provenientes del uso de los servicios o utilities, y la amortización de la planta, es decir el coste total de la planta divididos entre los números de años de vida útil de la planta (15 años) y el tiempo de operación anual impuesto (8000 h/año), que maximice el beneficio, proveniente de la mayor o menor cantidad de producto generado para venta. En resumen, se debe optimizar, maximizar la siguiente función:

$$\text{Beneficio} = \text{Ingresos} - \text{Costes operativos} - \text{Amortización}$$

Esta búsqueda del punto nominal se realizará con el software simulador ASPEN (los métodos termodinámicos utilizados serán el de NRTL para las plantas con catalizador de Ta₂O₃, ZrO₂ y Hf:Zn, mientras que para la de Y:Zn se utilizará el de SRK.), partiendo del diseño descrito en el apartado anterior y utilizando los valores de operación indicados para cada catalizador como temperatura, presión o relación etanol/acetaldéhidó, si procede, obtenidos de la tabla 9. La manera de llevar a cabo este análisis con este programa será la siguiente.

Se utilizarán para las torres de destilación la herramienta DWSTU que no devuelve el diseño riguroso de las columnas pero son interesantes para este análisis puesto que solo imponiendo variables como el número de etapas y la recuperación de los productos clave, calculando la separación para todos los valores del análisis de sensibilidad estudiados.

Para estas columnas DWSTU, en una primera aproximación de diseño sencillo, se impondrá 15 etapas en todas las columnas y una recuperación de productos por cabeza del 99% para el clave ligero y 1% para el clave pesado para todos los modelos de plantas estudiados aquí.

En el caso del reactor, para que los valores de Yield ya introducidos no varíen con los ya impuestos al variar la relación de recirculación, se colocará un separador selectivo a la entrada de forma que bypasee los subproductos al reactor y solo entre en este los reactivos, utilizaron así los valores de Yield calculados en el apartado anterior.

Observado la ecuación a maximizar presentada anteriormente, lo primero a calcular es el beneficio en cada punto de operación. Para ello, se deberá multiplicar el caudal de los productos generados de butadieno e hidrógeno, principalmente, para venta (Anexo VI), por su precio (tabla 66).

Posteriormente habrá que determinar los costes de las utilities. Para ello, se utilizó una serie de correlaciones que consiguen su estimación.⁸⁵

Las utilities a utilizar fueron: Agua de refrigeración (CW) para los condensadores de las columnas y los enfriamientos post-reacción, Vapor de baja presión de 2,3 bar o 125 °C (LPS) utilizado en los reboiler de las columnas de destilación, Refrigerante de 0°C y de -15°C de temperatura de enfriamiento, es decir, refrigerantes de baja temperatura con un estado térmico suficiente para enfriar fluidos a 0°C y -15 °C, Gases de combustión, para el calentamiento de corrientes de alta temperatura como puede ser en los reactores, donde se requiere mayor temperatura, electricidad para su uso en bombas y compresores. También será necesario el tratamiento de aguas residuales, puesto que, además del agua de entrada con el etanol, en la reacción existe generación de agua que llevará consigo trazas de compuestos orgánicos no separados y será necesaria su evacuación del sistema hacia un lugar de tratamiento.

El coste de todo esto puede estimarse de la forma:

$$CW: Coste (\$/m^3) = (0,0001 + 3 \cdot 10^{-5} \cdot q^{-1}) \cdot CEPSI + 0,003 \cdot C_f$$

$$LPS: Coste (\$/kg) = (2,7 \cdot 10^{-5} \cdot m^{-0,9}) \cdot CEPSI + 0,0034 \cdot p^{0,05} \cdot C_f$$

$$Refrigerante: Coste (\$/kJ) = (0,6 \cdot Q^{-0,9} \cdot T^{-3}) \cdot CEPSI + 1,1 \cdot 10^6 T^{-5} \cdot C_f$$

$$Electricidad: Coste (\$/kW \cdot h) = 1,3 \cdot 10^{-4} \cdot CEPSI + 0,01 \cdot C_f$$

$$Agua Residual: Coste (\$/m^3) = (0,0005 + 1 \cdot 10^{-4} \cdot F^{-0,6}) \cdot CEPSI + 0,1 \cdot C_f$$

Donde:

- CEPSI: Es el índice CEPSI de inflación que en 2019 fue de 602,2⁸⁶
- C_f : Coste del combustible para la producción de energía, en España, del carbón⁸⁷: 3,48 \$/GJ
- q : Caudal de agua de refrigeración total que consume la planta (m³/s)
- m : Caudal de vapor total que consume la planta (kg/s)
- p : Presión del vapor utilizado (barg)
- Q : Duty total de refrigerante de la planta (kW)
- T : Temperatura del refrigerante (K)
- F : Caudal de agua residual (m³/s)

Se observa de las correlaciones anteriores, que para calcular los costes del agua de refrigeración, el vapor y el refrigerante es necesario, a priori, conocer los consumos totales de la planta.

Como aún no se tiene estos datos exactos, se puede estimar que para el agua de refrigeración, el consumo total será de 10000 kW, de vapor de baja unos 6000 kW y de refrigerante de 400 kW (que de los resultados posteriormente calculados en la Anexo VI, se observa que son unos valores razonables) en todos los casos a estudiar, para conseguir que el precio de los servicios sea igual para todos los casos.

En cuanto al coste energético del uso de gases de combustión, se puede calcular como el precio del gas natural (TUR: 0,0441 \$/kW·h)⁸⁸, entre su rendimiento energético, que se puede estimar en un 70% (es decir, el calor real que se obtiene en la combustión del horno, contando las pérdidas de calor en este y la pérdida por los gases de combustión, dividido entre el poder calorífico del gas natural).

Conocido esto, se adjunta la siguiente tabla con el precio y algunas propiedades de las utilities:

Tabla 23 – Propiedades térmicas y precios de los servicios utilizados

Servicio	T _{IN} (°C)	T _{OUT} (°C)	ΔT _{MIN} (°C)	Capacidad térmica (kJ/kg)	Coste Calculado (CORREL.)	Coste energético (\$/kJ)
Agua refrigeración ^a	20	30	5	41,75	0,075	1,8·10 ⁻⁶
Vapor de baja	125	125	5	2201,5	0,0186	8,44·10 ⁻⁶
Refrigerante 0°C ^b	-2	-2	2	240	2,6·10 ⁻⁶	2,6·10 ⁻⁶
Refrigerante -13 °C ^b	-15	-15	2	240	3,43·10 ⁻⁶	3,43·10 ⁻⁶
Gas de Combustión ^a	1200	150	10	1254,75	-	1,75·10 ⁻⁵
Electricidad	-	-	-	-	0,1131	3,14·10 ⁻⁵

^a: Para un C_p de 4,175 kJ/kg·K y densidad 998 kg/m³ para el CW y C_p=1,195 kJ/kg·K para los gases de combustión ⁸⁹

^b: Suponiendo que es el refrigerante R-449^{a90}

El último coste de producción que se determinará será el del coste de uso de los catalizadores. A partir del caudal másico que entre en los reactores que contengan el catalizador se podrá determinar la cantidad, y por lo tanto el coste, de catalizador necesario en cada reactor, suponiendo que este se cambia cada 5 años, valor general de la industria. Los precios de estos serán los presentados en el apartado 3.4 y el coste será calculado con la siguiente expresión:

$$\text{Coste. Cat } (\$/h) = \frac{F_{ET} \cdot \text{PrecioCat}}{5 \cdot 8000 \cdot WHSV}$$

Por último, sabiendo los ingresos por venta de productos y los costes operativos, el coste total de las plantas o CAPEX será determinado por el mismo simulador con la herramienta ASPEN Economic Analys. Una vez determinado este CAPEX, podrá calcularse la amortización presente en la función de beneficio a maximizar y con todo lo anterior, obtener el punto de operación que lo consiga en cada proceso.

4.4.1 Proceso de dos pasos.

En estos casos, puesto que existen dos recirculaciones (etanol y acetaldehído), se fija la recirculación de etanol en su valor máximo, y se estudiaron los valores de coste-beneficio variando la recirculación de acetaldehído. En todo el estudio debe mantenerse la relación etanol/acetaldehído de 1,5 y 3,5 molar que requieren los catalizadores de Ta₂O₃ y ZrO₂ respectivamente del segundo paso, esta será mantenida con la relación de etanol y acetaldehído que entran de la zona del primer paso (la planta de acetaldehído), introduciendo más o menos etanol por las corrientes 1 y 9 de la Figura 11, ya que el consumo global de etanol (suma de esas dos corrientes), debe ser constante e igual a la indicada en el apartado 4.1.

En las tablas del Anexo VI se muestra cada concepto del cálculo del análisis de sensibilidad en detalle y un resumen de este en las tablas 24 (para la planta de catalizador de Ta₂O₃) y 25 (para la planta de catalizador de ZrO₂) de este apartado

En la primera tabla de dicho anexo se muestra la generación de producto para cada valor de relación de recirculación de acetaldehído que en estos casos serán el 1,3-Butadieno y el Hidrógeno, donde este primero se observa que aumenta con el cierre de las purgas al contrario que el segundo.

También se muestra el caudal másico en kg/h del etanol que entra en los dos reactores (F_{ET}), para el cálculo del coste de la utilización de los catalizadores.

Posteriormente a estas dos columnas de caudal de etanol, se muestra la corriente que aglutina todos los venteos y corrientes de las plantas combustibles. Esta corriente se quemará para producir calor, por lo tanto, el beneficio que reportará esta corriente será, en este apartado de forma preliminar para facilitar los cálculos, tanto como gas natural sustituya con el calor que produzca. Para calcular el poder calorífico de esta corriente se debe conocer las entalpías de combustión del acetaldehído, del etanol y del butadieno (1168,76; 1336,8; 2541,5 kJ/mol respectivamente⁹¹ ya que las corrientes combustibles serán en composición de aproximadamente el 100% de acetaldehído para la planta de catalizador de Ta₂O₃, y de composición 70% acetaldehído, 20% etanol, 10% 13-BD aproximadamente para la planta de catalizador de ZrO₂.

Las siguientes tablas del anexo muestran los requerimientos energéticos de cada equipo en kW, agrupados por tipo de servicio y el coste de tratamiento del agua residual

Finalmente, la última tabla del análisis presente del Anexo VI, hace un resumen comparativo de los costes e ingresos, obtenidos de la información anterior y de los precios calculados.

El resumen de todo el análisis completo del anexo, se muestra en los siguientes apartados.

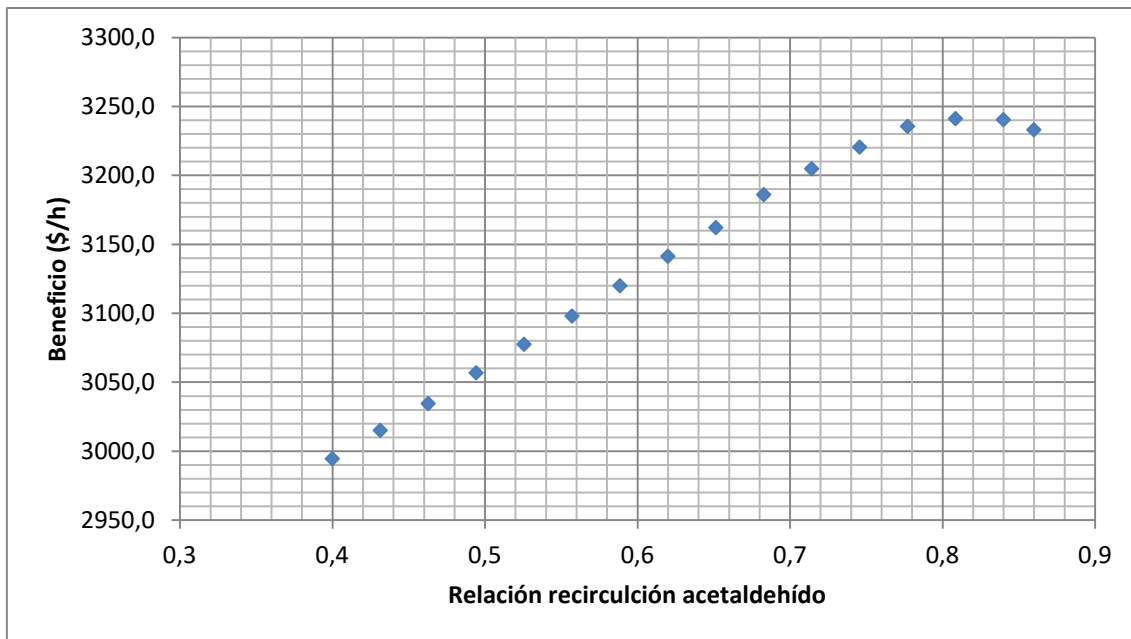
4.4.1.1 Planta de catalizador de Ta₂O₃

En este caso, el valor máximo de la recirculación de acetaldehído será del 86%, manteniendo completamente cerrada la purga de etanol (relación de recirculación de etanol 100%). El punto inicial del estudio se colocó en relación de recirculación del 40%, obteniendo los siguientes resultados.

Tabla 24 – Ingresos vs Costes para la planta de catalizador de Ta₂O₃

R_{ACETALD}	INGRES. TOT (\$/h)	COSTES TOT. (\$/h)	CAPEX (\$)	COSTE CAT (\$/h)	BENEFICIO (\$/h)
0,400	3773,3	622,7	9081760	80,2	2994,7
0,431	3798,0	626,3	9081450	80,8	3015,2
0,463	3822,2	630,6	9081450	81,3	3034,6
0,494	3849,0	634,4	9081140	81,9	3056,9
0,526	3874,9	639,0	9078820	82,5	3077,7
0,557	3900,9	644,0	9076500	83,1	3098,1
0,589	3928,8	649,2	9077000	83,9	3120,1
0,620	3956,7	655,0	9077500	84,6	3141,5
0,651	3984,8	661,7	9077180	85,2	3162,3
0,683	4014,6	667,1	9049580	85,9	3186,2
0,714	4044,3	677,2	9054735	86,6	3204,9
0,746	4073,5	690,1	9059890	87,3	3220,6
0,777	4106,8	707,5	9060250	88,2	3235,7
0,809	4137,4	731,7	9072930	88,9	3241,2
0,840	4170,5	764,5	9099490	89,6	3240,5
0,860	4191,3	792,0	9114800	90,2	3233,1

Que de forma gráfica se resulta:



Gráfica 10 - Beneficio vs Relación de recirculación para la planta de catalizador de Ta₂O₃

Se observa claramente que existe un máximo de beneficio en el punto de relación de recirculación de acetaldehído del 81% aproximadamente, por lo tanto se puede decir que este es el punto nominal de esta planta. Relación de recirculación de acetaldehído al 81% y relación de recirculación de etanol al 100%.

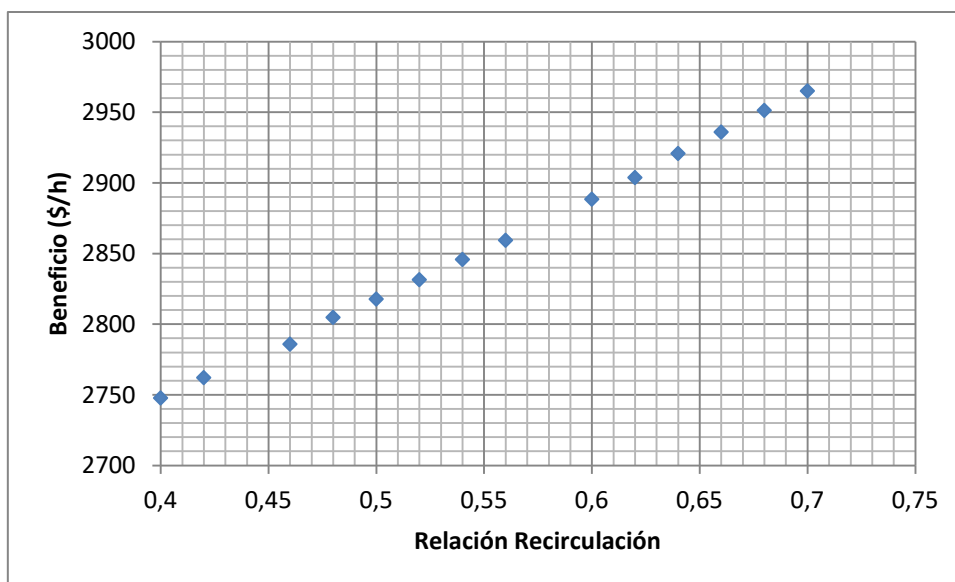
4.4.1.2 Planta de catalizador de ZrO₂

Aquí, el valor máximo de la recirculación de acetaldehído será del 87% y 99% para la del etanol. El punto inicial del estudio se colocó en relación de recirculación del 50% y fijando la recirculación de etanol en su valor máximo, obteniéndose los siguientes resultados:

Tabla 25 – Ingresos vs Costes para la planta de catalizador de ZrO₂

R _{ACETALD} EH.	INGRES. TOT (\$/h)	COSTES OP. (\$/h)	CAPEX (\$)	COSTE CAT (\$/a)	BENEFICIO (\$/h)
0,50	3862,5	1035,1	8625030	34,696	2720,9
0,55	3906,1	1035,1	8655540	34,664	2764,2
0,57	3924,3	1031,8	8657260	34,728	2785,6
0,61	3971,2	1029,2	8660700	34,664	2835,1
0,64	3991,8	1025,2	8674300	34,687	2859,6
0,66	4014,6	1022,4	8681513	34,692	2885,2
0,68	4035,9	1019,7	8688727	34,732	2909,1
0,71	4063,2	1020,7	8695940	34,663	2935,4
0,73	4084,5	1019,8	8696360	34,730	2957,5
0,78	4137,7	1024,9	8697200	34,671	3005,7
0,80	4161,8	1027,7	8690780	34,726	3027,0
0,82	4189,1	1032,2	8685210	34,726	3049,9
0,84	4217,1	1037,6	8673220	34,743	3072,5
0,87	4248,0	1044,6	8673110	34,744	3096,4

Que de forma gráfica se resulta:



Gráfica 11 - Beneficio vs Relación de recirculación para la planta de catalizador de ZrO₂

Se observa en este caso, que curva de beneficio crece indefinidamente, por tanto no existe máximo, sino que este será el valor máximo posible de relación de recirculación. Esto es debido a que la columna de destilación azeotrópica de etanol, para relaciones bajas tiene mucho gasto de agua de refrigeración y de vapor por el incremento de los caudales internos de este equipo. Esto se debe a que a relaciones de recirculación bajas, la concentración en la cabeza de la columna se acerca más al azeótropo y por lo tanto, si se fijan las recuperaciones y el número de etapas (como se hace con la

herramienta del simulador de DSTW), lo que aumentan son los caudales internos del equipo al reducir la relación de recirculación. Esto hace que el ahorro en el consumo de servicios en este equipo crezca en el mismo sentido que la relación de recirculación, y por tanto que la generación de producto, generando una curva de beneficio siempre ascendente.

En resumen, se puede decir que el punto nominal de operación óptimo de esta planta es relación de recirculación del 87% para el acetaldehído y 99% para el etanol.

4.4.2 Procesos de un paso.

Igualmente que en el caso anterior, los análisis se realizarán utilizando columnas de destilación DSTW con las mismas recuperaciones de compuestos claves y bypaseando los subproductos en el reactor para mantener fija las Yield introducidas previamente durante la toma de los diferentes valores en el análisis.

En el Anexo VI, también se encuentra el desarrollo completo del análisis de sensibilidad para la búsqueda del punto nominal de este caso, con la misma estructura que la comentada en el apartado 4.4.1.

4.4.2.1 Planta de catalizador de Hf:Zn

En este caso, el punto de operación nominal se deberá estudiar según la relación de recirculación que determina la cantidad de etanol fresco que se manda para la separación del 1,3-BD producido en la columna de absorción o para introducirlo en el reactor de producción de ese mismo producto (dicha relación se define como $F7/F16$), es decir, determinar el caudal de las corrientes 7 y 17 de la figura 14.

Para relaciones de recirculaciones altas (mucho etanol a la torre de absorción), provocaría en la planta que la mayor parte del 1,3-BD fuera separado de la corriente de gases procedentes del reactor (corriente 12), pero al conducir más etanol al tren de separación, iría menos hacia el reactor y la generación de producto sería menor. Eligiendo el otro caso, conduciendo más etanol al reactor que a la torre de absorción encargada de la separación de los gases, ocurriría lo contrario, existiría una gran generación de producto, pero el etanol usado para la separación sería insuficiente para la separación de la totalidad del producto de la corriente de gases. Por todo esto ello, el punto nominal deberá buscar el compromiso entre estas dos opciones, en la cual exista una salida de 1,3-butadieno alta por la corriente de producto.

De los resultados de las plantas anteriores, que el máximo de beneficio ocurría en, o muy cerca, del máximo de producción y sumado a que en esta planta no se colocaron purgas y por lo tanto no habrá aumento del caudales internos netos en la planta para las diferentes relaciones de recirculación que se estudien, se puede decir, que el punto nominal de esta planta estará en el punto donde exista la mayor salida de producto.

Por ello se realizó la siguiente tabla donde se muestra la generación de producto por la corriente de salida de ésta para unas relaciones de recirculación concretas (referida al porcentaje recirculado a la torre de absorción), así como el 1,3-butadieno no separado perdido por la cabeza de la torre de absorción y el total de producto sintetizado por el reactor.

Tabla 26 – Análisis de producción de la planta de catalizador de Hf:Zn con entrada de líquido a 20°C

RC B10	1,3-BD Producto ^a	1,3-BD No separado ^b	Total (kmol/h)
0,5	23,361	14,647	38,008
0,514	23,657	14,305	37,962
0,528	23,966	13,947	37,914
0,557	24,635	13,173	37,808
0,571	24,998	12,752	37,750
0,585	25,386	12,302	37,688
0,614	26,251	11,303	37,554
0,628	26,738	10,743	37,481
0,642	27,269	10,134	37,403
0,671	28,492	8,744	37,236
0,685	29,201	7,945	37,145
0,713	30,870	6,082	36,952
0,727	31,861	4,990	36,851
0,756	34,251	2,395	36,646
0,77	35,699	0,849	36,548

^a: Corriente número 5 de la figura 14

^b: Corriente número 3 de la figura 14

De la Tabla 26 se observa que se cumple lo mencionado anteriormente, aunque se puede ver que a relaciones de recirculación bajas y medias, la pérdida de producto es demasiada, siendo el máximo de producción en el máximo de relación de recirculación.

Podría utilizarse una relación mayor aumentando la temperatura de entrada de líquido a la columna, la cual se fijó para la Tabla 26 en 20 °C, ya que este máximo está limitado porque a mayores caudales de líquido de entrada a la columna se produce inundación. Aunque en este caso, esta posibilidad resultaría en un aumento en la pérdida de butadieno por la cabeza de la torre, ya que a altas temperaturas la absorción empeora.

La otra posibilidad, sería bajar la temperatura de entrada de líquido a la torre de absorción, ajustando la recirculación de etanol hacia la torre de absorción al máximo hasta el límite de la inundación.

De esta forma se estudiará como varían todos los parámetros de la planta y si compensa en cuanto al beneficio obtenido utilizar refrigerantes más caros para recircular menos a la torre de absorción (y por tanto más al reactor), por el aumento del butadieno producido.

De aquí para cada valor temperatura de líquido a la entrada de la torre de absorción se obtuvieron los siguientes valores (no se representaron los costes de capital porque se suponen invariables para todos los valores al no existir purgas y por lo tanto acumulación de especies en la planta que hagan aumentar demasiado el caudal):

Tabla 27 – Ingresos vs Costes para la planta de catalizador de Hf:Zn

T_{B14} (°C)	RC B10	$T_{ref.B14}$ (°C)	INGRESO TOTAL (\$/h)	COSTE TOTAL (\$/h)	BENEFICIO (\$/h)
20	0,77	17	3902,6	491,8	3410,7
10	0,71	7	3902,7	484,8	3417,9
5	0,678	2	3904,4	482,0	3422,4
0	0,646	-3	3907,5	479,8	3427,7
-5	0,612	-8	3910,1	478,9	3431,3
-10	0,5785	-13	3920,2	478,1	3442,0
-20	0,508	-23	3931,9	477,3	3454,7

Se observa que el beneficio crece indefinidamente con la bajada de temperatura del líquido de entrada a la torre de absorción. Esto es debido porque el aumento de producción compensa el coste del refrigerante utilizado debido al alto precio de venta del butadieno.

Por lo tanto, se eligió la temperatura de -20 °C de entrada de esta corriente para no operar en la planta con temperaturas demasiado bajas. Que además elimina la corriente de recirculación de etanol al reactor procedente de la cabeza de la torre de absorción como se propuso preliminarmente en el PFD de la figura 14, puesto que al ser tan baja temperatura en este punto, apenas existe evaporación de etanol y salida de este por cabeza de la torre.

4.4.2.2 Planta de catalizador de Zn:Y

Para este caso, se concibió el diseño de la planta teniendo en cuenta que la conversión del etanol en el reactor es del 100% con este catalizador, tal y como dicta las condiciones del catalizador.

Por lo tanto no se puede decir que haya un punto de operación óptimo, ya que con estas características existe un punto de operación único.

4.5 DISEÑO DE EQUIPOS

Una vez determinado el punto nominal óptimo de operación de los cuatro casos, y por lo tanto, determinado cuál es su balance de materia, para conseguir una total optimización de los procesos quedaría la optimización de los procesos unitarios que lo forman, concretamente las unidades de separación, ajustando sus parámetros internos de forma que supongan un coste mínimo, manteniendo sus características deseadas.

Para conseguir la determinación de estos parámetros de diseño se utilizará el software Aspen con la herramienta de columnas DSTW, que aplica las ecuaciones de Fenske-Underwood-Gilliland que solo introduciendo dos variables como el número de etapas y la recuperación de los claves, es posible calcular las demás (relación de recirculación mínima y de operación, número de etapas y etapa de alimentación)

El estudio de optimización se llevará a cabo variando el número de etapas a fin de encontrar la relación de recirculación interna de las columnas que teniendo en cuenta los costes de capital (coste de la columna) y de operación (consumo de vapor LPS en el reboiler y agua de refrigeración en el condensador) consigan el mínimo coste. Se utilizarán los costes de estos servicios de la Tabla 23 y el coste de capital será el aproximado por el mismo software calculado con la herramienta Aspen Economic Analysis.

Los cálculos pertinentes del diseño de los equipos se encuentran en el Anexo VI, en el apartado de resultados del diseño de equipos.

4.5.1 Procesos de dos pasos

Para el caso de estas dos plantas de los catalizadores de Ta_2O_3 y ZrO_2 , los equipos que quedan por optimizar son las columnas de destilación, determinando en este proceso el número de etapas, relación de recirculación y etapa de alimentación que deben ser aportados como datos en el diseño riguroso.

4.5.1.1 Planta de catalizador de Ta_2O_3

En esta planta, las columnas de destilación a optimizar serán las del enumeradas en el PFD del Anexo VI, es decir la B26, B18, B36 y B38.

Por lo tanto, en resumen, los parámetros obtenidos de ese análisis para estos 4 equipos son los siguientes:

Tabla 28 – Parámetros óptimos de los equipos de la planta del catalizador de Ta_2O_3

Nº Columna	N_{OPTIMO}	R_{OPTIMO}	N_{MIN}	R_{MIN}	$N_{ALIMENTACIÓN}$
B26	20	0,4100	7	0,3330	8
B18	22	0,3099	8	0,2316	14
B36	30	0,3133	10	0,2559	13
B38	30	1,3434	12	1,2027	16

4.5.1.2 Planta de catalizador de ZrO_2

En esta planta, las columnas de destilación a optimizar serán las del enumeradas en el PFD del Anexo VI, es decir la B5, B9, B19 y B10.

Por lo tanto, en resumen de lo anterior, los parámetros obtenidos de ese análisis para estos 4 equipos son los siguientes:

Tabla 29 – Parámetros óptimos de los equipos de la planta del catalizador de ZrO_2

Nº Columna	N_{OPTIMO}	R_{OPTIMO}	N_{MIN}	R_{MIN}	$N_{ALIMENTACIÓN}$
B5	18	0,2037	6	0,1458	12
B9	36	0,5943	15	0,4921	23
B19	40	0,1026	18	0,0164	19
B10	32	2,0367	14	1,8140	17

4.5.2 Proceso de un paso

En este caso, los equipos a optimizar serán las columnas de destilación, y en el caso de la planta que usa el catalizador de Y:Zn, se aportarán una serie de datos operativos de la planta que se indican en

este apartado, y no en el anterior, por no tener influencia en el balance de materia del proceso.

4.5.2.1 Planta decatalizador de Hf:Zn

En este caso, como el intercambiador de calor de entrada del líquido a la columna de absorción, junto con el separador de corrientes de etanol, ya se escogió para determinar el punto de operación nominal de operación, los únicos equipos que quedarían para ser optimizados serían las columnas de destilación como en los dos casos anteriores, en este caso nombradas en el PFD del Anexo VI como B9 y B6.

Por lo tanto, en resumen de lo anterior, los parámetros obtenidos de ese análisis para estos 2 equipos son los siguientes:

Tabla 30 – Parámetros óptimos de los equipos de la planta del catalizador de Hf:Zn

Nº Columna	N _{OPTIMO}	R _{OPTIMO}	N _{MIN}	R _{MIN}	N _{ALIMENTACIÓN}
B9	16	0,2378	3	0,2090	10
B6	18	0,6594	9	0,4434	10

4.5.2.2 Planta de catalizador de Y:Zn

Primero, antes de pasar a la optimización de las columnas, se debe determinar el valor de otras variables libres de la planta aún sin determinar, que aunque no afectan al balance de materia de la misma, son necesarias imponer antes de estudiar la optimización de las columnas por sí afectar en gran medida a este estudio.

Es el caso de la presión de descarga del compresor. El valor de esta será de 11,5 atmósferas, que es la presión mínima que se puede imponer para poder utilizar un refrigerante de -50 °C en el condensador de la columna de separación de etileno. Esta temperatura es la correspondiente a la mínima para utilizar refrigerantes provenientes de sistemas de generación simples y no en cascada, que implicaría más problemas en el diseño y en el coste.⁹²

Aprovechando toda esta presión que es conferida en el compresor, la corriente de colas de la primera columna se expandirá hasta una presión tal en la que pueda usarse agua de refrigeración en el condensador. Esta presión de operación de la segunda columna es 6,3 atm.

Por lo tanto, en resumen de lo anterior, los parámetros obtenidos de ese análisis para estas 2 columnas y la válvula y el compresor referente a la presión, son los siguientes:

Tabla 31 – Parámetros óptimos de los equipos de la planta del catalizador de Zn:Y

Nº Equipo	Tipo	POUT (atm)			
B6	Compresor	11,5			
B11	Válvula	6,3			
Nº Columna	N _{OPTIMO}	R _{OPTIMO}	N _{MIN}	R _{MIN}	N _{ALIMENTACIÓN}
B10	10	0,2031	4	0,1145	4
B12	12	0,1465	3	0,1046	4

4.6 DISEÑO RIGUROSO DE LOS PROCESOS

En este apartado se presentará el diseño definitivo del proceso incluida la integración energética del proceso y la purificación de los productos a hasta la concentración requerida, a partir de la simulación con AspenPlus. Los métodos termodinámicos utilizados serán el de NRTL para las plantas con catalizador de Ta₂O₃, ZrO₂ y Hf:Zn, mientras que para la de Y:Zn se utilizará el de SRK. En las plantas en la que exista destilación extractiva con DMF por la presencia de butenos (plantas con catalizador de Ta₂O₃ y Hf:Zn), se utilizará el método de Wilson.

La integración energética, en los 4 casos, solo se llevará a cabo en los reactores, con un intercambio regenerativo entre la corriente de entrada y salida con el ahorro de gas natural para precalentar la corriente de entrada al reactor hasta la temperatura de operación, ya que el reactor es isoterma. La razón principal de que solo se aplique la integración energética en los reactores es porque estos equipos, son grandes consumidores de gas natural que es un servicio caro, y su ahorro será muy conveniente para el aspecto económico, e incluso para el ambiental. Este gran consumo se justifica porque es el equipo de toda la planta que más caudal procesa, aumentando su dificultad de calentamiento. Por esta última razón, las corrientes con bajas temperatura no se integran porque en todos los casos, el caudal es muy pequeño y no merece la pena coste de añadir equipos de intercambio nuevos, para la recuperación de ese calor.

Tampoco se realizó esta integración energética de forma rigurosa por un análisis pinch, ya que al existir una gran diferencia en la naturaleza de los servicios utilizados (criogénicos, vapor, gases de combustión y agua de refrigeración), es más conveniente aplicar diferentes ΔT en los equipos de intercambio de calor dependiendo del servicio utilizado, en vez de utilizar uno para toda la planta como requiere dicho método de análisis.

Por otra parte, se añadió la zona de purificación de producto a los procesos ya concebidos en el apartado 4.2 para llegar a las concentraciones de venta de cada producto y subproducto en caso de que se requiera. Para el producto principal de 1,3-BD la concentración de venta es del 99% (molar), al igual que en el caso del Etileno y Propileno. Para el hidrógeno será del 90% (molar).

Esta última sección de las plantas de purificación del producto para llegar a la concentración deseada se excluyó del análisis de sensibilidad para la búsqueda del punto nominal puesto que era necesarios, en algunos casos, sistemas de separación complejos que no podían evaluarse con la herramienta de aspen DSTW, siendo necesario el uso de RadFrac, que complica demasiado el análisis de sensibilidad. Igualmente, como esta sección de la planta se encuentra fuera del lazo de recirculación, el aumento de caudal para los diferentes valores de purga de reactivo estudiados no aumenta significativamente como en el resto y por lo tanto su variabilidad de coste en el estudio sería bajo.

Por ello, en este apartado sí se incluyen ya todas las secciones de la planta con su explicación (ilustrados en los siguientes PFD) y los balances en el punto nominal de operación.

La notación de los elementos de las plantas en los PFD siguientes será de la siguiente forma: En los procesos de 2 pasos, se diferenciaron las plantas en 3 secciones, donde 1 es la planta de producción de acetaldehído, 2 la planta de producción del 1,3-Butadieno con el catalizador elegido y 3 la zona de purificación del producto. Mientras que en la de 1 paso, la sección 1 es la planta de producción del butadieno a partir del etanol donde se encuentra el catalizador elegido y 2 la zona de purificación del producto o de los productos.

Esta numeración puede observarse en la denominación de equipos que de forma genérica es la siguiente:

$$M - YXX$$

Donde:

- M: Es el tipo de equipo del que se trata, la cual puede ser entre otros: T (Torre), P (Bomba), F (Flash), C (compresor), E (intercambiador de calor) , H (Horno), R (Reactor).
- Y: Sección de la planta según la numeración explicada anteriormente.
- XX: Número de equipo en esa sección.

Por último, se presentarán los resultados de algunas características de los equipos utilizados en los procesos obtenidos de la simulación con AspenPlus. Estas características serán necesarias para conocer los consumos de servicios y los costes de inversión de los equipos, necesarios para el análisis económico completo de los procesos de los siguientes apartados.

4.6.1 Proceso de dos pasos

Los resultados definitivos de la simulación final de estos procesos son:

4.6.1.1 Planta con catalizador de Ta₂O₃

En la figura 15, se presenta el PFD de la planta que utiliza el catalizador de Ta₂O₃.

Para facilitar su comprensión, se presenta la Tabla 32 con la explicación de cada corriente de entrada y salida del diagrama:

Tabla 32 – Definición de corrientes E/S del PFD de la planta con catalizador Ta₂O₃

	Nº CORRIENTE	DEFINICIÓN
ENTRADA	1	Entrada de etanol fresco al reactor de acetaldehído
	15	Entrada de etanol fresco para lavado de hidrógeno
	50	Entrada fresca de DMF para destilación extractiva
SALIDA	12	Venteo de hidrógeno
	19	Hidrógeno para venta
	32	Aguas residuales
	41	Acetaldehído purgado
	48	Salida de butenos e impurezas separadas
	57	1,3-Butadieno purificado para su venta
	58 y 59	Venteo y separación de etileno y propileno

A continuación se muestra la figura 15 ya mencionada, donde se puede observar el funcionamiento del proceso a partir de su diagrama de flujo de procesos o PFD:

Diagrama de flujo de procesos definitivo

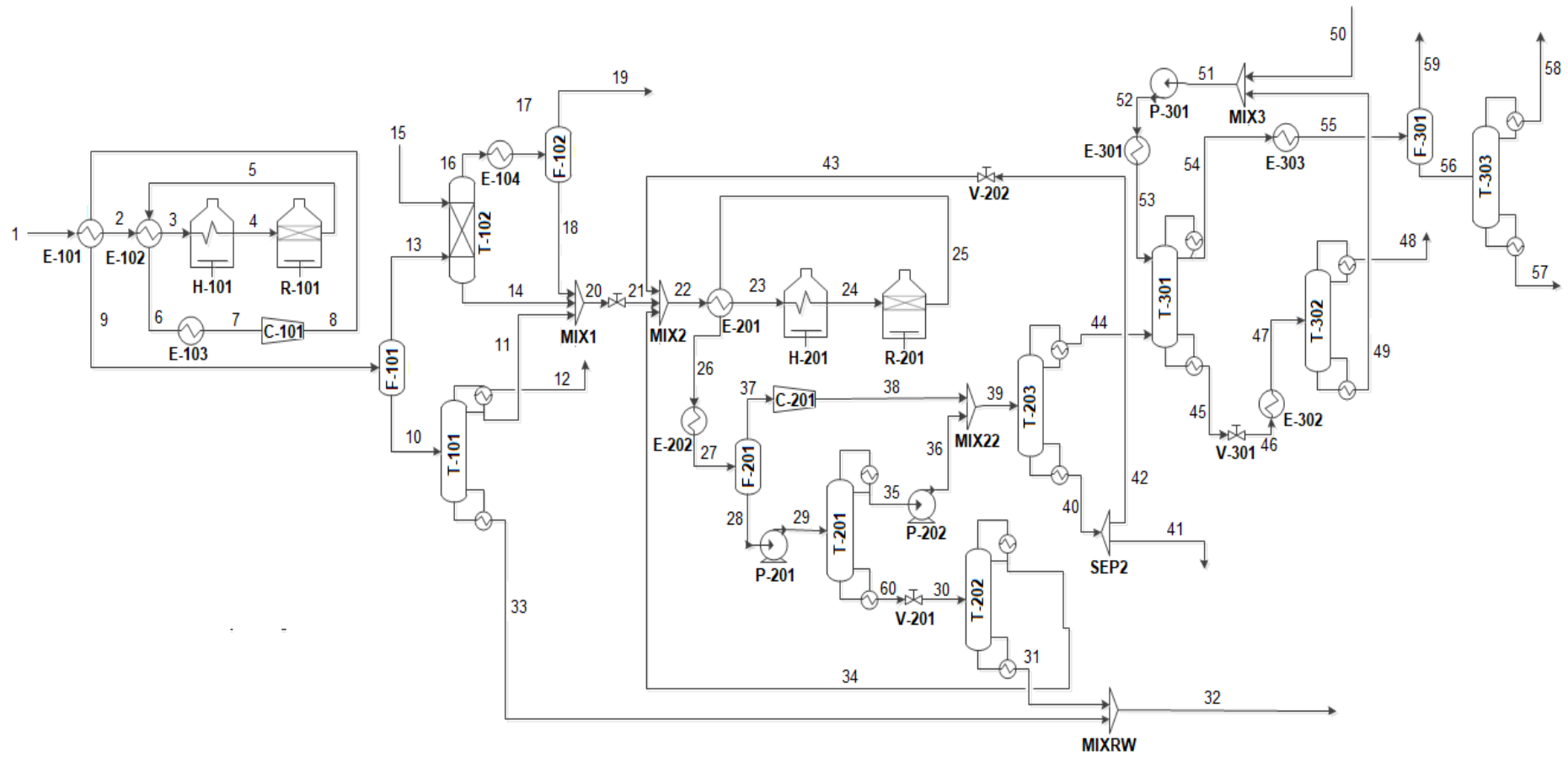


Figura 15 - PFD definitivo de la planta con catalizador de Ta_2O_3

Purificación del 1,3-butadieno

Esta planta con catalizador de Ta_2O_3 , tiene cierto problema para alcanzar la concentración del 99%, no solo por producir subproductos de bajo punto de ebullición como el etileno y el propileno (como se ve en las propiedades termodinámicas de los compuestos en la Tabla 16), sino también por la producción de butenos que al tratarse de compuesto muy parecidos al butadieno, no pueden separarse de este producto con una destilación convencional.

Por ello, es necesario utilizar una destilación extractiva con DMF (N, N-dimetilformamida), el cual posee una gran capacidad de disolución de estos butenos⁹³ y tiene un elevado punto de ebullición y por lo tanto es hace sencilla la separación del butadieno y de la posterior separación de los butenos.

Este sistema de purificación es el siguiente:

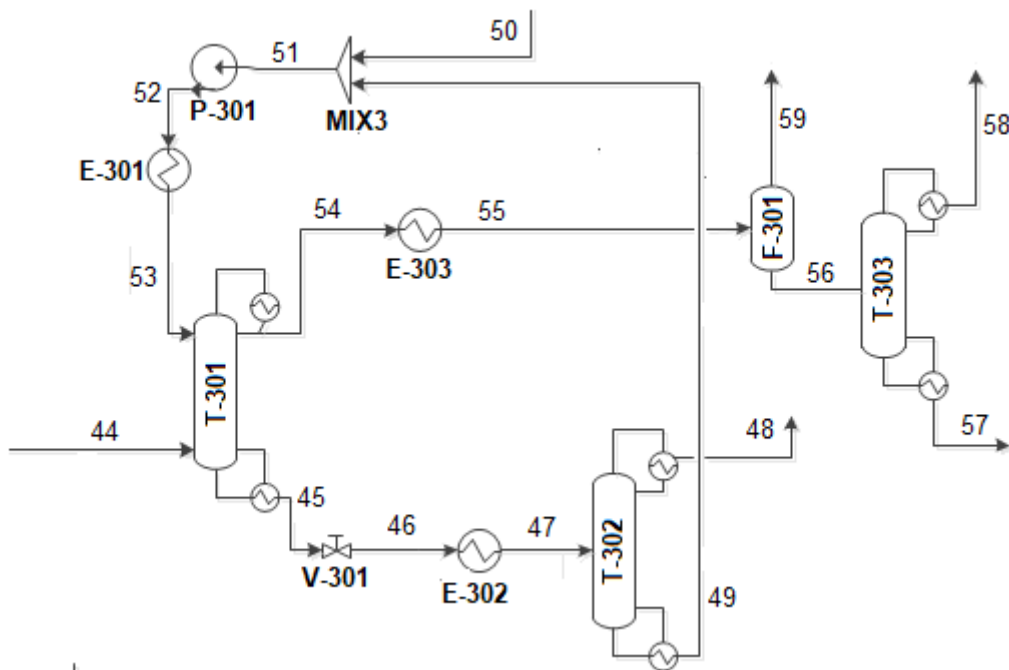


Figura 16 - PFD de la sección de purificación de 1,3-BD de la planta con catalizador de Ta_2O_3

Según el diagrama de la Figura 16 el butadieno con impurezas entra por la corriente 44, y es enviado a una columna de destilación extractiva con DMF (corriente 53). Esta columna trabaja a 4 atmósferas de presión, aprovechando que la corriente de entrada a este sistema tiene ese mismo valor de presión.

Una vez separados los butenos, el butadieno abandona la torre de destilación extractiva por cabeza, pero aún contiene cantidades significativas de etileno y propileno, por lo tanto es necesaria una última destilación antes del abandono del producto de la planta para alcanzar la pureza deseada, la cual se da en la torre T-303, donde ya se obtiene el producto purificado de butadieno por colas.

Volviendo a la torre de destilación extractiva (T-301), el DMF y los butenos abandonan la torre por colas. Para poder reutilizar el DMF en la T-301 y reducir el consumo de DMF. Este solvente es separado de los butenos y del resto de impurezas en la columna atmosférica T-302, posibilitando su recirculación a la T-301.

Puesto que la separación del DMF en la T-302 no es perfecta, es necesaria su reposición para mantener el caudal de DMF requerido, por ello se introduce solvente fresco con la corriente 50. Como esta corriente procede del exterior tendrá una presión de 1 atmósfera al igual que la corriente 50, ya que proviene de la columna T-301. Así, una vez se mezclen será necesaria una compresión con la bomba P-301. También deberá enfriarse en el E-301, debido a que para mejorar la destilación

siguiente, lo óptimo es que la corriente entre a la misma temperatura del plato donde se introduce.

El modelado de esta destilación, se llevará a cabo con el método termodinámico de Wilson, descrito en el Apartado 4.2.1 y los BIP presentados en el Anexo IV, y con los parámetros de diseño de la torre, encontrados en la bibliografía que se suponen que serán ya los óptimos

Balance de materia y energía

A continuación se muestra el balance de materia y energía global de la planta del catalizador de Ta₂O₃, donde se muestran solo los resultados de las corrientes de entrada y salida de la planta expuestas en la Tabla 33. Para ver el balance de materia completo de todas las corrientes de este proceso, acudir al Anexo VII.

Tabla 33 – Balance de materia y energía de la entradas y salidas de la planta de Ta₂O₃

N° CORRIENTE	Unidades	1	15	12	50	19	32	41	48	57	58	59
De:	-	Exterior	Exterior	T-101	Exterior	F-103	MIXRW	SEPAC	T-302	T-303	T-303	F-301
Hasta:	-	E-101	T-102	Exterior	MIX3	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior
Temperature	°C	20	20	35,88	20	0	99	68,33	140,7	37,54	-12,4	-15
Pressure	bar	1,01325	2,0265	2,027	1,01325	2,0265	1,01325	4,053	1,01325	4,053	4,053	4,053
Fracción Vapor mol	-	0	0	1	0	1	0,0031	0	1	0	1	1
Fracción Líquido mol	-	1	1	0	1	0	0,9969	1	0	1	0	0
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	78,3402	42,0687	0,0042	0	63,1544	96,0786	11,8502	13,0219	32,578	0,9	11,5223
ETANOL	kmol/h	69,7463	37,4537	0	0	0,1863	0,7246	0,6781	0	0	0	0
AGUA	kmol/h	8,5939	4,6149	0	0	0,0301	88,7693	0,3817	0,6908	0	0,0002	0
ACETALDE	kmol/h	0	0	0,002	0	4,2638	0	7,3277	0,3896	0	0	0
H2	kmol/h	0	0	0,0021	0	58,6738	0	0	0	0	0,0092	5,3202
BUTANONA	kmol/h	0	0	0	0	0	0,0003	0,2023	0	0	0	0
PESADOS	kmol/h	0	0	0	0	0	6,1308	0,0061	0	0	0	0
ACETONA	kmol/h	0	0	0	0	0,0005	0	0,2773	0	0	0	0
ACETATO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0,9932	0	0	0	0
13-BD	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0,0695	1,9879	32,2313	0,1634	1,8226
ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0,0001	0	0,4811	3,61
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0,0895	0	0,2458	0,7558
1-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0,0014	0,4513	0,0019	0	0,0001
2-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0,0933	0,0066	0,3408	0,0004	0,0136
CROTONAL	kmol/h	0	0	0	0	0	0,4537	0,001	0	0	0	0
DEE	kmol/h	0	0	0	0	0	0	1,8187	0	0	0	0
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kmol/h	0	0	0	9,4098	0	0	0	9,4062	0,0036	0	0

Características equipos

Por último, en este apartado se presentarán algunas características de los equipos presentes en la planta, utilizadas para el apartado 5.1.1.

Tabla 34 – Características intercambiadores de calor de la planta de catalizador de Ta₂O₃

ÍTEM	Área (m ²)	P (atm)	T _{MAX} (°C)	Duty (kW)	Utility
E-101	9,517	1	97,16	438,291	-
E-102	9,679	1	260	341,287	-
E-103	12,708	1	28,15	71,834	CW
E-104	150,677	2	20	347,31	Ref. -5 °C
E-201	98,737	1	350	3691,59	-
E-202	29,145	1	57,07	791,731	CW
E-301	36,968	4	147,11	1045,38	CW
E-302	8,480	1	149,3	786,728	CW
E-303	119,926	4	28,87	246,594	Ref. -20°C
H-101	10,626	1	1200	561,852	G.COMB
H-201	19,181	1	1200	570,338	G.COMB
R-101 ^a	20,946	1	1200	1043,07	G.COMB
R-201 ^a	6,313	1	1200	396,635	G.COMB

^a: Los reactores se tratan como intercambiadores de calor, ya que serán hornos con relleno de catalizador en los tubos para mantener la temperatura de reacción requerida.

Tabla 35 – Características bombas y compresores de la planta de catalizador de Ta₂O₃

ÍTEM	Caudal Vol. (L/min)	PIN (atm)	POUT (atm)	TIN (°C)	TOUT (°C)	Potencia (kW)	Altura (m)
C-201	25845,8	1	4	35	105,1	93,407	-
C-101	59318,5	1	2	46,76	97,16	97,796	-
P-201	175,1	1	2	35	35,08	0,69	12,638
P-202	59,0	2	4	35,35	35,66	0,64	26,633
P-301	326,6	1	4	146,83	147,11	1,655	37,88

Tabla 36 – Características tanques flash de la planta de catalizador de Ta₂O₃

ÍTEM	Volumen (m3)	Diámetro (m)	Altura (m)	Peso (kg)	P (atm)	T_{OPERAC} (°C)
F-301	2,402	0,914	3,658	1134	4	-15
F-103	2,402	0,914	3,658	1179,4	2	0
F-201	4,270	1,219	3,658	1542,2	1	35
F-101	4,270	1,219	3,658	1563,1	2	35

Tabla 37 – Características torres absorción/destilación de la planta de catalizador de Ta₂O₃

ÍTEM	N° Etapas	R	Diámetro (m)	Altura (m)	Peso (kg)	Condensador				Reboiler			
						Duty (kW)	T (°C)	Área (m ²)	Utility	Duty (kW)	T (°C)	Área (m ²)	Utility
T-202	30	0,32	0,762	15,85	5034,96	1716,07	77,15	33,01	CW	1805,38	98,71	16,14	LPS
T-101	20	0,41	0,4572	18,90	7938	318,728	35,88	31,67	CW	325,017	122,79	2,05	MPS
T-302	20	2,2	0,9144	19,51	14801	329,272	140,7	3,9	CW	765,624	151,762	100,6	MPS
T-301	20	2,2	1,0668	19,51	16896,6	550,728	28,87	69,75	Ref. 0°C	2120,12	189,19	53,59	MPS
T-201	22	0,31	0,4572	14,63	4082,4	624,496	35,35	65,823	CW	983,952	100,76	8,72	LPS
T-303	20	1	0,4572	19,51	10437,3	3,39	-12,4	1,09	Ref. -20°C	68,72	37,54	2,38	LPS
T-102	22	-	0,6096	23,16	12700,8	-	-	-	-	-	-	-	-
T-203	30	1,35	0,9144	15,85	6078,24	1583,48	35,94	148,22	CW	1466,17	68,33	15,17	LPS

4.6.1.2 Planta con catalizador de ZrO₂

En la figura 17, se presenta el PFD de la planta que utiliza el catalizador de ZrO₂.

Para facilitar su comprensión, se presenta la Tabla 38 con la explicación de cada corriente de entrada y salida del diagrama:

Tabla 38 – Definición de corrientes E/S del PFD de la planta con catalizador ZrO₂

	N° CORRIENTE	DEFINICIÓN
ENTRADA	1	Entrada de etanol fresco al reactor de acetaldehído
	14	Entrada de etanol fresco para lavado de hidrógeno
SALIDA	18	Hidrógeno para venta
	28	Separación flash de subproductos incondensables
	33	Aguas residuales
	40	Acetaldehído y Etanol purgado para combustible
	45	Separación de impurezas
	47	1,3-Butadieno purificado para su venta
	46	Separación de etileno y propileno

A continuación se muestra la figura 17 ya mencionada, donde se puede observar el funcionamiento del proceso a partir de su diagrama de flujo de procesos o PFD:

Diagrama de flujo de procesos definitivo

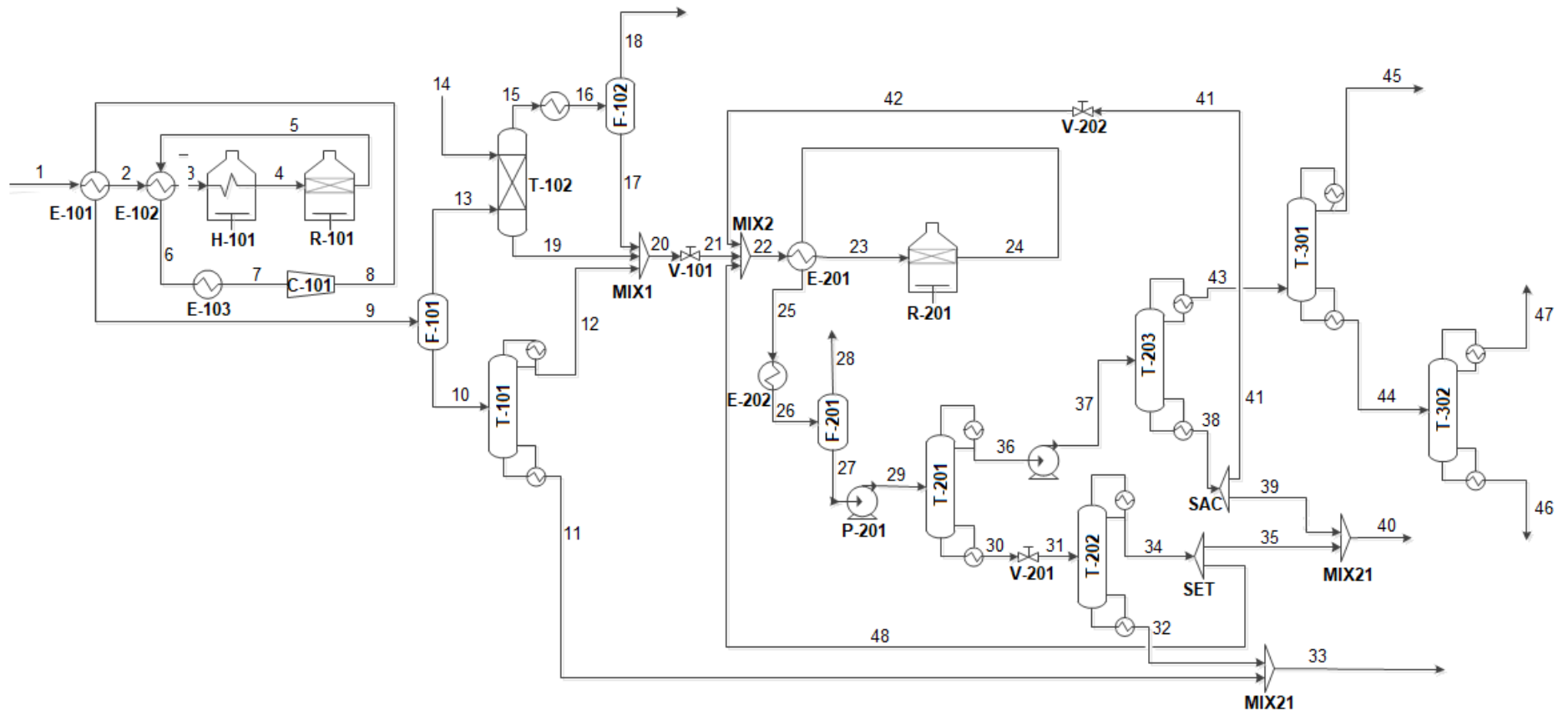


Figura 17 - PFD definitivo de la planta con catalizador de ZrO_2

Purificación del 1,3-butadieno

Al contrario que en el caso del catalizador de ZrO_2 , este catalizador no tiene subproductos difíciles de separar más allá de incondensables como el hidrógeno, el etileno o el propileno, por lo tanto la sección de purificación para la planta correspondiente a este catalizador es mucho más sencilla.

Este sistema de purificación es el siguiente:

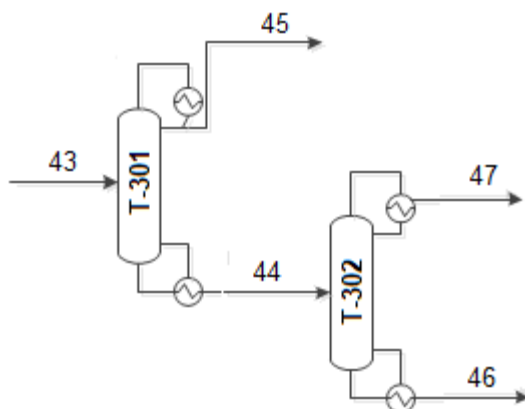


Figura 18 - PFD de la sección de purificación de 1,3-BD de la planta con catalizador de ZrO_2

Esta sección de la planta consiste en dos destilaciones simples en serie. En la primera, en la torre T-301, se separan los gases ligeros como etileno y propileno.

Posteriormente, en la torre T-302, es suficiente otra destilación simple para eliminar sobre todo trazas de acetaldehído que aún contiene la corriente, y así llegar a la concentración de venta fijada para el 1,3-BD de 99%.

Balance de materia y energía

A continuación se muestra el balance de materia y energía global de la planta del catalizador de ZrO_2 , donde se muestran solo los resultados de las corrientes de entrada y salida de la planta indicadas en la Tabla 38. Para ver el balance de materia completo de todas las corrientes acudir al Anexo VII.

Tabla 39 – Balance de materia y energía de la entradas y salidas de la planta de ZrO₂

N° CORRIENTE	Unidades	1	14	18	28	33	40	45	46	47
De:		Exterior	Exterior	F-102	F-201	MIX22	MIX21	T-301	T-302	T-302
Hasta:		E-101	T-102	Exterior	MIX21	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior
Fase		L	L	V	V	L+V	L+V	V	L	V
Temperatura	°C	20	20	-10	35	93,54	32,07	-12,3	53,03	46,37
Presión	bar	1,013	2,027	2,027	1,013	1,013	1,013	5,168	5,168	5,168
Fracción de Vapor molar		0	0	1	1	0,003	0,583	1	0	1
Fracción de Líquido molar		1	1	0	0	0,997	0,417	0	1	0
Densidad	kg/m ³	812,35	812,35	0,33	1,828	206,27	3,243	8,044	617,44	10,52
Entalpia de la corriente	Gcal/h	-5,0493	-2,9741	-0,1044	0,0081	-6,952	-0,5665	0,0077	0,0011	0,9805
Peso Molecular medio	kg/kmol	42,99	42,99	3,56	46,23	20,21	47,41	33,76	51,12	54,08
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	75,775	44,634	58,917	7,191	102,082	17,217	0,6	1,288	37
ETANOL	kmol/h	67,463	39,737	0,079	0,513	2,534	3,343	0	0	0
AGUA	kmol/h	8,3126	4,8963	0,0109	0,2353	96,1101	0,7982	0,0003	0	0,0011
ACETALDE	kmol/h	0	0	2,075	0,715	0	5,8359	0	0,3942	0,0034
H2	kmol/h	0	0	56,752	0,032	0	0,032	0,0004	0	0
BUTANONA	kmol/h	0	0	0	0,041	0	0,197	0	0	0
PESADOS	kmol/h	0	0	0	0,0007	2,809	0,00072	0	0	0
ACETONA	kmol/h	0	0	0,0002	0,012	0	0,151	0	0	0
ACETATO	kmol/h	0	0	0	0,044	0	0,702	0	0	0
13-BD	kmol/h	0	0	0	3,366	0	3,416	0,086	0,888	36,987
ETILENO	kmol/h	0	0	0	1,634	0	1,634	0,428	0	0,0073
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0,213	0	0,213	0,085	0	0,0015
DEE	kmol/h	0	0	0	0,385	0	0,894	0	0,0062	0
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0,63	0,0002	0	0	0

Características equipos

Por último, en este apartado se presentarán algunas características de los equipos presentes en la planta, utilizadas para el apartado 5.1.1.

Tabla 40 - Características intercambiadores de calor de la planta de catalizador de ZrO_2

ÍTEM	Área (m ²)	P (atm)	T _{MAX} (°C)	Duty (kW)	Utility
E-101	119,699812	2	97,17	424,082	-
E-102	143,357991	1	260	330,113	-
E-103	15,2044776	1	88,15	69,482	CW
E-104	149,38982	2	55,54	379,137	Ref. -15°C
E-201	160,183656	1	320	7253,15	-
E-202	68,2498494	1	59,08	1073,87	CW
H-101	10,4103412	1	1200	543,413	G.COMB
R-101 ^a	14,889507	1	1200	1008,92	G.COMB
R-201 ^a	14,042678	1	1200	545,732	G.COMB

^a: Los reactores se tratan como intercambiadores de calor, ya que serán hornos con relleno de catalizador en los tubos para mantener la temperatura de reacción requerida.

Tabla 41 - Características bombas y compresores de la planta de catalizador de ZrO_2

ÍTEM	Caudal vol (L/min)	P _{IN} (atm)	P _{OUT} (atm)	T _{IN} (°C)	T _{OUT} (°C)	Potencia (kW)	Altura (m)
C-101	57376,376	1	2	46,76	97,17	94,6122	-
P-201	455,796	1	3	35	35,15	2,558	28,801
P-202	127,182	3	5,1	36,04	36,33	1,124	31,245

Tabla 42 - Características tanques flash de la planta de catalizador de ZrO_2

ÍTEM	Volumen (m ³)	Diámetro (m)	Altura (m)	Peso (kg)	T _{OPERAC} (°C)	P (atm)
F-102	2,4019	0,9144	3,6576	1179,4	-10	2
F-201	6,0799	1,3716	4,1148	1859,8	35	1
F-101	2,4019	0,9144	3,6576	1179,4	35	2

Tabla 43 - Características torres absorción/destilación de la planta de catalizador de ZrO₂

ÍTEM	N° Etapas	R	Diámetro (m)	Altura (m)	P (atm)	Peso (kg)	CONDENSADOR				REBOILER			
							Duty (kW)	T (°C)	Area (m2)	Utility	Duty (kW)	T (°C)	Área (m2)	Utility
T-203	32	2,04	0,6096	29,8704	5,1	29121	664,6	35,16	59,688	CW	762,49	79,94	6,356	LPS
T-201	36	0,59	0,6096	33,528	3	40325	996,143	36,04	81,076	CW	2047,16	109,143	14,89	LPS
T-202	40	0,11	0,6096	37,1856	1	62869	3648,39	77,64	57,932	CW	3208,48	92,89	25,118	LPS
T-101	18	0,21	0,4572	17,6784	2	7303	301,943	37,94	20,51	CW	311,36	122,45	1,716	MPS
T-102	22	-	0,6096	23,1648	2	12701	-	-	-	-	-	-	-	-
T-301	25	2	0,4572	23,7744	5,1	18947	9,152	-12,3	7,816	Ref. -15	27,929	46,39	7,224	LPS
T-302	27	2	0,6096	25,6032	5,1	25515	399,852	46,37	33,398	CW	600,064	53,03	166,807	LPS

4.6.2 Proceso de un paso

Los resultados definitivos de la simulación final de estos procesos son:

4.6.2.1 Planta con catalizador de Hf:Zn

En la figura 19, se presenta el PFD de la planta que utiliza el catalizador de Hf:Zn.

Para facilitar su comprensión, se presenta la Tabla 44 con la explicación de cada corriente de entrada y salida del diagrama:

Tabla 44 - Definición de corrientes E/S del PFD de la planta con catalizador Hf:Zn

	Nº CORRIENTE	DEFINICIÓN
ENTRADAS	1	Entrada de etanol fresco a la planta
	32	Entrada fresca de DMF para destilación extractiva
SALIDAS	11	Separación impurezas para combustible
	24	Hidrógeno para venta
	25	Separación de orgánicos ligeros
	27	1,3-Butadieno purificado para su venta
	30	Salida de butenos e impurezas separadas
	36	Aguas residuales

A continuación se muestra la figura 19 ya mencionada, donde se puede observar el funcionamiento del proceso a partir de su diagrama de flujo de procesos o PFD:

Diagrama de flujo de procesos definitivo

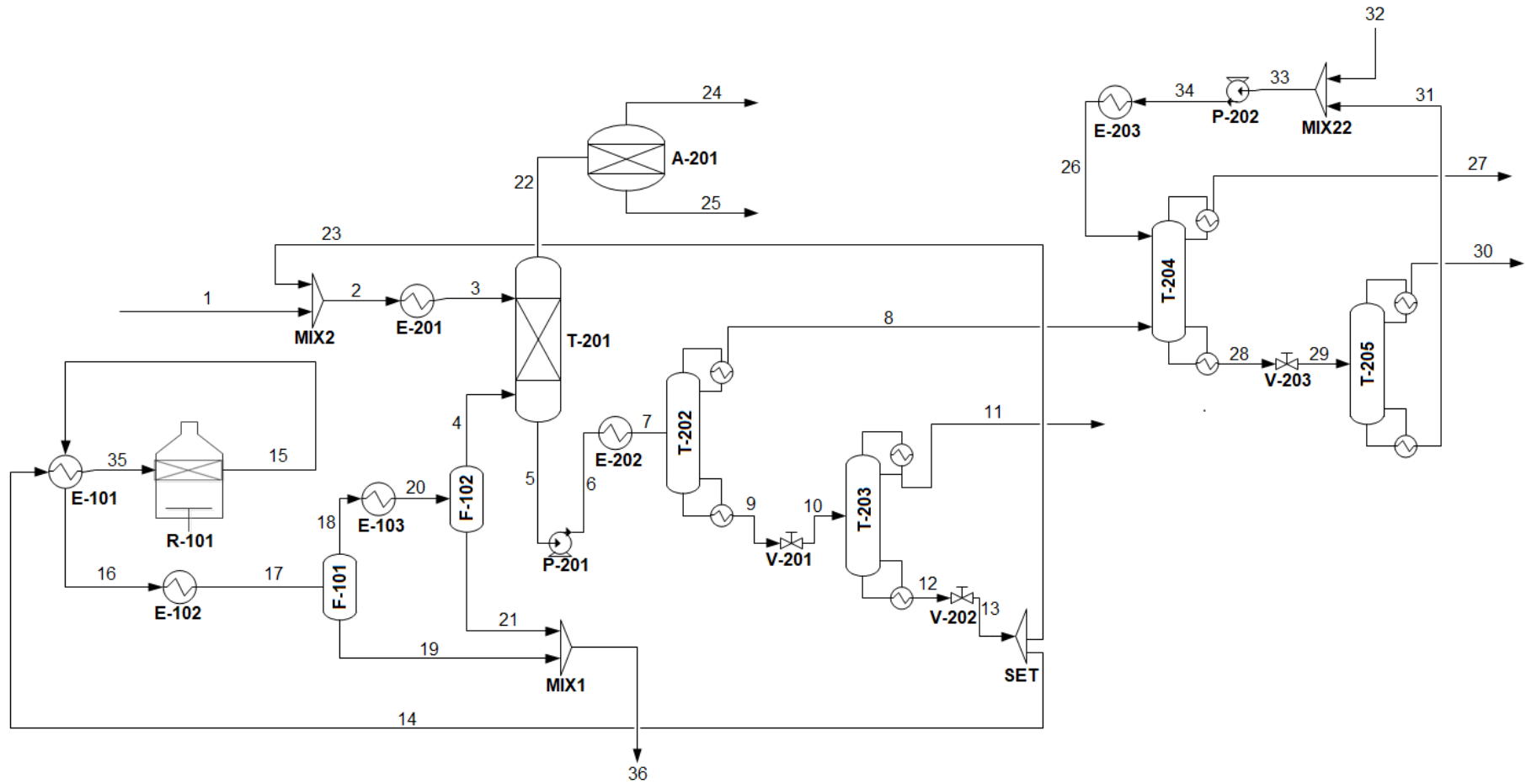


Figura 19 - PFD definitivo de la planta con catalizador de Hf:Zn

Purificación del 1,3-butadieno

Este catalizador, de la misma forma que ocurre con el de Ta₂O₃, tiene cierto problema para alcanzar la concentración del 99%, no solo por producir subproductos de bajo punto de ebullición como el etileno y el propileno, sino también por la producción de butenos que al tratarse de compuesto muy parecidos al butadieno, no pueden separarse de este producto con una destilación convencional.

Por ello, es necesario utilizar una destilación extractiva con DMF (N,N-dimetilformamida), el cual posee una gran capacidad de disolución de estos butenos⁹³ y tiene un elevado punto de ebullición y por lo tanto es hace sencilla la separación del butadieno y de la posterior separación de los butenos.

Este sistema de purificación es el siguiente:

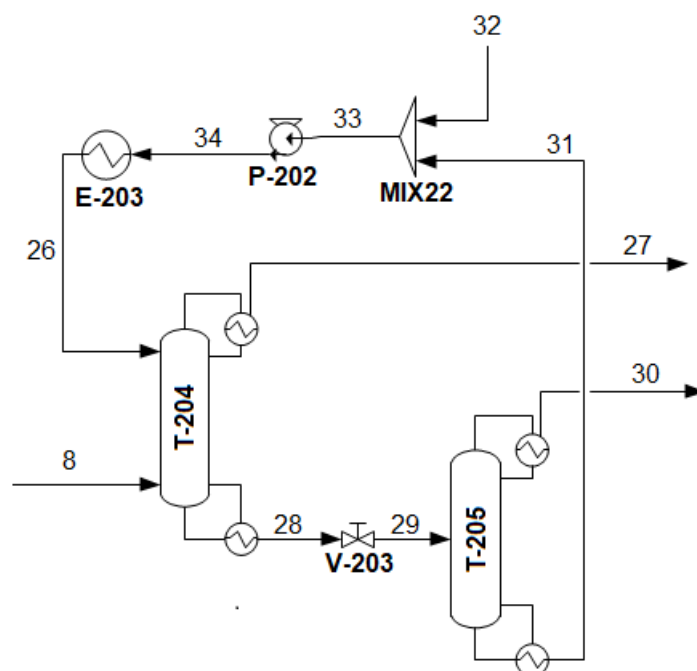


Figura 20 - PFD de la sección de purificación de 1,3-BD de la planta con catalizador de Hf:Zn

Según el diagrama de la Figura 20 el butadieno con impurezas entra por la corriente 8, y es enviado a una columna de destilación extractiva con DMF (corriente 26). Esta columna trabaja a 2 atmósferas de presión, aprovechando que la corriente de entrada a este sistema tiene ese mismo valor de presión.

Una vez separados los butenos, el butadieno ya a la concentración requerida del 99% abandona la torre de destilación extractiva (T-204) por cabeza. Por otro lado para poder reutilizar el DMF en la T-204 y reducir su consumo. Este solvente es separado de los butenos y del resto de impurezas en la columna atmosférica T-205, posibilitando su recirculación a la T-301.

Puesto que la separación del DMF en la T-302 no es perfecta, es necesario su reposición para mantener el caudal de DMF requerido, por ello se introduce solvente fresco con la corriente 32. Como esta corriente procede del exterior tendrá una presión de 1 atmósfera al igual que la corriente 31, ya que proviene de la columna T-205. Así, una vez se mezclen será necesaria una compresión con la bomba P-202. También deberá enfriarse en el E-301, debido a que para mejorar la destilación siguiente, lo óptimo es que la corriente entre a la misma temperatura del plato donde se introduce (primer plato), finalmente se debe conseguir una relación másica de DMF/C₄ de 8.

Para el modelado de la destilación extractiva con DMF se utilizó el método termodinámico de Wilson para que los datos fueran acordes con la bibliografía encontrada. Este método se encuentra descrito en el apartado 4.2.1. usando los BIP del Anexo IV.

Por otro lado, es necesario purificar el producto de hidrógeno, ya que este tipo de procesos de un paso, al realizarse todas las reacciones de producción de 1,3-butadieno a partir de etanol en el mismo reactor, se obtiene una mezcla de hidrógeno con gases orgánicos ligeros como etileno y propileno, por lo tanto, la operación unitaria para su separación más lógica es la absorción en un sistema PSA (Pressure Swing Adsorption).

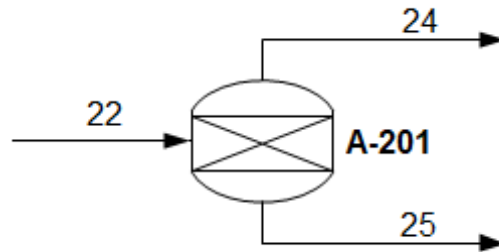


Figura 21 - PFD de la sección de purificación de hidrógeno de la planta con catalizador de Hf:Zn

Como se observa en la figura anterior, se introduce la corriente de hidrógeno con los restos de orgánicos ligeros en el sistema (corriente 22), consiguiendo con un adsorbente que en este caso podría tratarse de carbón activo, separar la fracción orgánica (corriente 25) y la fracción inorgánica (corriente 24).

Balance de materia y energía

A continuación se muestra el balance de materia y energía global de la planta del catalizador de Hf:Zn, donde se muestran solo los resultados de las corrientes de entrada y salida de la planta expuestas en la Tabla 44. Para ver el balance de materia completo de todas las corrientes acudir al Anexo VII.

Tabla 45 -Balance de materia y energía de las corrientes de E y S de la planta del catalizador de Hf:Zn

N° CORRIENTE	Unidad	1	32	11	24	25	27	30	36
De:		Exterior	Exterior	T-203	A-201	A-201	T-204	T-205	MIX1
Hasta:		MIX2	MIX22	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior
Fase		L	L	L	V	L+V	V	V	L
Temperatura	°C	20	20	53	-75	-13,38	14,74	131,69	32,47
Presión	bar	1,013	1,013	1,925	1,013	1,013	2,027	1,013	1,013
Fracción Vapor mol		0	0	0	1	0,963	1	1	0
Fracc. Líquido mol		1	1	1	0	0,037	0	0	1
Densidad	kg/m3	812,35	950,05	737,35	0,1	1,72	4,57	1,88	946,542
Entalpia corriente	Gcal/h	-8,023	-0,351	-0,239	-0,017	0,089	0,884	-0,437	-6,638
Peso Molec. medio	kg/kmol	42,992	73,095	44,901	2,026	35,332	53,958	62,556	23,81
FLUJO MOLAR TOT.	kmol/h	120,409	6,14	4,762	58,002	9,743	34,4	11,368	104,6307
ETANOL	kmol/h	107,2	0	2,045	0	0,34	0	2,065	0,7391
AGUA	kmol/h	13,209	0	0,281	0,038	0	0	0	92,5678
ACETALDE	kmol/h	0	0	1,911	0	0	0	1,311	0,8579
H2	kmol/h	0	0	0	57,965	0	0,03	0	0,0013
PESADOS	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	8,1611
13-BD	kmol/h	0	0	0,347	0	1,208	34,094	0,292	0,2711
ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	5,833	0,084	0	0,0006
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	2,356	0,093	0	0,0003
1-BUTENO	kmol/h	0	0	0,024	0	0	0,099	0,611	0,2355
2-BUTENO	kmol/h	0	0	0,053	0	0	0	0,608	0,308
DEE	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0,342	0,0148
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0,2041
BUTANAL	kmol/h	0	0	0,101	0	0,006	0	0	1,2691
DMF	kmol/h	0	6,14	0	0	0	0,002	6,138	0

Características equipos

Por último, en este apartado se presentarán algunas características de los equipos presentes en la planta.

Tabla 46 - Características intercambiadores de calor de la planta de catalizador de Hf:Zn

ÍTEM	Área (m ²)	P (atm)	Tmax (°C)	Duty (kW)	Utility
E-101	42,59	1	360	2273,12	-
E-102	34,45	1	235	2622,65	CW
E-103	29,73	1	35	137,02	Ref. -5°C
E-201	240,79	1	59,53	600,28	Ref. -25 °C
E-202	93,76	2	125	395,25	LPS
E-203	44,05	2	147,98	1059,47	CW
R-101 ^a	797,33	1	1200	3804,67	G.COMB

^a: El reactor se trata como intercambiador de calor, ya que será un horno con relleno de catalizador en los tubos para mantener la temperatura de reacción requerida.

Tabla 47 - Características bombas y compresores de la planta de catalizador de Hf:Zn

ÍTEM	Caudal Vol. (L/min)	PIN (atm)	POUT (atm)	TIN (°C)	TOUT (°C)	Potencia (kW)	Altura (m)
P-201	259,61	1	2	15,49	15,6	0,9043	13,1376
P-202	316,21	1	2	147,89	147,98	1,0435	12,6496

Tabla 48 - Características tanques flash de la planta de catalizador de Hf:Zn

ÍTEM	Volumen (m ³)	Diámetro (m)	Altura (m)	Peso (kg)	P (atm)	T _{OPERAC} (°C)
F-101	2,402	0,914	3,658	1179,3	1	35
F-102	2,402	0,914	3,658	1179,3	1	0

Tabla 49 - Características sistema PSA de la planta de catalizador de Hf:Zn

ÍTEM	Altura lecho (m)	Diámetro lecho (m)	Presión salida (atm)	Temperatura salida (°C)	Consumo eléctrico total (kW)
A-201	7,25 ⁹⁵	1,128 ⁹⁵	22 ⁹⁵	-77 ⁹⁵	994,96 ⁹⁶

Tabla 50 - Características torres absorción/destilación de la planta de catalizador de Hf:Zn

ÍTEM	N° Etapas	R	Diámetro (m)	Altura (m)	Peso (kg)	Condensador				Reboiler			
						Duty (kW)	T (°C)	Área (m ²)	Utility	Duty (kW)	T (°C)	Área (m ²)	Utility
T-201	20	-	0,61	21,3	5034,96	-	-	-	-	-	-	-	-
T-202	16	0,53	0,4572	15,8	10795,5	1306	41,08	84	CW	732,7	95,97	6,63	LPS
T-203	18	0,66	0,46	17,7	7257,5	48,89	53	1,765	CW	33,03	95,3	0,3	LPS
T-205	25	2,2	0,61	23,8	20062,4	268,9	131,7	3,24	CW	240,82	151,2	113	MPS
T-204	25	2,2	1,1	23,8	26331	14,7	507,2	159,1	Ref. -5°C	1684,7	161	591,9	MPS

4.6.2.2 Planta con catalizador de Y:Zn

A continuación, se presenta el PFD de la planta que utiliza el catalizador de Y:Zn.

Para facilitar su comprensión, se presenta la Tabla 51 con la explicación de las corrientes de entrada y salida del diagrama:

Tabla 51 - Definición de corrientes E/S del PFD de la planta con catalizador Y:Zn

	Nº CORRIENTE	DEFINICIÓN
ENTRADAS	1	Entrada de etanol fresco a la planta
SALIDAS	7	Aguas residuales
	8	Hidrógeno para venta
	13	Etileno para su venta
	16	Propileno para su venta
	17	1,3-Butadieno para su venta

A continuación se muestra la figura 22 ya mencionada, donde se puede observar el funcionamiento del proceso a partir de su diagrama de flujo de procesos o PFD:

Diagrama de flujo de procesos definitivo

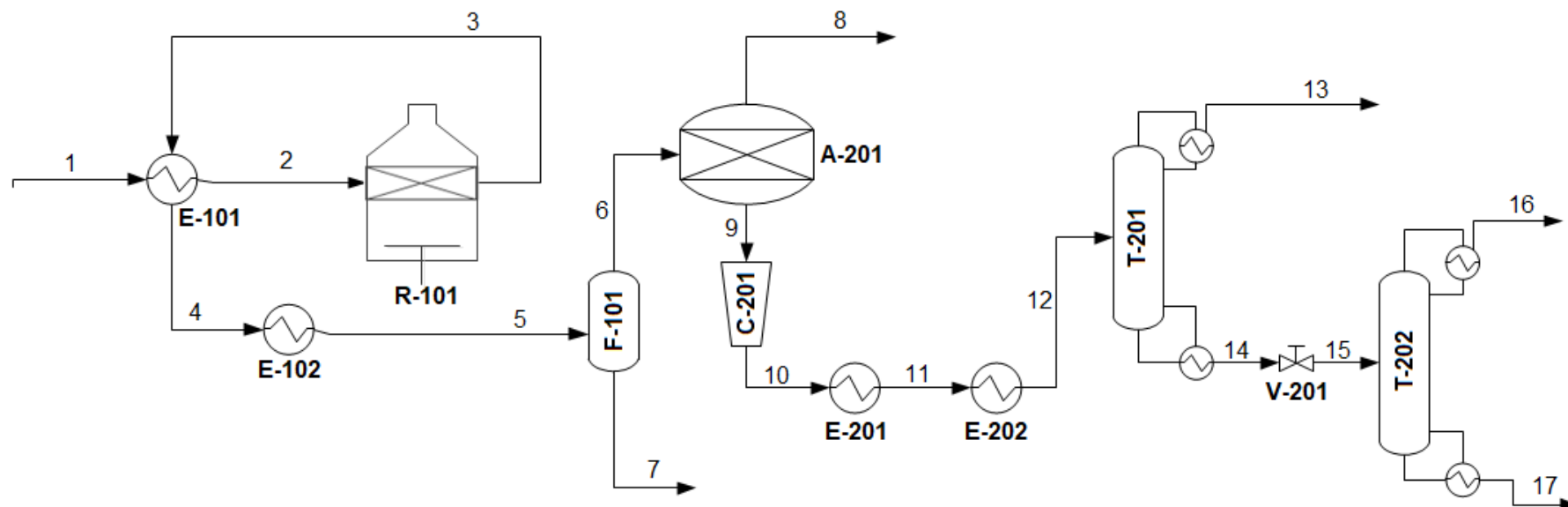


Figura 22 - PFD definitivo de la planta con catalizador de Y:Zn

Purificación del 1,3-butadieno

Para el caso de esta planta, no es necesario un sistema adicional de purificación de los productos, ya que la eficiencia de separación entre ellos mismos es lo suficiente para llegar a las concentraciones que hagan posible su venta.

Balance de materia y energía

A continuación se muestra el balance de materia y energía global de la planta del catalizador de Y:Zn, donde se muestran solo los resultados de las corrientes de entrada y salida de la planta expuestas en la Tabla 52 . Para ver el balance de materia completo de todas las corrientes acudir al Anexo VII.

Tabla 52 - Balance de materia y energía de las corrientes de entrada y salida de la planta del catalizador de Y:Zn

Numero Corriente	Unidades	1	7	8	13	16	17
De:		Exterior	F-101	A-101	T-201	T-202	T-202
Hasta:		E-101	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior	Exterior
Fase		L	L	L+V	L	V	L
Temperatura	°C	20	18,31	-77	-47,01	35,07	46,28
Presión	bar	1,013	1,013	22	11,65	6,38	6,38
Fracción Vapor molar		0	0	0,956	0	1	0
Fracción Líquido molar		1	1	0,044	1	0	1
Densidad	kg/m ³	820,12	1000,04	3,78	463,65	0,01	0,58
Entalpia de la corriente	cal/s	-2241681	-2295511	-55976	23270	14359	240999
Peso Molecular medio	kg/kmol	42,983	18,026	2,72	28,19	42,48	54,07
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	120,45	120,9	53,316	9,3136	9,100	40,766
ETANOL	kmol/h	107,2	0	0	0	0	0
AGUA	kmol/h	13,25	120,8631	2,3367	0	0	0
PROPILEN	kmol/h	0	0,0013	0	0,088	8,596	0,087
ETILENO	kmol/h	0	0,0010	0	9,2259	0,0932	0
H ₂	kmol/h	0	0,0008	50,9792	0	0	0
13BD	kmol/h	0	0,0336	0	0,0001	0,4109	40,6795

Características equipos

Por último, en este apartado se presentarán algunas características de los equipos presentes en la planta.

Tabla 53 - Características intercambiadores de calor de la planta de catalizador de Y:Zn

ÍTEM	Area (m ²)	P (atm)	Tmax (°C)	Duty (kW)	Utility
E-101	53,15	1	350	2371,98	-
E-102	9,22	1	52,34	194,01	CW
E-201	27,07	11,5	159,87	1535,33	CW
E-202	338,21	11,5	35	870,09	Ref.-25°C
R-101*	278,52	1	1200	1233,09	G.COMB

*: El reactor se trata como intercambiador de calor, ya que será un horno con relleno de catalizador en los tubos para mantener la temperatura de reacción requerida.

Tabla 54 - Características bombas y compresores de la planta de catalizador de Y:Zn

ÍTEM	Caudal Vol. (L/min)	PIN (atm)	POUT (atm)	TIN (°C)	TOUT (°C)	Potencia (kW)
C-201	24515	1	11,5	35	159,87	175,34

Tabla 55 - Características tanques flash de la planta de catalizador de Y:Zn

ÍTEM	Volumen (m ³)	Diámetro (m)	Altura (m)	Peso (kg)	P (atm)	T _{OPERAC} (°C)
F-101	2,402	0,914	3,66	1179,34	1	35

Tabla 56 - Características sistema PSA de la planta de catalizador de Y:Zn

ÍTEM	Altura lecho (m)	Diámetro lecho (m)	Presión salida (atm)	Temperatura salida (°C)	Consumo eléctrico total (kW)
A-201	7,25 ⁹⁵	1,542 ⁹⁵	22 ⁹⁵	-77 ⁹⁵	4035,71 ⁹⁶

Tabla 57 - Características torres absorción/destilación de la planta de catalizador de Y:Zn

ÍTEM	N° Etapas	R	Diámetro (m)	Altura (m)	Peso (kg)	Condensador				Reboiler			
						Duty (kW)	T (°C)	Área (m ²)	Utility	Duty (kW)	T (°C)	Área (m ²)	Utility
T-201	10	0,21	0,457	12,8	2041,2	34,84	-47	11,61	Ref.-50°C	1222,3	41,7	15,66	LPS
T-202	12	0,15	0,457	10,97	2721,6	76,91	35,07	8,38	CW	1069,4	46,28	12,49	LPS

4.7 VALORIZACIÓN ENERGÉTICA DE CORRIENTES RESIDUALES COMBUSTIBLES

Como se observa de los balances de materia anteriores, existen una serie de corrientes de salida de los procesos rica en compuestos orgánicos, que al estar en bajas cantidades, tienen poco valor y no merece la pena su venta como producto. Para darle una salida a estas corrientes, se propone su quema para aprovecharlas energéticamente. En este apartado se analizará el modo de empleo de estas corrientes y se determinarán los sistemas que consigan su aprovechamiento.

4.7.1 Análisis energético de las corrientes residuales combustibles

Estas corrientes utilizadas de combustible se pueden obtener del balance de materia del apartado 4.6, del subapartado de balance de materia de cada proceso, las cuales para cada planta son las siguientes:

Tabla 58 - Flujo de compuestos a combustible de cada planta

COMPUESTOS A COMBUSTIBLE (kmol/h)	PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
ETANOL	0,6781	3,856	4,45	0
AGUA	1,0727	1,0338	0,281	0
ACETALDE	7,7193	6,9451	3,222	0
H ₂	5,3315	0,0644	0	0
BUTANONA	0,2023	0,238	0	0
PESADOS	0,0061	0,00142	0	0
ACETONA	0,2773	0,163	0	0
ACETATO	0,9932	0,746	0	0
13-BD	4,0434	7,756	1,847	0
ETILENO	4,0912	3,696	5,833	0
PROPILEN	1,0911	0,511	2,356	0
1-BUTENO	0,4528	0	0,635	0
2-BUTENO	0,1139	0	0,661	0
BUTANAL	0	0	0,107	0
CROTONAL	0,001	0	0	0
DEE	1,8187	1,2852	0,342	0
BUTANOL	0	0,0002	0	0
DMF	9,4062	0	6,138	0

La tabla anterior es el resultado de las sumas de las corrientes orgánicas/combustibles residuales de las plantas las cuales son las 12, 41, 48, 58 y 59 para la planta de catalizador de Ta₂O₃, la 28, 40, 45 y 46 para la planta de ZrO₂ y la 11, 25 y 30 para la planta de catalizador de Hf:Zn. Para el caso de la planta de catalizador de Y:Zn, no existen corrientes residuales, ya que todas son para venta de producto, por ello tiene valor 0 en todos los casos.

Conocido este dato, sabiendo el calor de combustión de cada compuesto, es posible determinar el calor que generará la quema de cada compuesto de cada corriente. Cabe destacar que a este valor es necesario restarle el calor absorbido por la presencia de agua en esta corriente, por lo tanto, este calor no aprovechado se calcula, suponiendo que las corrientes entran en el horno a 100 °C y salen en forma de gases de combustión a 1200 °C:

$$Q = Q_{latente} + Q_{sensible} = F_{agua}(\Delta H_{vap} + C_p \cdot (1200 - 100))$$

Donde:

- F: Caudal de agua que va en el combustible
- Q: Absorbido por el agua introducida con el combustible (kW)
- ΔH_{VAP} : Calor de vaporización del agua 40,63 (kJ/kg)⁸⁹
- CP: Capacidad calorífica del vapor de agua 2,2 (kJ/kg·K)⁸⁹

Finalmente se obtiene lo presentado en la tabla 59:

Tabla 59 - Resultado de la quema de corrientes residuales de las plantas.

COMPUESTOS A COMBUSTIBLE (kmol/h)	$\Delta H_{C_{OMB}}$ (kJ/mol)	PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
		Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
ETANOL	1366,8	257,45	1463,99	1689,52	0
AGUA	-	-25,07	-24,16	-6,57	0
ACETALDE	1166,9	2502,13	2251,18	1044,38	0
H ₂	285,8	423,26	5,11	0	0
BUTANONA	2444,2	137,35	161,59	0	0
PESADOS	874,2	1,48	0,34	0	0
ACETONA	1789,9	137,87	81,04	0	0
ACETATO	2238,1	617,47	463,78	0	0
13-BD	2541,5	2854,53	5475,52	1303,93	0
ETILENO	1411,2	1603,75	1448,83	2286,54	0
PROPILEN	2058	623,75	292,12	1346,85	0
1-BUTENO	2716,8	341,71	0	479,21	0
2-BUTENO	2716,8	85,96	0	498,83	0
BUTANAL	2477,9	0	0	73,65	0
CROTONAL	2284,7	0,63	0	0,00	0
DEE	2723,9	1376,10	972,43	258,77	0
BUTANOL	2670	0	0,15	0	0
DMF	1941,6	5073,08	0	3310,43	0
CALOR NETO (kW)		16011,45	12591,94	12285,53	0
CALOR Efectivo (kW)		14410,30	11332,75	11056,98	0
CALOR SOBRENTE (kW)		8956,35	6968,13	5040,91	-1233,1

De la tabla anterior cabe destacar que el calor potencialmente producible por la quema de las corrientes (calor neto), no es del todo aprovechable, ya que existirán pérdidas por la evaporación del agua producida de la misma reacción de combustión. Es decir, el calor neto calculado será equivalente al PCS, y el calor efectivo PCI, donde este segundo puede calcularse como el 90% del primero.¹¹⁶

Restando este calor efectivo (aprovechable) al calor requerido para el calentamiento con gases de combustión en los procesos de los 3 primeros catalizadores, se observa un gran excedente de calor, contenido en esas corrientes residuales combustibles. Siendo el suficiente como para satisfacer la demanda de los hornos, e incluso sobrar (Calor sobrante en la tabla)

4.7.2 Generación de vapor.

En este apartado se pretende diseñar un sistema para la producción de vapor de media presión (MPS) y de baja (LPS), para el autoconsumo de estos en los procesos, a partir de los excedentes

de corrientes residuales combustibles producidas en las plantas.

Esta planta para la generación de vapor influirá en un mayor coste en el OPEX y CAPEX, pero tendrá como beneficio evitar la compra externa de servicios calientes como son el LPS y MPS, además de generar un beneficio extra por la venta de MPS que sobre del proceso.

También se utilizará esta planta para el aprovechamiento de los gases de combustión de salida de los reactores y los hornos de los procesos, que como se tuvo que mantener un ΔT mínimo de 10 °C, estos salen calientes de los hornos con un calor aún aprovechable en, por ejemplo esta panta de producción de vapor. Las diferentes temperaturas y caudales de estos gases son los siguientes:

Tabla 60 - Propiedades térmicas gases de combustión. de salida de los procesos de producción de 13BD

		CONSUMOS			
		Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
PASO 1°	Q_{GC} (kW)	1604,92	1552,33	3804,67	1233,09
	T_{GC} (°C)	270	270	370	360
	m_{GC} (kg/s)	2,252	2,178	6,102	1,950
PASO 2°	Q_{GC} (kW)	966,973	545,722	-	-
	T_{GC} (°C)	360	330	-	-
	m_{GC} (kg/s)	1,529	1,21	-	-
TOTAL	T_{GC} (°C)	306,12	291,31	370	360
	m_{GC} (kg/s)	3,781	3,388	6,102	1,950
	Q_{RO}^a (kW)	645,077	532,996	1386,3	425,902

^a: Calor máximo que pueden transferir estos gases suponiendo una temperatura de salida por chimenea de 120°C

De la tabla anterior se observa que casi en ningún caso estos gases pueden transferir el suficiente calor como para producir el vapor y cumplir sus requerimientos de consumo, por lo tanto, estos gases serán utilizados para el precalentamiento del agua para transformarla en vapor.

Una vez sabido esto, se presenta a continuación el diagrama de flujo de la planta de producción de vapor junto con una breve explicación de su funcionamiento.

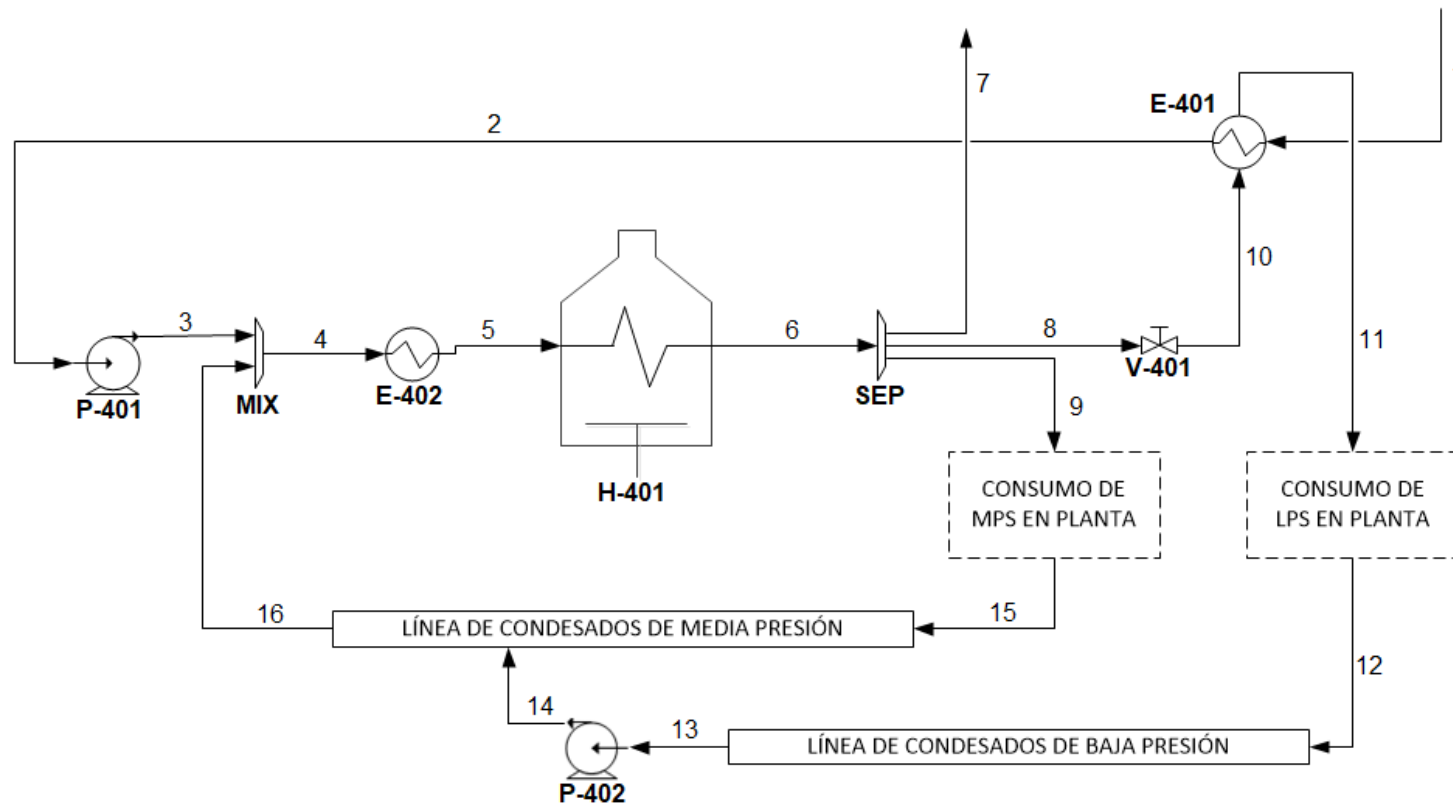


Figura 23 - PFD de la planta auxiliar de producción de vapor para los procesos de producción de butadieno

El funcionamiento de la planta de producción de vapor de la Figura 23 es el siguiente.

Por la corriente 1 se introduce el agua "fresca" a la planta para la producción de vapor en condiciones atmosféricas externas (20°C y 1 atm). La cantidad de agua introducida será (por balance global), igual que la cantidad de vapor vendida como vapor de MPS (corriente 7), cuya proporción por lo tanto vendrá dada evidentemente, por la energía disponible para quemar (ya restando la cantidad de energía que se va para la producción de los servicios calientes de la planta).

Posteriormente esta corriente se comprime hasta los 14 bar (presión del MPS), y se mezcla con los condensados de MPS que vienen de su uso en el proceso.

Tras la compresión, se precalientan en el E-402, lugar donde se introducirán los gases de combustión sobrantes de los hornos reactores de las plantas, que rondan unas temperaturas de entre 300 y 360 °C dependiendo de la planta. Ya en el horno H-401 se produce la evaporación total de la corriente al MPS.

En el siguiente separador (SEP), se diferencian tres corrientes, la 9 que será la cantidad necesaria de MPS que requiere el proceso, la corriente 8 que será la cantidad de vapor LPS para usar en el proceso y la corriente 7 que será el resto, y que será vendida al exterior.

Como la corriente 8 es para el requerimiento de LPS de las plantas, debe ser expandida hasta la presión del LPS (2,23 bar) y enfriada para no mandarla sobrecalentada al proceso de butadieno. Para conseguir este enfriamiento, se integra esta corriente con la de entrada del exterior (que viene fría) a través del intercambiador E-401.

Una vez consumido el LPS en el proceso, el condensado resultante se introduce en la P-402 para comprimir esta corriente y poder llevarla a la línea de condensados de media presión donde se encuentran los condensados del uso de MPS en el proceso.

Finalmente se obtuvieron los siguientes resultados con el simulador Aspen utilizando el método IAPWS-95, a partir de los resultados del Anexo X:

Tabla 61 - Vapor generado por la planta

	PLANTA CON CATALIZADOR DE:		
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn
MPS a venta(kg/h)	11.768,90	579,01	4.456,55
MPS para autoconsumo (kg/h)	852,26	572,21	3466,6
LPS para autoconsumo (kg/h)	502,45	10936,91	1910,45

De la tabla anterior se observa que el calor producido en la quema de las corrientes residuales es lo suficiente, no solo para evitar el uso de combustibles externos en los hornos/reactores, sino que también sobra para evitar la importación de servicios calientes (LPS y MPS) e incluso para vender vapor en calidad de MPS.

Como en el apartado anterior, se muestran las características de los equipos de las plantas de producción de vapor para cada caso que serán necesarias para el posterior análisis económico.

Tabla 62 - Características principales de las plantas de producción de vapor

			PLANTA CON CATALIZADOR DE:		
			Ta2O3	ZrO2	Hf:Zn
EQUIPOS	ÍTEM	Magnitud			
	E-101	Área (m2)	0,087	1,82723	0,30075
	E-102	Área (m2)	9,46921	15,7474	726,473
	P-201	Q (L/min) H (m)	196,5/132,7	9,67/132,7	70,6/132,9
	P-202	Q (L/min) H (m)	8,92/126,7	194,1/126,7	33,9/126,7
	H-101	Q (kW)	8959,35	6968,13	5040,91
CONSUMOS	Agua de caldera (kg/h)		11768,9	579,01	4456,55
	Electricidad (kW)		10,13978	9,22168	7,39949
	CW (kW)		0	229,673	0

Nótese de la tabla anterior que la planta de generación de vapor con los datos de la planta de catalizador de ZrO₂ necesita de agua de refrigeración, esto es porque no puede integrarse el E-401 con entre la corriente de agua fresca de la planta y el enfriador de la corriente de vapor de baja (LPS), porque el caudal de entrada de agua fresca en este caso es bajo.

5 ANÁLISIS ECONÓMICO

Una vez que se ha llevado a cabo el diseño de los 4 casos, y con todos los datos disponibles calculados, se procede en este apartado al análisis económico de estos. Como se ha descrito en la metodología, se realizará en primer lugar la estimación de los costes de capital, a continuación el cálculo de gastos e ingresos, para finalmente desarrollar proyecciones y evaluar la rentabilidad de los diferentes casos.

5.1 COSTES DE CAPITAL

En este apartado se pretende calcular los costes totales de inversión de las plantas. Para ello se seguirá el siguiente procedimiento utilizando diferentes correlaciones⁹⁷. El desarrollo del cálculo se encuentra detallado en el Anexo VIII:

5.1.1 Coste de los equipos

5.1.1.1 Intercambiadores de calor

Los costes de los equipos de intercambio de calor se calculan del siguiente modo, asumiendo que el material de construcción en todos los casos es de acero al carbono.

Para los intercambiadores de calor de cabezal fijo, que serán todos los intercambiadores de las corrientes y los condensadores de las columnas de destilación serán:

$$C_E^0 = 2366,211 f_P \cdot \exp(0,10561 \cdot \ln(A) + 0,0681 \cdot \ln^2(A))$$

Por otro lado, los intercambiadores tipo Kettle, es decir, los reboiler de las columnas de destilación serán:

$$C_{REB}^0 = 7859,43 f_P \cdot \exp(0,10501 \cdot \ln(A) + 0,0681 \cdot \ln^2(A))$$

Por último, los hornos se calcularán, asumiendo acero al carbono como material de construcción, presión de operación atmosférica y horno de proceso de tipo cabina.

Los reactores, también se modelarán como los hornos, asumiendo que estos serán estructuralmente parecidos a estos equipos pero con sus tubos rellenos del catalizador. No existe un diseño real de estos reactores, ya que son catalizadores no usados actualmente de forma industrial. La decisión de modelarlo de esta forma no es más que por similitud con el tipo de reacción en el reformado de naftas (reacción gaseosa y endotérmica), donde sí se usan industrialmente estos hornos reactores⁵⁶:

$$C_{H/R}^0 = 234,7 \cdot Q^{0,86}$$

Donde:

- C_X^0 : Coste unitario del equipo no actualizado (\$)
- A: Magnitud característica del cálculo de coste para intercambiadores de calor de cabezal fijo y tipo Kettle, la cual será el área de transferencia de calor (m^2)
- f_p : Factor de presión de los equipos, siendo 1 para $P < 4$; 1,1 para $4 < P < 6$ o 1,25 para $6 < P < 7$ bar.
- Q: Magnitud característica del cálculo de coste para hornos, siendo esta la duty del equipo (kW)

5.1.1.2 Equipos de intercambio de energía mecánica

Esta familia de equipos cuyos costes se calcularán de la siguiente forma, son los compresores y las bombas respectivamente, asumiendo en ambos casos que se tratan de tipo centrífugo.

Para los compresores para gas, la correlación utilizada será:

$$C_C^0 = 9646,02 \cdot (Pot)^{0,62}$$

Para bombas para compresión de líquidos será:

$$C_P^0 = 17701,41 \cdot \exp\left(0,0266 \cdot \ln^2(Q_V \sqrt{H}) - 0,3667 \cdot \ln(Q_V \sqrt{H})\right)$$

Donde:

- Pot: Potencia eléctrica consumida por el compresor (kW)
- Q_V : Caudal volumétrico impulsado por la bomba (L/min)
- H: Altura de impulsión de la bomba (m)

5.1.1.3 Tanques flash

Para este caso, se tratarán estos equipos como vasijas verticales de material acero inoxidable 304 que es el más barato en el caso de estos equipos (ya que no existen correlaciones en esta literatura para tanques flash de aceros al carbono), cuyo coste unitario se calcula como:

$$C_E^0 = 15184,7151 \cdot \exp(-0,21655 \cdot \ln(W) + 0,04576 \cdot \ln^2(W)) + \\ + 167,2395 \cdot D^{0,7396} \cdot L^{0,7066}$$

Donde:

- W: Es el peso del equipo (kg)
- D: Diámetro del tanque (m)
- L: Altura del tanque (m)

5.1.1.4 Torres de destilación

Para el cálculos del cuerpo de la torre, se eligió como material de construcción acero inoxidable 304 que es el más barato (ya que no existen correlaciones en esta literatura para tanques flash de aceros al carbono) con tipos de platos perforados y con pérdida de carga nula (grosor de la carcasa de la torre uniforme), cuyo coste se calculó de la forma:

$$C_E^0 = 3540,437 \cdot \exp(0,18714 \cdot \ln(W) + 0,02488 \cdot \ln^2(W)) + \\ + N(516,995 + 82,3128 \cdot D)f_4 \cdot \exp(0,57054 \cdot D) + 1372,714 \cdot D^{0,6332} \cdot L^{0,8016}$$

Donde:

- W: Es el peso de la carcasa individual sin instalar (kg)
- N: Es el número de platos que tiene la torre
- D: Es el diámetro de la torre (m)
- L: Altura de la torre (m)
- f_4 : Factor de corrección del coste para las torres con $N < 20$, que se calcula como:

$$f_4 = \frac{2,25}{1,0414^N}$$

Cabe destacar que el coste anteriormente descrito corresponde al coste del cuerpo del equipo, correspondiente por los platos de la torre y la carcasa de este. En el caso de la destilación, habría que sumarle los costes del hervidor (Kettle) y el condensador (cabezal fijo), calculados con las correlaciones presentadas en el apartado de los equipos de transferencia de calor.

5.1.1.5 Pressure swing adsorption (PSA)

Para calcular el coste de este sistema en su conjunto en las plantas en la que esté presente este método de separación se utilizará la siguiente correlación¹⁰¹, contando como coste principal los lechos, cuyas dimensiones ya son conocidas de las tablas 49 y 56, a lo que además habría que sumarle el coste del compresor, ya que este sistema funciona a altas presiones. Se supondrá que el consumo eléctrico calculado en la misma tabla anteriormente mencionada será la consumida por el compresor, excluyendo el coste de los intercambiadores de refrigeración que también serán necesarios por tener un coste relativo mucho menor al compresor, por lo tanto se deberá usar en este coste la correlación del compresor ya presentada. Por lo tanto, finalmente será:

$$C_A^0 = C_0 \left(\frac{L}{L_0}\right)^{0,81} \cdot \left(\frac{D}{D_0}\right)^{1,05} + C_C^0$$

Donde:

- C_0 : Coste de referencia para las longitudes L_0 y D_0 (1000\$)¹⁰²
- L_0, D_0 : Longitud y diámetro de referencia (1,22 y 0,91 m respectivamente)¹⁰² L, D: Longitud y diámetro del lecho a calcular coste (m)

Una vez calculados los costes individuales de los equipos, es necesario actualizarlos a la inflación actual, puesto que estas correlaciones han sido obtenidas de bibliografía del año 2003. Por ello, la forma de actualizarlas a este año es la siguiente:

$$C_x = \frac{I_{2019}}{I_{2003}} \cdot C_x^0$$

Donde:

- C_x : Es el coste de cada equipo actualizado al año 2019 (\$)
- I_{2019} : Es el índice CEPSI del año 2019 que es igual a 602,2
- I_{2003} : Es el índice CEPSI del año 2003 que es igual a 401,7¹⁰³

5.1.2 Coste de instalación

Una vez calculado el coste individual, es necesario calcular el coste instalado, es decir, el coste del equipo más su instalación. Esto se puede realizar a través de un factor multiplicador diferente para cada tipo de equipo, este factor es el siguiente:

Tabla 63 - Factor multiplicador para el cálculo del coste instalado de los equipos

TIPO DE EQUIPO	FACTOR DE INSTALACIÓN (f_{INST})
Intercambiadores de calor	1,9
Compresores	1,3
Bombas	2,8
Tanques flash	1,7
Torres de destilación	3
Hornos	1,3

De ahí que:

$$\text{Coste. instalado}_x (\$) = C_x \cdot f_{INST}$$

5.1.3 Otros costes de inversión

Ya conocido el coste total instalado de los equipos, para llegar al coste de capital total de la planta, es necesario determinar los demás gastos que son necesarios acometer para la construcción de la planta como terrenos, sistemas auxiliares etc. Para ello, debido a la falta de información del resto de conceptos de la planta, es necesaria su aproximación.

Para la aproximación de estos conceptos se utilizará el método de Chilton¹⁰⁴, que a diferencia de otros métodos de estimación desgrana cada concepto adicional de inversión en la planta y tiene

un relativo bajo error de aproximación.

Para llevar a cabo este método a partir de los costes de equipos instalados, se multiplicarán por un factor elegido para el cálculo de cada concepto. Estos factores multiplicadores pueden ser los siguientes:

Tabla 64 - Factores multiplicadores para el método de Chilton

CONCEPTO	CONCEPTO MULTIPLICADOR	FACTOR MULTIPLICADOR
1. Coste equipos instalados	-	-
2. Tuberías del proceso:	1	
Sólidos	1	0,07 - 0,1
Sólidos/Fluidos	1	0,1 - 0,3
Fluidos	1	0,3 - 0,6
3. Instrumentación:	1	
Poca automatización	1	0,02 - 0,05
Algo automatización	1	0,05 - 0,01
Completa automatización	1	0,1 - 0,15
4. Edificios y terreno:	1	
Planta existente	1	0
Planta externa	1	0,05 - 0,2
Planta mixta	1	0,2 - 0,6
Planta interna	1	0,6 - 1
5. Auxiliares (potencia, vapor...):	1	
Ninguna	1	0
Extensión pequeña	1	0 - 0,05
Extensión grande	1	0,05- 0,25
Nuevas	1	0,25 - 1
6. Líneas exteriores:	1	
Unidad integrada	1	0 - 0,05
Unidad separada	1	0,05 - 0,15
Unidad dispersa	1	0,15 - 0,25
7. COSTE DIRECTO TOTAL = Σ CONCEPTOS (1 a 6)		
8. Ingeniería y Construcción	7	
Simple	7	0,2 - 0,35
Compleja	7	0,35 - 0,5
9. Contingencia y beneficio contratista	7	
Completado	7	0,1 - 0,2
Sujeto a cambios	7	0,2 - 0,3
Especulativo	7	0,3 - 0,5
10. Factor de tamaño	7	
Planta grande	7	0,05 - 0,15
Planta pequeña	7	0,15 - 0,35
Planta piloto	7	0,15 - 0,35
11. COSTE INDIRECTO = Σ CONCEPTOS (8 a 10)		
12. COSTE TOTAL FIJO = COSTE DIRECTOS + INDIRECTOS		

Los factores multiplicadores de la tabla 64 elegidos serán los siguiente para las plantas estudiadas:

- **CONCEPTO 2:** Como en este caso se trata de plantas de gases y líquidos en el caso de las 4 plantas, se tomará un valor medio del apartado de plantas de fluidos (0,45)
- **CONCEPTO 3:** En las plantas faltará la instrumentación para el control del proceso y mantener constantes las variables de operación, es decir, debe estar automatizado, pero se elegirá un valor bajo del apartado de automatización completa, puesto que las plantas tampoco requieren demasiado (0,1)
- **CONCEPTO 4:** Se elige el apartado de planta interna puesto que será una planta de nueva creación independiente de las que pueda tener a su alrededor, se tomó un valor medio de este apartado (0,8)
- **CONCEPTO 5:** De auxiliares se utilizará un valor medio de planta grande, puesto que esta planta necesita de corriente eléctrica, agua de refrigeración, vapor y refrigerantes sin tomar el apartado de "Nuevas" porque alguno de estos servicios puede ser importado de otras industrias (0,15).
- **CONCEPTO 6:** Se considera el apartado de unidad separada porque no es una unidad incluida en una industria más grande sino una independiente, pero se tomará un valor bajo de este apartado ya que deberá tener industrias cercanas que le suministren el bioetanol como materia prima y otras que le compren de los productos generados (0,05)
- **CONCEPTO 8:** La complejidad de la construcción e ingeniería será de complejidad media por tratarse de plantas de tamaño medio, por lo tanto se toma un valor de 0,35
- **CONCEPTO 9:** En contingencia y beneficio del contratista se tomará un valor medio del apartado Completado, puesto que no se tiene información de lo contrario (0,15).
- **CONCEPTO 10:** Como ya se indicó anteriormente, se puede decir que las 4 plantas tendrán un tamaño medio, por lo que se tomó el valor medio entre planta grande y pequeña (0,15)

Por último, quedaría como coste de inversión el capital circulante, es decir, aquella inversión inicial necesaria para poder poner en funcionamiento la planta al inicio de la actividad. Este coste se puede estimar como el 10 % de los costes fijos de inversión¹⁰⁵. Por lo tanto:

$$C.C = 0,1 \cdot CF$$

De ahí que finalmente, el cálculo del total de la inversión (suponiendo nulos los costes de arranque por no utilizarse maquinaria compleja en las plantas):

$$CAPEX = C.F + CC$$

5.1.4 Costes de capital de cada proceso

A continuación se presenta la tabla con los resultados de los diferentes costes de inversión de cada planta perteneciente a cada uno de los catalizadores estudiados:

Tabla 65 - Coste de inversión total de las plantas de cada catalizador

CONCEPTO	PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
	2 PASOS		1 PASO	
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
Coste equipos instalados	9.492.200,7	13.259.470,4	9.004.641,4	6.597.491,4
Tuberías del proceso	4.271.490,3	5.966.761,7	4.052.088,6	2.968.871,1
Instrumentación	949.220,1	1.325.947,0	900.464,1	659.749,1
Edificios y terreno	7.593.760,6	10.607.576,3	7.203.713,1	5.277.993,1
Auxiliares (potencia, vapor...)	1.423.830,1	1.988.920,6	1.350.696,2	989.623,7
Líneas exteriores	474.610,0	662.973,5	450.232,1	329.874,6
COSTE DIRECTO TOTAL	24.205.111,8	33.811.649,5	22.961.835,6	16.823.603,1
Ingeniería y Construcción	8.471.789,1	11.834.077,3	8.036.642,4	5.888.261,1
Conting. beneficio contratista	3.630.766,8	5.071.747,4	3.444.275,3	2.523.540,5
Factor de tamaño	3.630.766,8	5.071.747,4	3.444.275,3	2.523.540,5
COSTE INDIRECTO	15.733.322,7	21.977.572,2	14.925.193,1	10.935.342,0
COSTE TOTAL FIJO	39.938.434,4	55.789.221,7	37.887.028,7	27.758.945,1
CAPITAL CIRCULANTE	3.993.843,4	5.578.922,2	3.788.702,9	2.775.894,5
CAPEX	43.932.277,9	61.368.143,9	41.675.731,6	30.534.839,6

Se observa de la tabla anterior, que por lo general, los procesos con las plantas más extensas, que son las plantas de procesos de dos pasos (ya que divide la reacción en 2), tienen los costes de inversión más altos, siendo la planta que usa el catalizador de ZrO₂ la que más. Esto es debido a que, a pesar de ser la planta que usa el catalizador de Ta₂O₃ algo más compleja sobre todo en la zona de purificación del 1,3-BD, como la relación etanol/acetaldéhidó que requiere el catalizador de ZrO₂ es más alta, hace que la planta maneje caudales más altos, encareciendo el coste de los equipos.

La planta con el coste de inversión más bajo es la que usa el catalizador de Y:Zn, ya que en cuanto a extensión de planta es la más simple, y su número de equipos es mucho menor respecto a los otros.

5.2 COSTES DE PRODUCCIÓN

Una vez estimados los costes totales de inversión es necesario obtener los costes totales de producción. La estimación de este coste será determinado por el cálculo de los costes individuales que lo forman, y que posteriormente se presentarán.

Previo a ello, es necesario aportar una serie de datos para obtener cada uno de estos costes.

5.2.1 Costes variables

Con los apartados siguientes, es posible calcular los costes variables de producción (CVP) de las

4 plantas. Posteriormente, para determinar completamente este valor de coste de producción, es necesario incluir también los costes fijos, cuyo método se presenta en el apartado 5.2.2.

5.2.1.1 Coste de materias primas

Aquí se mostrará el cálculo de los costes asociados al consumo de materia prima, que en todas las plantas es el etanol y el DMF para aquellas plantas que lo requieran. Para ello se muestran en la siguiente tabla sus precios en Noviembre de 2019.

Tabla 66 - Coste de la materia prima (Noviembre 2019)

MATERIA PRIMA	PRECIO
Bioetanol azeotrópico ¹⁰⁶	380 \$/m3
N,N-dimetilformamida (DMF) ¹⁰⁷	751,8 \$/t

Mientras tanto, el consumo de estos es el siguiente:

Tabla 67 - Consumo de materias primas de cada planta

	PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
Etanol azeotrópico (m3/h)	6,372	6,372	6,372	6,372
DMF (t/a)	5.502,4	0	3.590,4	0

5.2.1.2 Costes de servicios

Por otro lado, el coste de los servicios u Utilities, será determinado a partir de las correlaciones presentadas en el Apartado 4.4. Previo a ello, es necesario conocer los consumos de cada servicio por cada planta, ya que este es un dato a introducir en las correlaciones, puesto que dependiendo la cantidad que se requiera tendrá un coste u otro el servicio, los consumos presentados en la tabla 68, no incluyen el autoconsumo por la quema de las corrientes residuales combustibles (que evita el uso de gas natural y del vapor en las plantas que opten por lo comentado anteriormente). Para homogeneizar los costes de los servicios para las plantas y facilitar el análisis, se tomará el valor de consumo de servicio máximo de las cuatro plantas, para el cálculo de los siguientes precios. Por lo tanto:

Tabla 68 - Consumo de servicios de cada planta

		PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
		Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
SERVICIOS FRIOS (kW)	CW	8.041,816	7.154,28	5.305,91	1.806,25
	Ref. 0°C	2.120,12	0	0	0
	Ref. -5°C	347,31	0	151,72	0
	Ref. -15°C	0	407,066	0	0
	Ref. -20°C	68,72	0	600,28	0
	Ref. -25°C	0	0	0	870,09
	Ref. -50°C	0	0	0	34,84
SERVICIOS CALIENTES (kW)	G.COMB	2.571,895	2.098,065	3.804,67	1.233,09
	MPS	463,742	311,36	1.925,52	0
	LPS	305,34	6.646,12	1.160,98	2.291,7
Electricidad (kW)		194,19	98,29	996,91	4.211,05
Aguas a tratamiento (kg/h)		2.032,6	1.900,1	2.382,5	2.179,3
Residuos Sólidos (kg/año)		1.407,3	1.798,5	1.436,8	3.292,4

Una vez conocidos los consumos de servicios, se presenta en la siguiente tabla con los precios de cada uno:

Tabla 69 - Precio de los servicios utilizados en cada planta

		Precio	Unidades
SERVICIOS FRIOS	CW	$1,80 \cdot 10^{-6}$	\$/kJ
	Ref. 0°C	$2,54 \cdot 10^{-6}$	\$/kJ
	Ref. -5°C	$2,87 \cdot 10^{-6}$	\$/kJ
	Ref. -15°C	$3,44 \cdot 10^{-6}$	\$/kJ
	Ref. -20°C	$3,76 \cdot 10^{-6}$	\$/kJ
	Ref. -25°C	$4,13 \cdot 10^{-6}$	\$/kJ
	Ref. -50°C	$8,28 \cdot 10^{-6}$	\$/kJ
SERVICIOS CALIENTES	G.COMB^a	$1,99 \cdot 10^{-5}$	\$/kJ
	MPS	$1,53 \cdot 10^{-5}$	\$/kJ
	LPS	$8,18 \cdot 10^{-6}$	\$/kJ
Electricidad		$1,13 \cdot 10^{-1}$	\$/kWh
Aguas a tratamiento		$9,51 \cdot 10^{-1}$	\$/m ³
Gestión de residuos (catalizadores gastados)		1,2044	\$/kg
Gas Natural¹⁰⁹		$1,39 \cdot 10^{-5}$	\$/kJ

^a: El calentamiento con gases de combustión se supone será de 0,7 kJ por kJ de gas natural quemado, por lo tanto, precio del gas natural por 70% es el precio de calentamiento con gases de

5.2.1.3 Costes de catalizadores

Por último, como costes de materiales, es necesario incluir el consumo de los catalizadores, que como se estimó que estos serán reemplazados cada 5 años de operación. Por lo tanto el consumo de estos se puede calcular como:

$$Gasto.Cat \left(\frac{kg}{años} \right) = \frac{m_{ET.RQ.i}}{WHSV_i}$$

Donde:

- $WHSV_i$: Velocidad espacial del catalizador i
- $m_{ET.RQ.i}$: Caudal de entrada de etanol al reactor que contiene el catalizador "i" (kg/h)

De ahí que:

Tabla 70 - Coste y consumo de catalizador para cada una de las plantas

		PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
		Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
1 ^{er} PASO	m_{ET.RQ} (kg/h)^a	3.213,14	3.107,9	4.597,81	4.938,6
	WHSV (1/h)	2,4	2,4	0,64	0,3
	Gasto.Cat (kg/año)	267,8	259	1.436,8	3.292,4
	Precio Cat (\$/kg)	116,98	116,98	7,32	11,43
	Coste Cat (\$/año)	31.322,76	30.296,85	10.517,49	37.632,13
2 ^o PASO	m_{ET.RQ} (kg/h)^a	5.697,56	1.3855,7	-	-
	WHSV (1/h)	1	1,8	-	-
	Cosum. Cat	1.139,512	1.539,52222	-	-
	Precio Cat (\$/kg)	95,48	16,46	-	-
	Coste Cat(\$/año)	108.800,61	25.340,54	-	-
COSTE TOTAL (\$/año)		140.123,37	56.663,3	10.517,49	37.632,13

^a: Caudal másico de etanol de entrada al reactor (ver en Anexo VII)

5.2.1.4 Resumen de los costes variables de producción

En resumen de lo anterior se presenta la siguiente tabla:

Tabla 71 - Coste variables de cada planta

		PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
		Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
MATERIAS PRIMAS (\$/a)	Etanol	19.370.880	19.370.880	19.370.880	19.370.880
	DMF	4.136.704,32	0	2.699.262,72	0
SERVICIOS (\$/año)	CW	416.887,74	370.877,88	275.058,37	93.636,00
	Ref. 0°C	155.091,02	0	0	0
	Ref. -5°C	28.707,26	0	12.540,57	0
	Ref. -15°C	0	40.328,84	0	0
	Ref. -20°C	7.441,55	0,00	65.003,12	0
	Ref. -25°C	0	0	0	103.491,98
	Ref. -50°C	0	0	0	8.308,09
	G.COMB	1.474.004,46	1.202.443,0	2.180.532,47	706.708,54
	MPS	204.343,27	137.197,67	848.461,13	0
	LPS	71.933,22	1.565.719,53	273.508,31	539.887,85
	Electricidad	175.547,76	88.854,16	901.206,64	3.806.789,20
CATALIZADORES (\$/año)		140.123,37	56.663,30	10.517,49	37.632,13
TRATAMIENTO DE RESIDUOS (\$/a)	Agua Residual	15.464,02	14.455,96	18.126,06	16.580,11
	Resid. Sólid.	1.694,95	2.166,11	1.730,48	3.965,37

5.2.2 Costes operativos fijos

Aquí se incluirán los costes que no dependen directamente de la producción pero concurren en un gasto anual. Al no tener una dependencia directa de la producción, no es posible determinarla exactamente con los datos que se poseen de los procesos, es por ello, que es necesario estimarlos de otra forma, para ello se utilizarán los siguientes criterios de estimación según, Sinnott, 2005¹¹⁰. Se presentan en la tabla 72:

Tabla 72 - Valores para la estimación de los costes fijos de producción

CONCEPTO	VALOR ESTIMADO
1. Mantenimiento	8% del CAPEX
2. Mano de obra directa (MOD)	MOD
3. Costes de laboratorio	20% del MOD
4. Supervisión	20% del MOD
5. Dirección en planta	50% del MOD
6. Cargas de capital	15 % del CTI
7. Seguros	1% del CTI
8. Impuestos locales	2% del CTI
9. Royalties	1% del CTI
CFP = Σ (1 a 9)	
CG* = 30% del (CVP + CFP)	

* CG: Costes Generales, donde se incluyen gastos en I+D+i y costes de distribución

Como se muestra en la tabla anterior solo es necesario calcular la mano de obra directa (MOD), ya que el CAPEX total de las plantas se pueden tomar del apartado 5.1.4, donde se calculó.

Se puede estimar que el número de trabajadores de mano de obra directa será de 11¹¹¹ en planta, por lo tanto se necesitan 55 para poder cubrir las 24 horas (5 turnos), para la producción de butadieno de las plantas, cobrando un salario anual medio de 62690 \$¹¹² por lo tanto, el coste de la mano de obra directa o MOD será de 344795 \$/año.

Por lo tanto:

Tabla 73 - Costes fijos de producción de cada planta

		PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
		Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
COSTES FIJOS DE PRODUCCIÓN	1	234.304	327.296	222.272	162.856
	2	344.795	344.795	344.795	344.795
	3	137.920	137.920	137.920	137.920
	4	137.920	137.920	137.920	137.920
	5	344.792	344.792	344.792	344.792
	6	292.880	409.120	277.840	203.568
	7	29.288	40.912	27.784	20.360
	8	58.576	81.824	55.568	40.712
	9	29.288	40.912	27.784	20.360
COSTES GENERALES		844.728	751.944	857.448	793.912

5.2.3 Costes de producción total de cada proceso

Finalmente, el coste total de producción o OPEX es el siguiente:

$$OPEX = CFP + CVP + CG$$

A continuación se presenta la tabla con los resultados de los diferentes costes de producción totales de cada planta perteneciente a cada uno de los catalizadores estudiados:

Tabla 74 - Costes de producción totales de cada caso

	PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
OPEX (\$/año)	29.002.327,8	25.816.859,3	29.439.123,7	27.257.715
OPEX (\$/t_{13-BD})^a	2.060,62	1.615,17	1.980,99	1.547,62

a: Tomando valor de producción de 13BD de cada planta (Tabla 75)

5.3 INGRESOS

5.3.1 Venta de productos

Una vez conocidos los costes de las 4 plantas, es necesario determinar los ingresos monetarios de estas plantas por la venta de productos y subproductos.

Por ello, se muestra la siguiente tabla para analizar la productividad de cada planta:

Tabla 75 - Generación de productos de las plantas (t/año)

	PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
13BD	14074,56	15984	14860,8	17612,6
H2	15,7875	8,6	14,5	13,329
ETILENO	0	0	0	32,599
PROPILENO	0	0	0	47,775

Cuyos precios de mercado (de China, por disponibilidad de información) son los siguientes para la fecha de concepción de este estudio:

Tabla 76 - Precio de venta de los productos (Noviembre 2019)

PRODUCTO	PRECIO
1,3-Butadieno ¹¹³	80,35 \$/kmol
Hidrógeno ⁶⁹	4,72 \$/kmol
Etileno ¹¹⁴	21,4 \$/kmol
Propileno ¹¹⁵	44,3 \$/kmol

5.4 COSTES E INGRESOS DE LA PRODUCCIÓN DE VAPOR

Como ya se vio en el apartado 4.7, el vapor producido es el suficiente para el autoconsumo en las plantas y para la venta de vapor. Esto tendrá una repercusión positiva en los ingresos de los procesos aunque por otro lado supondrá una serie de costes por la implementación de este proceso auxiliar. En este apartado, se hará una estimación de los aspectos económicos de estos procesos para los 3 casos en los que se aplica, para así conseguir todos los datos necesarios para el análisis económico.

5.4.1 Costes de la producción de vapor

Por otro lado, para el cálculo del CAPEX y el OPEX se aplicarán los métodos descritos en los apartados 5.1 y 5.2., además de Utilizar los datos aportados en el apartado 4.7.2 del diseño de las plantas de vapor.

Por lo tanto, se obtienen los siguientes resultados de costes. Para ver el detalle del cálculo siguiente ir al Anexo IX:

Tabla 77 - Costes de las plantas de producción de vapor

	PLANTA CON CATALIZADOR DE:		
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn
CAPEX (\$)	3.429.078,18	2.804.944,67	2.852.271,84
OPEX (\$/año)	1.178.633,18	636.626,59	861.017,76

5.4.2 Ingresos de la producción de vapor

Por otro lado, conocidos los datos que se aportaron en la Tabla 62 de producción de vapor, y conocidos los precios del MPS y LPS de la Tabla 69, es fácil calcular los siguientes datos:

Tabla 78 - Ingresos generados por la planta de generación de vapor

	PLANTA CON CATALIZADOR DE:		
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn
Cantidad (kg/h)	11.768,90	579,01	4.456,55
Ingreso por venta (\$/año)	2.821.063,09	138.791,54	1.068.256,91
Ahorro GC (\$/año)	1.471.253,27	1.200.198,68	2.176.462,56
Ahorro LPS (\$/año)	204.288,35	137.160,79	848.233,06
Ahorro MPS (\$/año)	71.913,35	1.565.287,69	273.432,75
Ingreso por autoconsumo (\$/año)	1.747.454,96	2.902.647,16	3.298.128,37
INGRESO TOTAL (\$/año)	4.568.518,05	3.041.438,70	4.366.385,28

5.5 EVALUACIÓN DE LA RENTABILIDAD DE LOS PROCESOS

En este apartado se pretende evaluar la viabilidad económica de llevar a cabo los proyectos que incluirían los 4 casos estudiados. Para ello lo primero es desarrollar las proyecciones económicas de los procesos a partir de flujos de caja y utilizando herramientas de cálculo como el valor actual neto (VAN) o la tasa interna de retorno (TIR).

5.5.1 Cálculo del VAN y la TIR de los procesos

El valor actual neto (VAN) es un criterio de inversión que consiste en actualizar los cobros y pagos de un proyecto o inversión para conocer la ganancia o pérdida con esa inversión, actualizando los flujos de caja a la fecha actual, jugando gran importancia la tasa de descuento considerada en el análisis.

Para evaluar los proyectos de los casos estudiados se utilizará la herramienta de valor actual neto o VAN. Para ello se realizarán unas proyecciones en los cuatro casos calculando los flujos de caja para cada año entre el periodo de tiempo del proyecto. En este análisis se supone que la financiación del proyecto vendrá directamente de fondos propios, sin financiación externa. Este se calculará de la siguiente forma:

$$VAN = \sum_{t=1}^n \frac{CF_t}{(1+k)^t} - I_0$$

Donde:

- n: Es el periodo de duración del proyecto (años)
- t: Es el periodo de tiempo concreto de la vida del proyecto (años)
- CF_t: Es el flujo de caja conseguido en el momento t
- k: La tasa de descuento
- I₀: La inversión inicial (año 0)

Conocido esto, se aportan los siguientes datos necesarios para el cálculo de este valor:

Tabla 79 - Parámetros para el cálculo del VAN

PARÁMETRO	VALOR
Tasa de descuento (k)	10%
Periodo de duración de los proyectos (n)	15 años
Depreciación del inmovilizado	Lineal en 15 años
Periodo de construcción de las plantas	1 año
Tasa impositiva por impuesto de sociedades	25%

Por último, añadir que el valor de terrenos y edificios se devolverá íntegramente al final de la vida del proyecto ya que su es un inmovilizado que no pierde valor con el tiempo, no ocurriendo así con el resto de la inversión, que se depreciará de forma lineal durante la vida del proyecto, con un valor residual nulo al final del periodo. Para ver el análisis completo de las proyecciones financieras, ver el Anexo XI.

Por otro lado también se presentará el cálculo de la TIR o tasa interna de retorno, que viene a

exponer la tasa de descuento máxima para que, el proyecto se pueda considerar rentable, dicho de otra forma, la k que consigue un VAN igual a cero.

Sabiendo lo anterior, se obtiene:

Tabla 80 - VAN y TIR para cada caso

	PLANTA CON CATALIZADOR DE:			
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
VAN	-57.467.376 \$	-45.433.877 \$	-50.831.856 \$	6.594.167 \$
TIR	-	-6%	-	14%

De la tabla anterior, se observa que a efectos de los parámetros utilizados, y con el precio de mercado de butadieno y demás materias primas utilizados a fecha de realización de este proyecto (noviembre 2019), la única inversión que resulta interesante a efectos de rentabilidad es la planta con el catalizador de Y:Zn.

5.5.2 Precio mínimo de venta

Otra herramienta algo más intuitiva para determinar la rentabilidad, es la comparación entre el precio de mercado de butadieno real y el teórico que llevaría a considerar interesantes la inversión en estos procesos.

Para llegar a estos resultados, se indicó anteriormente que una inversión resulta interesante cuando su VAN es igual o mayor a cero (o la k igual a la TIR). Por ello, el precio mínimo de venta (PMV). Se calculó considerando el precio de los demás productos en las fechas actuales de este proyecto (Tabla 67). Llegándose a los siguientes resultados:

Tabla 81 - Precio mínimo de venta de butadieno para cada caso

	PLANTA CON CATALIZADO DE:			
	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
PMV (\$/t)	2107,41	1966,67	2014,82	1422,22
Precio Mercado (\$/t)	1487,96			

De la tabla anterior se observa que la única planta que resulta rentable al precio de mercado de los productos en fecha de realización de este proyecto (Noviembre 2019) mostrado en la Tabla 66 es la planta de Y:Zn y con un buen margen entre los dos precios, mientras tanto, en las otras plantas necesitarían de un mayor precio de venta para validar estos procesos para la producción industrial de este producto.

5.5.3 Análisis de sensibilidad respecto a productos y materias primas

Debido a la gran variabilidad de precios de mercado de los productos producidos en este procesos por su relación con los productos petrolíferos, como se observa en la Gráfica 1 se hace interesante un análisis de sensibilidad donde se muestren las rentabilidades económicas de los procesos según el rango de precios de los productos como el butadieno y las principales materias primas como el etanol, obteniendo así una visión más consistente y representativa de los casos evaluados, y no limitados a las circunstancias del año de estudio de este proyecto (2019).

Puesto que las vías de producción de butadieno expuestas en este trabajo (a partir de etanol), no es la vía mayoritaria de producción de este compuesto, el precio de etanol y butadieno no tienen una dependencia directa, alcanzando ambos precios de venta mínimos y máximos en momentos

diferentes. En cambio, sí que existe una relación más directa entre el precio del etanol y el del petróleo, puesto que el etanol es ampliamente utilizado como fuente energética, al igual que el otro. Esto puede verse en las siguientes gráficas:



Gráfica 12 - Precio mercado petróleo WTI (izquierda, \$/barril) vs etanol (derecha, \$/gal)¹⁰⁶

Los precios máximos históricos de butadieno y etanol son de 4200 \$ por tonelada en 2017²⁰ y de 909,1 \$/m³ en 2011 respectivamente¹⁰⁶.

Por otro lado los precios mínimos históricos alcanzan los 500 \$/t de media para el butadieno desde los inicios de los datos hasta aproximadamente el 2006¹⁰⁸. Además, el etanol baja hasta valores de 319,7 \$/m³ en el 2019¹⁰⁶.

5.5.3.1 Rentabilidad anual de los procesos

Como se comentó anteriormente, el precio de mercado de butadieno y etanol no se pueden correlacionar porque hoy en día la producción de 13-BD está basada en otras materias primas diferentes del etanol, como en el caso de los procesos estudiados aquí, por lo que sus precios serán dispares en la línea temporal mientras no se cumpla esa condición.

Por ello se analizará la rentabilidad a partir la TIR dependiendo del año para ver la evolución de la rentabilidad económica de los procesos en años posteriores al enfocado en este proyecto.

De las gráficas 1 y 3, se pueden obtener los siguientes valores:

Tabla 82 - Precio de venta del butadieno y el etanol según el año.

Año	Precio BD (\$/t)	Precio Et (\$/t)	Precio Et (\$/m³)
2009	540	427	350
2010	1968	479	393
2011	2381	619	508
2012	3492	574	471
2013	1810	627	514
2014	1524	513	421
2015	952	359	294
2016	1365	359	294
2017	1810	404	331
2018	952	374	307
2019	1079	332	272

Por lo tanto, de la tabla anterior se obtiene:

Tabla 83 - Rentabilidades de los procesos de 2 pasos desde el año 2009

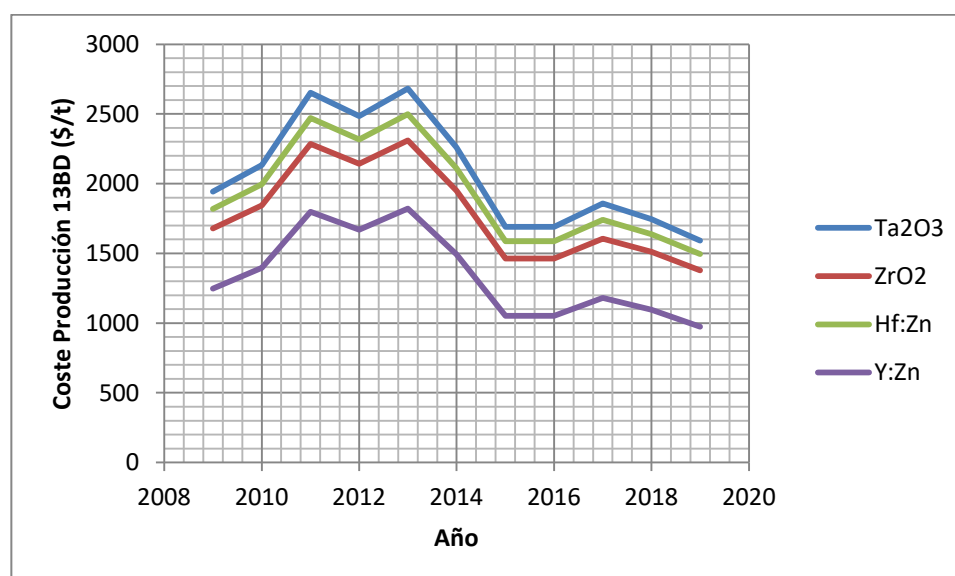
Año	CON CATALIZADOR DE Ta₂O₃			CON CATALIZADOR DE ZrO₂		
	TIR	Coste \$/t_{13BD}	PB (años)*	TIR	Coste \$/t_{13BD}	PB (años)
2009	-	1941,80	>15	-	1678,83	>15
2010	-11,28%	2134,04	>15	1,25%	1843,13	13
2011	-	2651,60	>15	0,24%	2285,47	14
2012	26,83%	2485,24	3	29,57%	2143,29	3
2013	-	2681,18	>15	-	2310,75	>15
2014	-	2259,73	>15	-	1950,56	>15
2015	-	1690,41	>15	-	1463,98	>15
2016	-	1690,41	>15	-10,31%	1463,98	>15
2017	-3,45%	1856,77	>15	3,76%	1606,16	11
2018	-	1745,87	>15	-	1511,37	>15
2019	-	1590,60	>15	-	1378,67	>15

* Período de recuperación de la inversión o PayBack

Tabla 84 - Rentabilidades de los procesos de 1 paso desde el año 2009

Año	CON CATALIZADOR DE Hf:Zn			CON CATALIZADOR DE Y:Zn		
	TIR	Coste \$/t _{13BD}	PB (años)	TIR	Coste \$/t _{13BD}	PB (años)
2009	-	1818,32	>15	-	1246,98	>15
2010	-5,54%	1995,04	>15	29,04%	1396,09	3
2011	-12,27%	2470,81	>15	29,57%	1797,53	3
2012	33,98%	2317,88	2	83,79%	1668,49	1
2013	-	2498,00	>15	-5,03%	1820,47	>15
2014	-	2110,58	>15	-0,79%	1493,58	>15
2015	-	1587,23	>15	-	1052,00	>15
2016	-	1587,23	>15	16,70%	1052,00	5
2017	0,23%	1740,16	14	31,63%	1181,03	3
2018	-	1638,20	>15	-	1095,01	>15
2019	-	1495,47	>15	4,79%	974,58	10

Que representando el coste de producción del butadieno para cada año, gráficamente resulta:



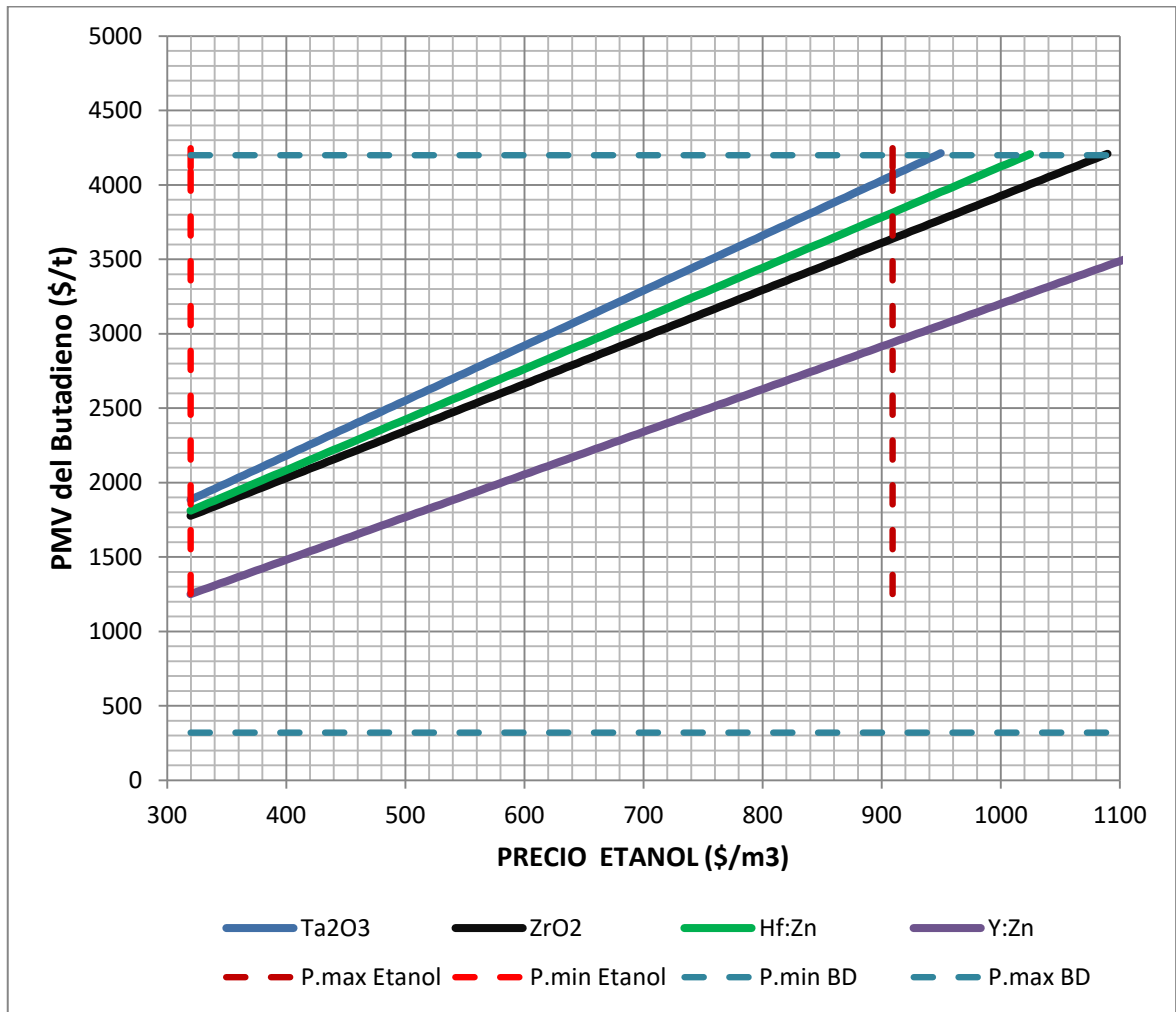
Gráfica 13 - Coste producción del 13-BD según año

Se puede observar de los resultados de la Tabla 84 que solo entran en rentabilidad las 4 plantas en el año 2012 debido a una conjunción favorable de los precios de etanol y butadieno. Por otro lado también se extrae de las tablas anteriores que la planta que da mejores resultados desde el año 2009 es la de 1 paso que usa el catalizador de Y:Zn, si bien existen años en los que los precios de etanol y de 13-BD harían el proceso no rentable.

5.5.3.2 Variación del precio mínimo de venta según precio de etanol

Otro aspecto a analizar es el precio mínimo de venta según el coste del etanol, es decir cuando el VAN=0 o la TIR=k, según el precio del etanol, puesto que del Apartado 5.2.1, se puede observar que este es el coste principal en los cuatro procesos. Por lo tanto, teniendo los precios máximos y mínimos históricos de etanol y butadieno como referencia, el PMV en relación al coste de esta

materia prima resulta de la forma:



Gráfica 14 - Precio mínimo de venta vs Precio etanol para los diferentes procesos

De la gráfica anterior se observa que en el caso de los 4 procesos existen PMV de 13-BD, que superan la región del precio máximo de etanol, sin rebasar la de precio máximo de venta de 13-BD. Esto en principio resulta conveniente para la economía de los procesos, ya que indica que incluso si el mercado supera el precio máximo de este, los procesos tienen todavía la posibilidad de ser rentables. También hay que decir que se encuentran muy cerca de este punto (Precio Butadieno máximo, Precio Etanol máximo), por lo que hay poco margen para que se cumpla lo anterior, excepto en el caso del proceso de 1 paso que utiliza el catalizador de Y:Zn, cuya recta se separa más del punto que el resto, consiguiendo un mucho mejor margen.

6 EVALUACIÓN AMBIENTAL

6.1 OBJETIVOS

Tras haber realizado una evaluación técnica y económica, se procede a la cuantificación del impacto ambiental derivado de la producción de butadieno a partir de bioetanol y para ello se empleará como herramienta el Análisis de Ciclo de Vida (ACV), según la norma ISO 14040:2006¹¹⁷, utilizando el software SimaPro, con la base de datos de EcoInvent.

Este estudio va dirigido a encaminar la cuantificación de forma exhaustiva de los impactos de cada ruta de producción, y así tener un criterio técnico de comparación de ambos. También se compararán estos con la ruta tradicional de producción de 13-BD (a partir del craqueo de naftas).

Los resultados obtenidos ayudarán a dilucidar la mejor opción y más sostenible para la producción del butadieno comparando entre los diferentes procesos estudiados.

La motivación para la realización de este análisis es la problemática existente por el agotamiento de los recursos fósiles necesarios para la fabricación del butadieno por la vía tradicional y el incremento de la temperatura global por la emisión de gases de efecto invernadero como resultado del uso de estos recursos no renovables, además de la búsqueda de un desarrollo industrial más neutro ambientalmente, cada vez más demandado por la legislación de los diferentes países o comunidades.

6.2 ALCANCE

En este proyecto se realizará un ACV comparativo entre los procesos de producción de butadieno a partir de bioetanol, cuyo estudio se realizará desde la adquisición de las materias primas necesarias para la producción hasta la puerta de la fábrica en un análisis que se denomina de la cuna a la puerta o en terminología inglesa, cradle-to-gate, es decir, eliminando del análisis el impacto del uso del consumo del producto de butadieno y su fin de vida.

Los sistemas a estudiar son los diferentes procesos de generación de butadieno a partir de etanol, según el catalizador utilizado y, por lo tanto también, el proceso de producción ya ampliamente descrito en apartados anteriores que son:

Catalizadores para procesos de dos pasos:

- Catalizador de Ta_2O_3
- Catalizador de ZrO_2

Catalizadores para procesos de un paso:

- Catalizador de Hf:Zn
- Catalizador de Y:Zn

Además de todos estos, el otro sistema a estudiar será el 13-BD producido por la vía fósil, mejorando así la calidad de la comparación ambiental.

La función del sistema es la fabricación de butadieno a partir de bioetanol, siendo la unidad funcional establecida para la comparación del análisis producir 1 tonelada de butadieno.

6.2.1 Definición del sistema

Los procesos de 2 pasos, utilizan los catalizadores anteriormente mencionados. Aquí se engloban

los procesos que contiene un primer reactor para la transformación de etanol en acetaldehído y su posterior generación de butadieno a partir de este acetaldehído en el reactor del segundo paso. En este proyecto se ha supuesto que estas plantas de dos pasos con esos dos catalizadores en el segundo paso, utilizan el mismo catalizador (Cu/MC) en el reactor del primer paso.

Los procesos de 1 paso, que usan los dos catalizadores mencionados en el Apartado 6.2, son aquellos que en una sola etapa de reacción, son capaces de la transformación directa del bioetanol en butadieno.

Ambos procesos utilizan bioetanol azeotrópico (96% molar), como materia prima, fijando en su diseño un consumo determinado de este, indicado en el Apartado 4.1.

6.2.2 Límites del sistema

Los límites de este sistema comprenden desde el proceso de obtención de las materias primas hasta la puerta de la fábrica de producción de butadieno.

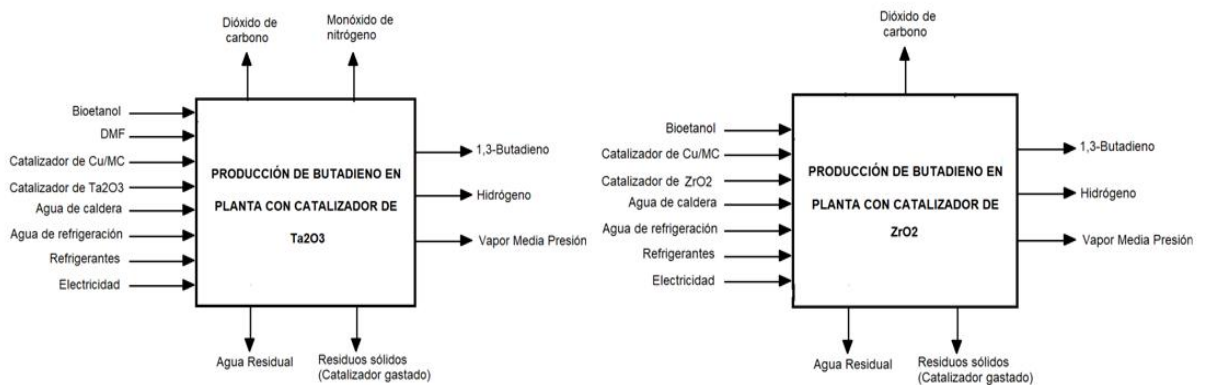


Figura 24 - Diagrama de entradas y salidas del proceso con catalizador de dos pasos

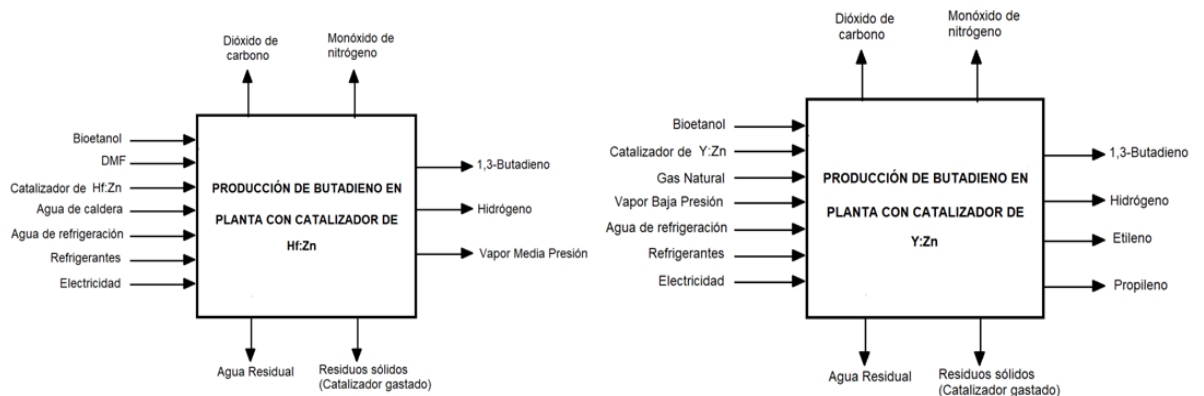


Figura 25 - Diagrama de entradas y salidas del proceso con catalizador de un paso

6.2.3 Descripción del sistema

De la figura anterior, se puede decir que en general en los 4 procesos se produce agua residual, esto es debido, al agua que resulta en la reacción de producción de butadieno, además del agua introducida con el etanol azeotrópico que se usa en estos casos. También existen residuos sólidos que son generados por la gestión de los catalizadores gastados.

6.2.3.1 Proceso con catalizador de Ta₂O₃

Como se observa en la figura 24, la planta de 1 paso con catalizador de Ta₂O₃, como materia prima requerida para la producción de butadieno se necesita bioetanol, pero también es necesario introducir en el sistema una cantidad determinada de DMF (N,N-dimetilformamida) que se utilizará para la separación de butenos del producto y poder así conseguir una concentración suficiente para su venta.

También es necesario introducir electricidad para el funcionamiento de los equipos que requieren de este servicio, bombas y compresores. Los demás a introducir son servicios fríos como agua de refrigeración y refrigerantes de baja temperatura, ya que en esta planta sobra calor por la generación de corrientes residuales combustibles. Este mismo excedente energético, posibilita que pueda generarse vapor y venderse como vapor de media presión a otras hipotéticas industrias cercanas, además del producto principal.

6.2.3.2 Proceso con catalizador de ZrO₂

El otro proceso de dos pasos, el que usa el catalizador de ZrO₂, es muy similar al primero solo que al no producir butenos como subproducto, el proceso no utiliza DMF, y por lo tanto, no requiere de esta materia prima. Otra diferencia es que, como no utiliza este compuesto, las corrientes residuales combustibles utilizadas para la producción de vapor no lo contiene, y por lo tanto no existen emisiones de óxidos de nitrógeno durante la combustión de estas al carecer de compuestos nitrogenados, teniendo también en cuenta que en todos los casos se desprecia la generación de NO_x térmico.

6.2.3.3 Proceso con catalizador de Hf:Zn

Para los de un paso, como se observa en el diagrama anterior, la planta que usa el catalizador de Hf:Zn, al igual que la que usa el de Ta₂O₃ en los procesos de 2 pasos, también requiere de DMF para la separación de los butenos que este catalizador genera.

También es necesario introducir electricidad para el funcionamiento de los equipos de compresión de líquido (bombas) y para el funcionamiento del sistema PSA (Pressure Swing Adsorption). Los demás servicios a introducir son también fríos como agua de refrigeración y refrigerantes de baja temperatura, ya que es autoabastecida en servicios calientes y con excedentes de vapor como en los casos anteriores.

6.2.3.4 Proceso con catalizador de Y:Zn

El otro proceso de 1 paso solo requiere de bioetanol como materia prima, al igual que el proceso con catalizador de ZrO₂ de dos pasos.

En esta planta, a diferencia de en las demás, no se generan corrientes residuales combustibles no es posible la generación de vapor ni calor para el mantenimiento de la temperatura en el reactor, por lo tanto, esta fuente de calor debe ser obtenida directamente del gas natural e importar el vapor de baja presión (LPS) necesario en el proceso.

En cambio se generan más subproductos para venta aparte de hidrógeno, como son el etileno y el propileno.

6.2.4 Expansión de los sistemas

Como se observa de lo anterior, existen más salidas a la tecnosfera en los 4 procesos a parte del producto de butadieno, como son vapor de media presión (MPS) y subproductos como el etileno y el propileno (en la planta de Y:Zn).

Por ello tal y como se recomienda en la norma ISO 14040-44:2006¹¹⁷, en estos casos lo más acertado es realizar una expansión del sistema a estos subproductos, es decir, el impacto ambiental de estos productos será restado como créditos al impacto que pueda producir el

butadieno.

6.2.5 Categorías de impacto

Se eligieron las siguientes categorías de impacto para el desarrollo de este ACV, ya que son las más adecuadas para la comparación ambiental, donde cada proceso dará interesantes resultados para la comparación con los demás. En el Anexo XIX se pueden ver todos los demás impactos no seleccionados para la comparativa en este ACV.

- **Potencial de calentamiento global (t CO₂-eq/u.f):** Debido a la creciente preocupación por el progresivo aumento de la temperatura del planeta a causa de los gases de efecto invernadero, y el interés por conocer la denominada como huella de carbono para conseguir un desarrollo industrial más neutro en carbono que en los últimos tiempos comienza a imponerse se consideró que esta categoría de impacto debería de ser sujeto a análisis en este ACV.
- **Agotamiento de recursos fósiles (t oil-eq):** Esta categoría de impacto debe aparecer en el análisis, ya que el butadieno por la vía fósil es el que mayor impacto supondrá en este campo, por lo tanto, no tendría sentido considerar una opción de producción de este producto a partir de bioetanol donde fuera mayor, ya que no tendría sentido cambiar la vía tradicional por una que tuviera una dependencia aún mayor de estos recursos, que precisamente es una de las ventajas que tiene la producción por este tipo de vía renovable.
- **Consumo de agua (dam³ agua/u.f):** Como en los casos estudiados se tratará de sustituir una materia prima de origen fósil como las naftas por bioetanol para la producción del butadieno, es evidente que esta categoría de impacto debe aparecer ya que este bioetanol tiene un origen agrícola, con el consumo de recursos hídricos que esto supone. Por lo tanto, la reducción de este impacto, será determinante para equiparar el butadieno por la vía petroquímica y por la vía a partir de bioetanol, y como comparación entre las diferentes producciones por esta última vía.

6.2.6 Calidad de los datos

La calidad de los datos los calculados en apartados anteriores y que han sido extraídos de la base de datos de EcoInvent, tendrán una calidad alta.

El resto, extraídos de las siguientes suposiciones o en los que se han utilizado bases de datos de EcoInvent que no corresponden exactamente con el subproceso, como es la gestión de los catalizadores gastados, tendrán una calificación media de calidad de dato.

Por lo tanto, como la gran parte de los datos corresponden con el primer apartado mencionado, la calidad general de los datos puede calificarse como alta.

6.2.7 Suposiciones

Durante el desarrollo del ACV se han hecho las suposiciones que se detallan a continuación.

- La construcción de los equipos e infraestructuras utilizados en los procesos tendrán un impacto despreciable frente al resto de procesos y materiales por ser muy inferiores en comparación con los impactos del ciclo de vida completo de los procesos.
- La ubicación de las plantas será siempre en Europa, utilizándose el mix energético

medio europeo cuando se requiera de energía eléctrica. En caso de no existir datos de procesos en esta ubicación, se tomarán los valores de bases de datos a nivel global.

- La emisión directa de GEI como el CO₂ y el NO, se calculará por balance de materia de los elementos suponiendo la quema total de las corrientes residuales combustibles de las Tablas 33, 39 y 45, de modo que, cada mol de N que se quema producirá un mol de NO y de la misma forma con el CO₂. Obteniéndose los siguientes valores, calculados en el Anexo XIII:

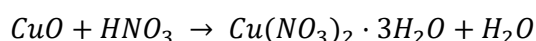
Tabla 85 - Emisiones gaseosas de los procesos por la quema de las corrientes residuales

	Ta ₂ O ₃		ZrO ₂		Hf:Zn	
	CO ₂	NO	CO ₂	NO	CO ₂	NO
TOTAL (kmol/h)	87,8144	9,4062	71,12064	0	66,86	6,138
TOTAL (kg/h)	3863,834	282,186	3129,308	0	2941,84	184,14

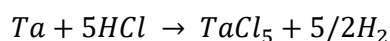
- Aparte del impacto que suponen las entradas desde la tecnosfera de los materiales necesarios para la fabricación de los catalizadores, se supondrá que el impacto del proceso de fabricación de estos será totalmente imputado a la electricidad que consuman, ya que no se tiene ningún dato del consumo de los procesos, y como la mayoría de las operaciones unitarias para esta fabricación de catalizadores son mecánicas, puede ser una buena aproximación. Por otro lado, para el cálculo de esta energía eléctrica requerida se supondrá que los costes de producción de cada catalizador, obtenidos de las tablas de costes de los catalizadores del Anexo I es debido en su totalidad a este consumo, por lo tanto, tomando el precio de la electricidad de la Tabla 69 se podrá calcular el valor de estos consumos.
- Puesto que en la base de datos de EcoInvent no existen en ningún caso los materiales portadores del metal que requiere el catalizador, ya que estos se encuentran en forma de nitratos o cloruros, pero sí su óxido o el metal, se deberá añadir un proceso más para calcular el impacto de la fabricación de estos. Este proceso adicional para conseguir la forma de la sal adecuada, se supone que será las reacciones con el ácido mostradas a continuación. También se supondrá que el agua producida, o la que lleve el ácido, que no se una a la molécula será evacuada del sistema en forma de emisión gaseosa debido a la gran exotermicidad de las reacciones. En cambio, si es hidrógeno lo que se produce en la reacción, se recuperará como salida a la tecnosfera con la reducción de impacto por créditos ambientales que este suponga.

Las reacciones son las siguientes, según el catalizador que las requiera:

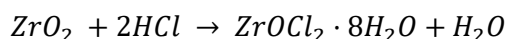
1) Catalizador de Cu/MC



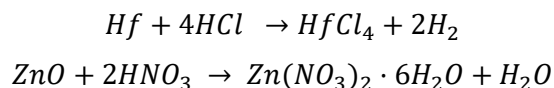
2) Catalizador de Ta₂O₃



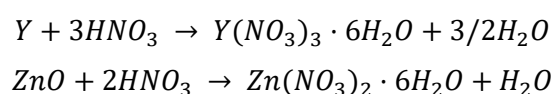
3) Catalizador de ZrO₂



4) Catalizador de Hf:Zn



5) Catalizador de Y:Zn



- En la base de datos de EcoInvent no existen procesos de utilización de servicios fríos requeridos en las plantas como son el agua de refrigeración y los refrigerantes de baja temperatura, por lo que es necesario crear un proceso nuevo para ambos a partir del cual se puedan obtener los impactos del uso de los servicios.

Para el caso del agua de refrigeración, una vez utilizada, esta debe regresar a la torre de enfriamiento donde parte de ella se evaporará y se perderá. Por lo tanto, el impacto del uso de este servicio vendrá dada por la cantidad de agua que se pierda, y por lo tanto, que haya que reponer. Esta cantidad puede estimarse en 3100 L por MW·h retirado en el proceso de enfriamiento¹¹⁸. Aquí se supondrá que el impacto generado por el consumo eléctrico de los equipos de compresión para vencer la pérdida de carga del sistema resultarán despreciables en comparación con el consumo de agua por tratarse de un líquido y tener un consumo bajo de compresión.

Por otro lado, y de forma contraria al caso anterior, para el cálculo del impacto del uso de los refrigerantes de baja temperatura, se supondrá despreciable la pérdida de este, ya que en este caso solo serían producidas por fugas en el ciclo de refrigeración. En este caso, el impacto vendrá dado por el consumo eléctrico para la compresión del gas y el agua de refrigeración usada en el circuito. De este modo, con el método de cálculo desarrollado en el Anexo XIII, queda:

Tabla 86 - Consumos por el uso de refrigerantes de baja temperatura

Temperatura refrigerante (°C)	Consumo CW (kJ/kg)	Consumo eléctrico (kJ/kg)
0	182,66	37,48
-5	193,96	42,56
-15	210,91	53,07
-20	218,44	60,73
-25	222,21	66,24
-50	263,64	95,62

6.2.8 Limitaciones

- Como en la base de datos de EcoInvent no aparecen los metales como el Hafnio y el Itrio, se sustituirá la cantidad másica requerida por otros metales, de forma que tengan un impacto parecido. El criterio para decir que tendrán impactos parecidos será su abundancia en la corteza terrestre, de forma que los metales que sustituyan a los dos anteriores se encuentren en proporciones parecidas¹¹⁹. Por ello, el hafnio y el itrio se sustituirán por el Estaño y el Galio respectivamente, los cuales sí aparecen en la base de datos.
- Por ausencia de bases de datos para la gestión de los residuos peligrosos como son los catalizadores gastados de los diferentes procesos (Según la LER), se utilizará en su lugar la gestión de los catalizadores gastados de la producción de óxido de etileno, que sí se encuentra en la base de datos.

6.3 ANÁLISIS DE INVENTARIOS DE CICLO DE VIDA

A continuación, se presentan los diferentes inventarios de materiales y emisiones de cada proceso de producción de butadieno expresados en su unidad funcional, es decir, toneladas de butadieno producidas. Los datos presentados, son los calculados a partir de los datos de consumos y producciones de las plantas ya indicados en las tablas 61, 67, 68 y 70.

Las fuentes de la que se extraerán cada material/proceso serán las siguientes disponibles en la base de datos de EcoInvent:

Tabla 87 - Equivalencia en EcoInvent de las fuentes del inventario

Nº	Equivalencia en Ecoinvent
1	Ethanol, without water, in 95% solution state, from fermentation {GLO} market for ethanol, without water, in 95% solution state, from fermentation APOS, U
2	Hydrogen, gaseous {GLO} market for hydrogen, gaseous APOS, U
3	Steam, in chemical industry {RER} market for steam, in chemical industry APOS, U
4	Ethylene, average {RER} market for ethylene, average APOS, U
5	Propylene {RER} market for propylene APOS, U
6	N,N-dimethylformamide {GLO} market for APOS, U
7	Water, completely softened {RER} market for water, completely softened APOS, U
8	Electricity, high voltage { Europe without Switzerland} market for APOS, U
9	Natural gas, high pressure { Europe without Switzerland} market for APOS, U
10	Heat, from steam, in chemical industry {RER} market for heat, from steam, in chemical industry APOS, U
11	Carbon dioxide, biogenic
12	Carbon dioxide, fossil
13	Nitrogen monoxide
14	Wastewater, average {Europe without Switzerland} market for wastewater, average APOS, U
15	Spent catalyst base from ethyleneoxide production {GLO} market for APOS, U
16	Activated carbon, granular {GLO} market for activated carbon, granular APOS, U
17	Copper oxide {GLO} market for APOS, U
18	Nitric acid, without water, in 50% solution state {RER} market for nitric acid, without water, in 50% solution state APOS, U
19	Water
20	Silica sand {GLO} market for APOS, U
21	Zinc oxide {GLO} market for APOS, U
22	Tin {GLO} market for APOS, U
23	Hydrochloric acid, without water, in 30% solution state {RER} market for APOS, U
24	Silica sand {GLO} market for APOS, U
25	Sodium oxide {RER} market for sodium oxide APOS, U
26	Water, ultrapure {RER} market for water, ultrapure APOS, U
27	Tantalum, powder, capacitor-grade {GLO} market for APOS, U
28	Ethanol, without water, in 99.7% solution state, from ethylene {RER} market for ethanol, without water, in 99.7% solution state, from ethylene APOS, U
29	Zeolite, powder {GLO} market for APOS, U
30	Gallium, semiconductor-grade {GLO} market for APOS, U
31	Zirconium oxide {GLO} market for APOS, U
32	Urea, as N {GLO} market for APOS, U
33	Ethanol

6.3.1 Inventario de la planta con catalizador de Ta2O3

Tabla 88 - Inventario para la producción de BD con proceso de 2 pasos con catalizador de Ta2O3

PLANTA DE 2 PASOS CON CATALIZADOR DE Ta2O3					
SALIDAS A TECNOSFERA	Butadieno	1762,939	kg/h	1	t/U.F
	Hidrógeno [2]	315,265		0,178829216	
	MPS [3]	11768,9		6,675727294	
ENTRADAS DESDE TECNOSFERA	Catalizador de Cu/MC	267,761667	kg/año	1,89855E-05	t/uf
	Catalizador de Ta2O3	1139,512		8,07963E-05	
	Bioetanol azeotrópico [1]	6,372	m3/h	3,614418877	m3/uf
	Agua proceso [7]	11768,9	kg/h	6,675727294	t/uf
	DMF [6]	687,8		0,390143958	
	CW	8041,816	kW	16421,7466	MJ/uf
	Ref. 0°C	2120,12		4329,379519	
	Ref. -5°C	347,31		709,2224972	
	Ref. -20°C	68,72		140,3293024	
	Electricidad [8]	194,19		396,5405496	
EMISIONES	Dióxido de Carbono [11]	87,8144	kmol/h	2,19170011	t/uf
	Óxido de nitrógeno [13]	9,4062		0,160065663	
	Agua Residual [14]	2032,6	kg/h	1,15296105	
	Residuos Sólidos [15]	1407,3	kg/año	9,97818E-05	

6.3.2 Inventario de la planta con catalizador de ZrO2

Tabla 89 - Inventario para la producción de BD con proceso de 2 pasos con catalizador de ZrO2

PLANTA DE 2 PASOS CON CATALIZADOR DE ZrO2					
SALIDAS A TECNOSFERA	Butadieno	2001,112	kg/h	1	t/U.F
	Hidrógeno [2]	209,658		0,104770747	
	MPS [3]	579,01		0,289344125	
ENTRADAS DESDE TECNOSFERA	Catalizador de Cu/MC	258,991667	kg/año	1,6178E-05	t/uf
	Catalizador de ZrO2	1539,5		9,61653E-05	
	Bioetanol azeotrópico [1]	6,372	m3/h	3,184229568	m3/uf
	Agua proceso [7]	579,01	kg/h	0,289344125	t/uf
	CW	7154,28	kW	12870,54798	MJ/uf
	Ref. -15°C	407,066		732,3116347	
	Electricidad [8]	98,29		176,8312418	
EMISIONES	Dióxido de carbono [11]	71,12064	kmol/h	1,563784616	t/uf
	Agua Residual [14]	1900,1	kg/h	0,949522066	
	Residuos Sólidos [15]	1798,5	kg/año	0,000112343	

6.3.3 Inventario de la planta con catalizador de Hf:Zn

Tabla 90 - Inventario para la producción de BD con proceso de 1 paso con catalizador de Hf:Zn

PLANTA DE 1 PASO CON CATALIZADOR DE Hf:Zn						
SALIDAS A TECNOSFERA	Butadieno	1856,159	kg/h	1	t/U.F	
	Hidrógeno [2]	117,529		0,06331839		
	MPS [3]	4456,55		2,40095272		
ENTRADAS DESDE TECNOSFERA	Catalizador de Hf:Zn	1436,81563	kg/año	9,676E-05		
	Bietanol azeotrópico [1]	6,372	m3/h	3,43289557	m3/uf	
	Agua proceso [7]	4456,55	kg/h	2,40095272	t/uf	
	DMF [6]	448,8		0,24178963		
	CW	5305,91		10290,7542	MJ/uf	
	Ref. -5°C	151,72		294,259274		
	Ref. -20°C	600,28		1164,23647		
	Electricidad [8]	996,91		1933,49561		
EMISIONES	Dióxido de carbono [11]	66,86		kmol/h	1,58490733	t/uf
	Óxido de nitrógeno [13]	6,138			0,09920486	
	Agua Residual [14]	2382,5	kg/h	1,28356461		
	Residuos Sólidos [15]	1436,8	kg/año	9,676E-05		

6.3.4 Inventario de la planta con catalizador de Y:Zn

Tabla 91 - Inventario para la producción de BD con proceso de 1 paso con catalizador de Y:Zn

PLANTA DE 1 PASO CON CATALIZADOR DE Y:Zn							
SALIDAS A TECNOSFERA	Butadieno	2204,073	kg/h	1	t/U.F		
	Hidrógeno [2]	144,865		0,06572604			
	Etileno [4]	262,515		0,11910449			
	Propileno [5]	386,565		0,17538666			
ENTRADAS DESDE TECNOSFERA	Catalizador de Y:Zn	3292,4		0,00018672	t/uf		
	Bioetanol azeotrópico [1]	6,372	m3/h	2,89101132	m3/uf		
	LPS [10]	2291,7	kW	3743,12466	MJ/uf		
	Gas Natural [9]	1761,56		2877,22594			
	CW	1806,25		2950,21989			
	Ref. -25°C	870,09		1421,15257			
	Ref. -50°C	34,84		56,9055562			
	Electricidad [8]	4211,05		6878,07854			
EMISIONES	Dióxido de carbono [12]	40,0354		kmol/h		0,799228	t/uf
	Agua Residual [14]	2179,3		kg/h		0,98876035	
	Residuos Sólidos [15]	3292,4	kg/año	0,00018672			

6.3.5 Inventarios calculados

En este apartado se encuentran los inventarios de procesos y materiales, que se encuentran en los cuatro casos anteriores, pero que han tenido que ser determinados previamente con una serie de suposiciones, puesto que no existen bases de datos disponibles de estos.

6.3.5.1 Inventario de la fabricación de los catalizadores

Puesto que la base de datos de EcoInvent no existe ningún material que coincida con los catalizadores a utilizar, es necesario crear un nuevo modelo como ocurre con el uso de los servicios fríos.

En ambos casos, para la creación de esta nueva base se sigue por el procedimiento descrito en el de suposiciones. El inventario de estos materiales y procesos es el siguiente:

Tabla 92 - Inventario de la fabricación de catalizador de Cu/MC

CATALIZADOR DE Cu/MC (1kg)		
ENTRADAS DESDE TECNOSFERA	Electricidad [8]	112,90893 kW·h
	MC [16]	0,7047 kg
	Hidrógeno [2]	8,457 kg
	Óxido de cobre [17]	0,11926568 kg
	Nítrico puro [18]	0,20702722 kg
EMISIONES	Agua Evaporada [19]	0,26502367 kg

Tabla 93 - Inventario de la fabricación del catalizador de Ta2O3

CATALIZADOR DE Ta2O3 (1kg)		
ENTRADAS DESDE TECNOSFERA	Electricidad [8]	26,2599469 kW·h
	SBA-15 [24]	0,965 kg
	Tantalio [27]	0,01767085 kg
	Etanol [28]	0,010788 kg
	Clorhídrico puro [23]	0,01781729 kg
EMISIONES	Agua Evaporada [1]	0,04157369 kg
	Etanol Evaporado [33]	0,010788 kg
SUBPRODUCTOS	Hidrógeno [2]	0,00048815 kg

Tabla 94 - Inventario de la fabricación de catalizador de ZrO2

CATALIZADOR DE ZrO2 (1kg)		
ENTRADAS DESDE TECNOSFERA	Electricidad [8]	73,2979664 kW·h
	NanoSiO2 [24]	0,8953 kg
	Óxido de circonio [31]	0,0399941 kg
	Agua [26]	0,01891 kg
	Urea [32]	0,001951 kg
	Clorhídrico puro [23]	0,02373634 kg
EMISIONES	Agua Residual [14]	0,018912 kg
	Agua Evaporada [19]	0,04683 kg

Tabla 95 - Inventario de la fabricación de catalizador de Hf:Zn

CATALIZADOR DE Hf:Zn (1kg)			
ENTRADAS DESDE TECNOSFERA	Electricidad [8]	50,397878	kW·h
	Car-O-Sil M5 [20]	0,3869	kg
	Óxido de zinc [21]	0,19164757	kg
	Hafnio [22]	0,02244653	kg
	Clorhídrico puro [23]	0,0184112	kg
	Nítrico puro [18]	0,32651068	kg
	Sílice [20]	0,0739	kg
	Óxido de sodio [25]	0,0292	kg
	Agua [26]	0,008807	kg
SUBPRODUCTO	Hidrógeno [2]	0,00050442	kg
EMISIONES	Agua evaporada [19]	0,1661058	kg

Tabla 96 - Inventario de la fabricación de catalizador de Y:Zn

CATALIZADOR DE Y:Zn (1kg)			
ENTRADA DESDE TECNOSFERA	Electricidad [8]	77,4535809	kW·h
	β-Zeolita [29]	0,7091	kg
	Ítrio [30]	0,03705556	kg
	Óxido de zinc [21]	0,0229867	kg
	Nítrico puro [18]	0,23608491	kg
	Agua [26]	0,0007091	kg
SALIDAS A TECNOSFERA	Hidrógeno [2]	0,00285043	kg
EMISIONES	Agua Residual [14]	0,001064	kg
	Agua Evaporada [19]	0,1303	kg

6.3.5.2 Inventario del uso de servicios

Por otro lado, para los servicios fríos de refrigeración de agua y refrigerantes de baja temperatura, seguirá el siguiente modelo para su uso:

Tabla 97 - Inventario para el uso de agua de refrigeración (1 kJ)

USO AGUA REFRIGERACIÓN (1kJ)		
ENTRADA DESDE TECNOSFERA	Agua [19]	0,023923 kg
SALIDAS A TECNOSFERA	Agua [19]	0,023062 kg
EMISIONES	Agua Evaporada [19]	0,000861 kg

Tabla 98 - Inventario para el uso de agua de refrigeración (1 kJ)

		TEMPERATURA DE REFRIGERANTE (°C)					
		0	-5	-15	-20	-25	-50
ENTRADAS DESDE TECNOSFERA	Uso de agua refrigeración (kJ _{AGUA} /kJ)	1,0848	1,1247	1,1698	1,1900	1,1911	1,3055
	Electricidad (kJ/kJ) [8]	0,2226	0,2468	0,2943	0,3308	0,3550	0,4735

6.4 EVALUACIÓN DE IMPACTO

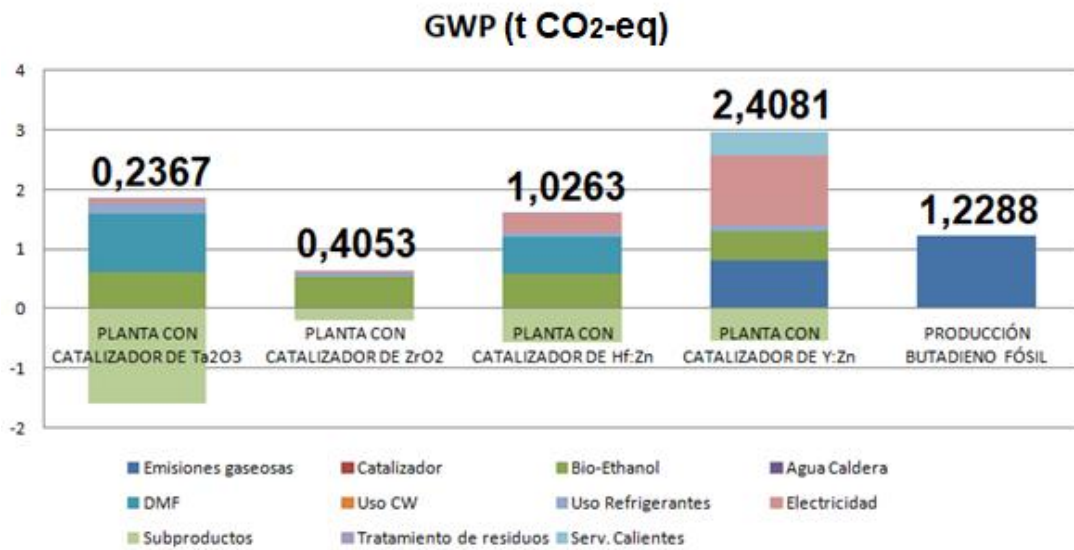
Una vez presentados los inventarios anteriores, se introducirán en las bases de datos para determinar los diferentes impactos ambientales. En el siguiente apartado se presentan y analizan las tres categorías de impacto elegidas, y el Anexo XIX, todas las demás. En este caso, las categorías de impacto vienen referidas a la unidad funcional de t de butadieno, calculando su impacto con el método ReCiPe 2016 Midpoint (H) V1.04 / World (2010) H.

En los siguientes datos se pueden observar los resultados para la categoría de impacto de potencial de calentamiento global (en toneladas de CO₂ equivalentes) de los procesos de producción de butadieno a partir de etanol producido por fermentación (bioetanol) estudiados y en comparación con el butadieno a partir de la vía petroquímica (obtenido directamente de la base de datos de EcoInvent).

Tabla 99 - Potencial de calentamiento global de los procesos de producción de 13BD

		Ta2O3	ZrO2	Hf:Zn	Y:Zn	BD Fósil
GWP (t CO2-eq)	Emisiones gas.	0	0	0	0,7992	
	Catalizador	0,0033	0,0057	0,0031	0,0100	
	Bio-Etanol	0,6101	0,5375	0,5795	0,4880	
	Agua Caldera	0,0021	9,3·10 ⁻⁵	0,0008	0	
	DMF	0,9788	0	0,6066	0	
	Uso CW	0,0044	0,0034	0,0027	0,0008	
	Uso Refrig.	0,1737	0,0370	0,0786	0,0912	
	Electricidad	0,0677	0,0302	0,3300	1,1739	
	Subproductos	-1,6036	-0,2089	-0,5752	-0,5482	
	Tratamiento Resid.	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	
	Servicios calientes	0	0	0	0,3928	
	TOTAL	0,2367	0,4053	1,0263	2,4081	1,2288

Que gráficamente resulta:



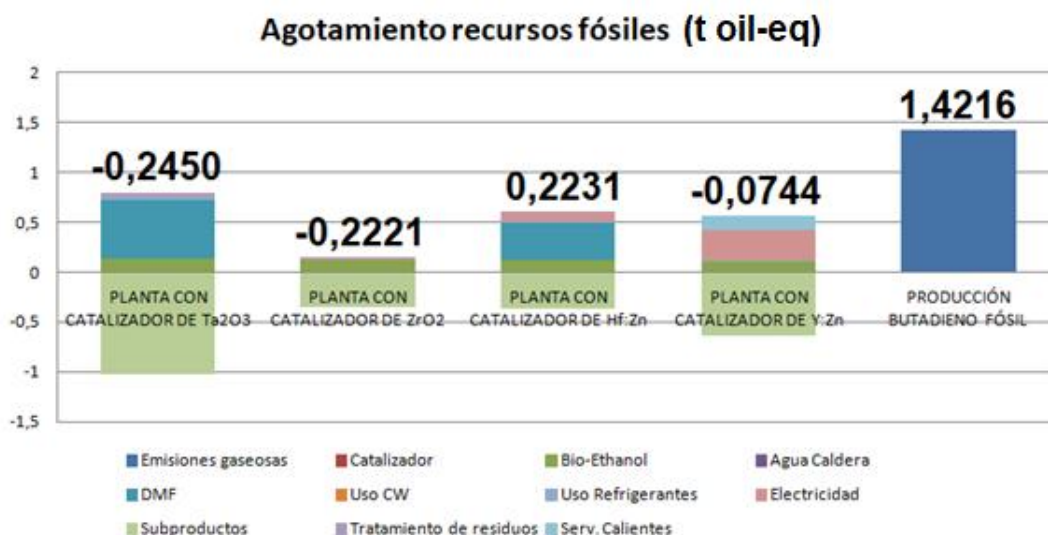
Gráfica 15 - Potencial de calentamiento global de los procesos de fabricación de BD

De los datos siguientes se pueden observar los resultados para la categoría de impacto de agotamiento de recursos fósiles de los procesos de producción de butadieno a partir de bioetanol estudiados y en comparación con el butadieno a partir de la vía petroquímica. Estos datos son:

Tabla 100 - Agotamiento de recursos fósiles de los procesos de producción de 13BD

		Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn	BD Fósil
ARF (t oil-eq)	Emisiones gaseosas	0	0	0	0	
	Catalizador	0,0013	0,0018	0,0008	0,0025	
	Bio-Ethanol	0,1278	0,1126	0,1214	0,1022	
	Agua Caldera	0,0006	2,44 · 10 ⁻⁵	0,0002	0	
	DMF	0,5883	0	0,3646	0	
	Uso CW	0,0012	0,0010	0,0008	0,0002	
	Uso Refrigerantes	0,0426	0,0091	0,0193	0,0224	
	Electricidad	0,0166	0,0074	0,0809	0,2880	
	Subproductos	-1,0235	-0,3540	-0,3649	-0,6351	
	Tratamiento Resid.	3,33 · 10 ⁻⁵	2,75 · 10 ⁻⁵	3,71 · 10 ⁻⁵	2,88 · 10 ⁻⁵	
	Servicios calientes	0	0	0	0,1454	
TOTAL	-0,2450	-0,2221	0,2231	-0,0744	1,4216	

Que gráficamente resulta:



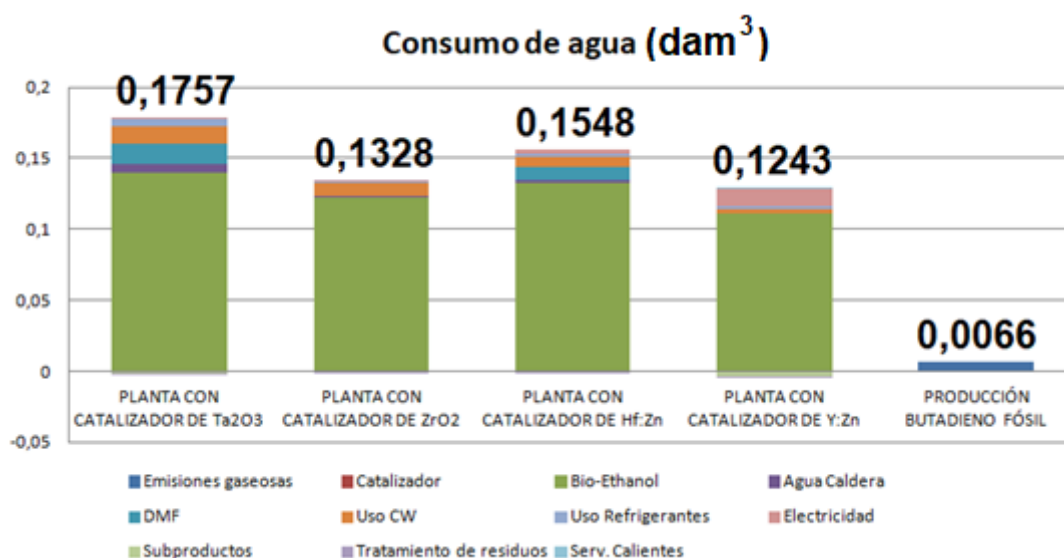
Gráfica 16 - Agotamiento de recursos fósiles de los procesos de fabricación de BD

Por último se muestran los datos de la categoría de impacto de consumo de agua, o agotamiento de recursos hídricos, de los procesos de producción de butadieno a partir de bioetanol estudiados y en comparación con el butadieno a partir de la vía petroquímica. Que resultan:

Tabla 101 - Consumo de agua de los procesos de producción de 13BD

		Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn	BD Fósil
ARH (dam³)	Emisiones gaseosas	0	0	0	0	
	Catalizador	$3,17 \cdot 10^{-5}$	$5,81 \cdot 10^{-5}$	$3, \cdot 10^{-5}$	0,0001	
	Bio-Ethanol	0,1392	0,1226	0,1322	0,1113	
	Agua Caldera	0,0068	0,0003	0,0024	0	
	DMF	0,0140	0	0,0087	0	
	Uso CW	0,0122	0,0095	0,0076	0,0022	
	Uso Refrigerantes	0,0054	0,0010	0,0021	0,0023	
	Electricidad	0,0007	0,0003	0,0035	0,0123	
	Subproductos	-0,0016	-0,0001	-0,0006	-0,0034	
	Tratamiento Resid.	-0,0010	-0,0009	-0,0012	-0,0009	
	Servicios calientes	0	0	0	0,0004	
TOTAL	0,1757	0,1328	0,1548	0,1243	0,0066	

Que gráficamente resulta:



Gráfica 17 - Consumo de agua de los procesos de fabricación de BD

6.5 INTERPRETACIÓN DE LOS RESULTADOS

Para realizar un análisis más profundo de cada impacto, se utilizarán diagramas de contribuciones de impacto como los de la Figura 26, 27, 28 y 29, que vienen a explicar la causa de que un material o proceso, tenga un determinado valor de impacto según los subprocesos de estos que existen en el background de este ACV. De esta forma se puede dilucidar, el origen real de cada impacto, teniendo una visión más ampliada del proceso completo desde su principio de vida.

De los resultados del potencial de calentamiento global se observa que solo superan al de producción del butadieno por la vía fósil los procesos de producción de butadieno la que utiliza el catalizador de Y:Zn debido a su elevado consumo eléctrico.

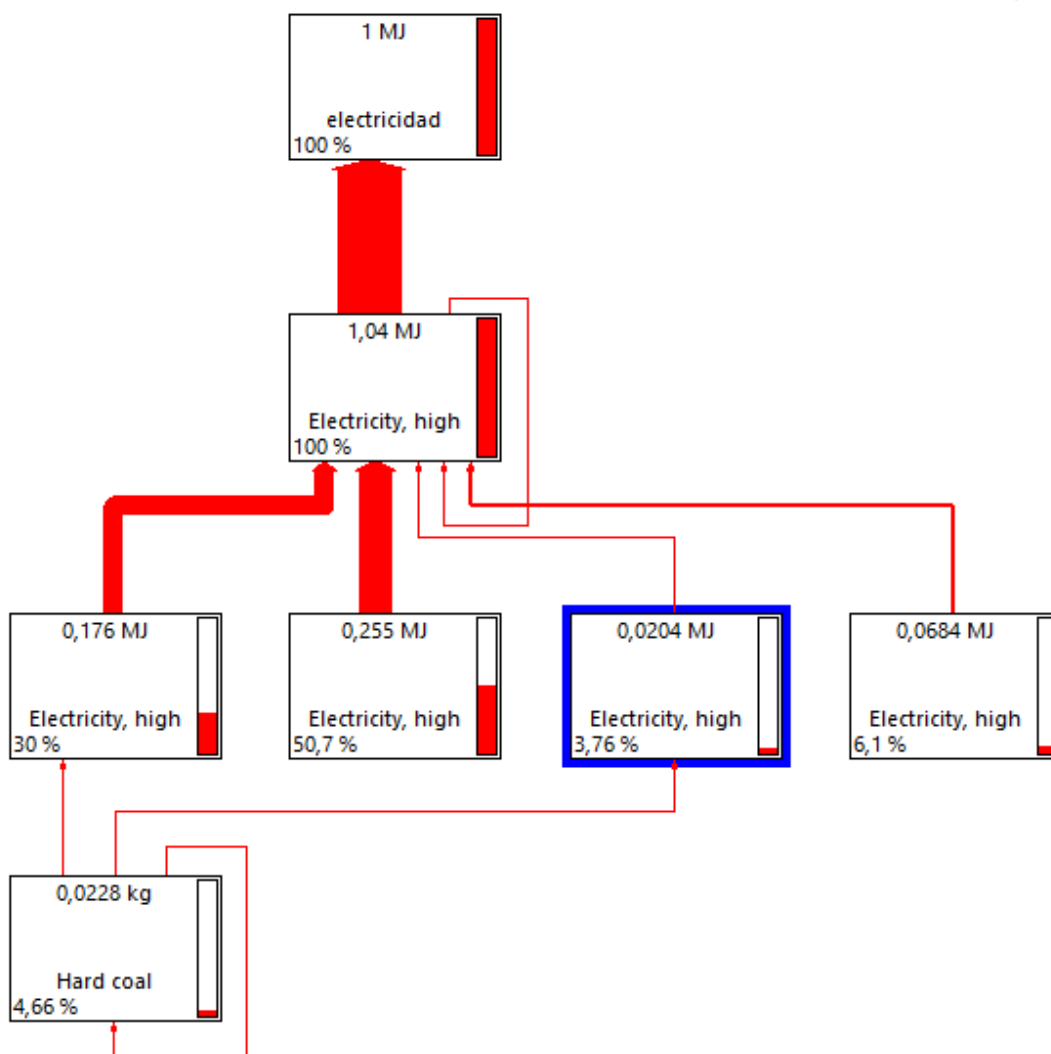


Figura 26 - Red de contribuciones de GWP de uso de 1 MJ de electricidad

Como se observa de la figura anterior, este impacto de procedente del consumo eléctrico es contribuido en su mayoría por la producción eléctrica a partir de carbón usando lignina (50,7%) y antracita (30%).

Aunque no afecta en este caso a la planta que utiliza el catalizador anteriormente mencionado, el otro proceso que más influye en este impacto es la utilización de DMF para la separación de los butenos en las plantas que generan este subproducto como son las de catalizador de Ta₂O₃ y ZrO₂.

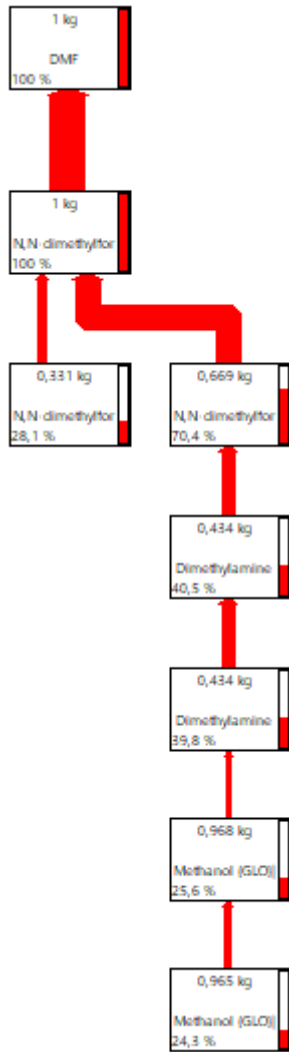


Figura 27 - Rede de contribuciones de GWP de uso de 1 kg de DMF

Se ve que la contribución principal del GWP para este proceso es la producción de este a partir del Metanol.

De los resultados de agotamiento de recursos fósiles se observa que ninguno supera el impacto en esta categoría del butadieno por la vía fósil, llegando en algunos casos a ser negativo por los créditos ambientales de la generación de subproductos.

Este impacto podría en algunos casos ser mucho menor, ya que al igual que en el caso anterior, las plantas que consumen DMF genera un impacto significativo en esta categoría.

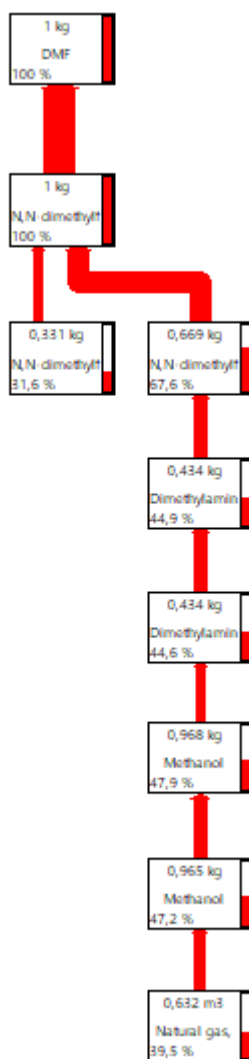


Figura 28 - Rede de contribuciones de ARF de uso de 1 kg de DMF

Como en el caso anterior, de la red de contribuciones del uso de esta materia prima se observa que el impacto viene contribuido de la fabricación del DMF a partir de Metanol, siendo el gas natural consumido en la producción de este último el responsable principal de este impacto.

En la última categoría como era previsible, el impacto de la fabricación de 1,3-BD a partir de bioetanol genera un impacto de consumo de agua mucho mayor al de la vía petroquímica, siendo el proceso que más contribuye el consumo de bioetanol. En este caso, los subproductos generados por las plantas no tienen prácticamente ninguna contribución negativa, puesto que al fin y al cabo estos subproductos sustituyen a otros productos de origen petroquímicos (Hidrógeno, vapor, etileno y propileno), que como se observa del 1,3-BD fósil, no generarían un impacto significativo en esta categoría.

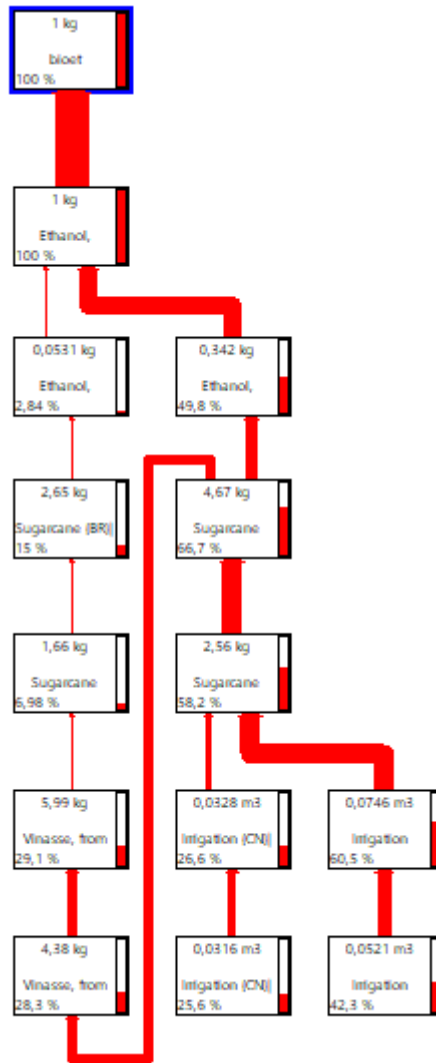


Figura 29 - Red de contribuciones de consumo de agua del uso de 1 kg de Bioetanol

Se observa de la red anterior, que el consumo de agua viene directamente en su mayoría del riego para el cultivo de la materia prima para la producción por fermentación del bioetanol. Como se utilizó el bioetanol a nivel global, y la caña de azúcar es el cultivo más utilizado, por eso otorga la gran mayoría de este consumo. Si se utilizaran bioetanoles de otros países que utilizaran otros cultivos como trigo que requieren menos cantidades de agua¹²⁰, este impacto podría ser menor, teniendo en cuenta también que la caña de azúcar tiene mejor rendimiento en la producción de bioetanol que el trigo¹²¹ y seguramente sería necesario un cultivo mayor de este última para la producción de la misma cantidad de etanol.

En general, en los tres casos anteriormente analizados, los resultados de potencial de calentamiento global son bajos, respecto al butadieno fósil debido en gran parte al impacto negativo por venta de subproductos que en su mayoría provienen de la venta de vapor con el calor sobrante del proceso, que sustituye a la producción de este vapor mediante recursos energéticos fósiles. Hay que añadir, que estos resultados serán un reflejo de la realidad en el caso de que exista salida en el mercado para este subproducto. La planta que menos impacto intrínseco del proceso tiene es la que utiliza el catalizador de ZrO₂. Esto es conveniente, ya que puede ocurrir que la condición anterior no se dé y que el resto de procesos con mucha venta de vapor y por tanto con mucho impacto negativo por ello, aumenten considerablemente su potencial de calentamiento global, mientras que el de ZrO₂ no tanto.

En esta categoría, los procesos que más influencia tienen, aparte del bioetanol que tienen un

impacto comparablemente parecido entre las 4 plantas, son el consumo de DMF que afecta a los catalizadores que tienen butenos como subproductos. Este impacto es difícil de evitar ya que esta sustancia es necesaria para llevar a cabo la destilación extractiva, solo cabría mejorar más el proceso para reducir el consumo de esta sustancia, o reducir las emisiones durante su proceso de fabricación.

El otro proceso que más influencia tiene es el consumo eléctrico, puesto que analizando el mix energético utilizado, la mayoría de esta producción eléctrica proviene de la quema del carbón. Este consumo eléctrico se hace mucho más notable en los procesos que contienen un sistema de adsorción PSA que consume la mayor parte de este servicio en esos procesos. Este impacto podría ser reducido por la mejora de este sistema de separación o directamente por el consumo de electricidad que provenga de fuentes renovables, que evitarían en gran medida la emisión de gases de efecto invernadero de origen fósil.

En la otra categoría, el agotamiento de recursos fósiles de los procesos estudiados se reduce en gran medida respecto al fósil, llegando hasta ser negativo por la venta de subproductos, sobre todo vapor, como ocurría en el caso de la categoría anterior. Respecto a los impactos más significativos, donde más se concentran es en el consumo de electricidad y de DMF como en el caso del potencial de calentamiento global.

Por último, el consumo de agua viene principalmente del bioetanol utilizado como materia prima por el proceso de riego del cultivo utilizado para la fermentación. Este impacto podría solo ser reducido mejorando las técnicas en el cultivo de los productos para la producción del butadieno, ya que la gran mayoría del consumo viene del riego de los cultivos. Otra opción, en todo caso, sería utilizar un cultivo que mejorara en relación al consumo de agua frente al rendimiento de producción de etanol respecto al considerado en este estudio (caña de azúcar).

7 CONCLUSIONES

En este punto, y como punto final de todo el trabajo anteriormente descrito, se expondrán las conclusiones siguiendo el esquema del trabajo, en primer lugar, técnicas, económicas y por último, medioambientales. El resumen de los resultados anteriores es el mostrado en la siguiente tabla:

Tabla 102 - Resumen de resultados técnico, económico y ambiental

		PRODUCCIÓN DE 13-BD CON CATALIZADOR DE:			
		Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
ANÁLISIS TÉCNICO	Nº de equipos del proceso principal	30	22	17	10
	Generación vapor	SÍ	SÍ	SÍ	NO
ANÁLISIS ECONÓMICO	Costes Inversión (\$)	43.932.278	61.368.144	41.675.732	30.534.840
	Costes producción (\$/año)	29.002.328	25.816.859	29.439.124	27.257.715
	VAN (\$)	-57.467.376	-45.433.877	-50.831.856	6.594.167
ANÁLISIS AMBIENTAL	GWP (t _{CO2-EQ} /t _{13BD})	0,2367	0,4053	1,0263	2,4081
	ARF (t _{OIL-EQ} /t _{13BD})	-0,245	-0,2221	0,2231	-0,0744
	ARH (dam ³ /t _{13BD})	0,1757	0,1328	0,1548	0,1243

7.1 ANALISIS TÉCNICO

En general, las plantas estudiadas se pueden clasificar perfectamente por orden de complejidad, resultando la planta que usa el catalizador de Ta₂O₃ como la planta con mayor complejidad de diseño seguida por la de ZrO₂, HF:Zn y por último, la de Y:Zn. Conocido esto, los aspectos más importantes y que influirán en los siguientes análisis serán los siguientes:

Primero, se observó que las plantas de dos pasos, tal y como se ve de los resultados, son mucho más complejas que las de 1 paso por el hecho de separar la reacción en dos etapas concluyendo su diseño en plantas más extensas y con más equipos. En cambio, esta separación de la reacción de conversión del etanol a butadieno tiene la ventaja de que el hidrógeno (producto de reacción), el cual es un gas ligero, es separado más fácilmente del producto (que tiene un punto de ebullición relativamente bajo) y de los subproductos (que pueden contener también gases ligeros como etilenos, butenos, propileno etc.), evitando así el uso de sistemas de separación más complejos y costosos como sistemas de adsorción PSA o VSA.

Respecto a las características que debe tener el catalizador, se prefieren selectividades elevadas antes que conversiones. Además, en el caso de los procesos de dos pasos, son convenientes relaciones de etanol/acetaldéhidó elevadas en el segundo paso, ya que al ser muy soluble el butadieno en etanol, se hace más sencilla la separación en una etapa de líquido-vapor del producto de otros posibles subproductos de bajos puntos de ebullición como etileno y propileno.

Otra característica para tener un buen catalizador para la producción de butadieno a partir de

etanol es directamente que no genere demasiados subproductos con bajos puntos de ebullición, entre los que destacan los butenos (1-buteno y 2-buteno), ya que al ser compuestos muy parecidos al butadieno es difícil su separación, teniendo que ser separados del producto mediante una destilación extractiva con DMF (N,N-dimetilformamida), con el aumento de la complejidad de la planta y el coste de este producto utilizado que conlleva.

Por otro lado, respecto al diseño de la planta, se observa que es una opción más interesante la quema de las corrientes orgánicas de mezcla de subproductos que separarlas para su venta cuando se encuentren en bajas cantidades, pudiendo así conseguir el autoabastecimiento de servicios calientes en la planta e incluso la generación de vapor con el calor sobrante.

7.2 ANÁLISIS ECONÓMICO

Teniendo en cuenta el precio mínimo de venta calculado o las rentabilidades de los procesos, basándose en estos resultados se indica que el proceso más rentable de producción de butadieno a partir de bioetanol es el de 1 paso que utiliza el catalizador de Y:Zn, seguido por el de 2 pasos de ZrO₂ y por el de Hf:Zn y Ta₂O₃ (de 1 paso y 2 pasos respectivamente). Las características principales de cada proceso que da lugar a estos resultados son las expuestas a continuación

La planta que utiliza el catalizador de Y:Zn es la mayor productora de butadieno y otros subproductos valiosos como etileno, hidrógeno y propileno. Aunque no tiene la mayor selectividad que los otros 3 catalizadores, solo genera dos subproductos, que a pesar de ser difíciles de separar por tratarse de gases ligeros, tienen un alto valor añadido e interesa su separación para la venta. Esto compensa el sobrecoste de separación mediante adsorción en sistemas PSA, a pesar de que los grandes caudales a separar generan un consumo eléctrico muy elevado. Esto no ocurre con la planta que utiliza el catalizador de Hf:Zn, ya que a pesar de ser una planta de un paso, y por lo tanto como se indicó en el apartado anterior el proceso puede llevarse a cabo con un menor número de equipos y por lo tanto menos consumo de servicios, la utilización de un sistema PSA encarece el proceso y acaba resultando menos rentable que el proceso que utiliza el catalizador de ZrO₂ (de 1 paso).

Otro inconveniente para la rentabilidad de los procesos que también afecta al proceso con catalizador de Hf:Zn y al de Ta₂O₃, es la generación de butenos, ya no solo por el aumento de la complejidad de la planta por tener que añadir un sistema de separación por destilación extractiva, sino por la utilización de DMF para llevarla a cabo, suponiendo en ambos casos el segundo mayor gasto de consumos de la planta después del bioetanol.

Esto último, sumado al gran tamaño de la planta, hace que el proceso con catalizador de Ta₂O₃, teniendo una selectividad a butadieno relativamente buena, sea la planta menos interesante en el ámbito económico, siendo autoabastecida en servicios calientes y la mayor productora de vapor para venta.

7.3 ANÁLISIS AMBIENTAL

En el análisis ambiental se estudiaron tres categorías de impacto de las de que se puede añadir como aspectos más relevantes los siguientes:

Del potencial de calentamiento global, la planta que obtiene mejores resultados es la que usa el catalizador de Ta₂O₃, seguido por la de ZrO₂ y Hf:Zn. La planta con catalizador de Y:Zn, obtiene un resultado en esta categoría mayor que el impacto producido por el butadieno a partir de naftas (fósil), ya que sus servicios calientes provienen del gas natural (no renovable) para los calentamientos a altas temperaturas y de vapor industrial importado para el resto, ya que esta planta no es capaz de autoabastecerse en estos servicios calientes como sí pasa con las demás.

En el agotamiento de recursos fósiles, para que tenga sentido la sustitución del proceso tradicional de producción de butadieno a partir de naftas por el de bioetanol, se debe pretender

que el impacto en estas últimas rutas de producción sea casi nulo o muy inferior respecto al otro, ya que entre otras cosas lo que se pretende con la vía de producción a partir del bioetanol es la independencia de la producción de butadieno con los recursos derivados del petróleo.

Esta condición de mayor independencia de los recursos fósiles respecto al butadieno a partir de naftas, se cumple en los 4 procesos, llegando en algunos casos incluso a tener impactos negativos, donde la planta que utiliza el catalizador de Ta₂O₃ consigue el menor impacto, aunque también hay que apuntar que al igual que en el caso de la categoría de impacto anteriormente comentada, esto es producido por la gran venta de vapor sobrante que tiene. Igualmente al caso anterior, si no fuese posible esta venta de vapor, la planta que utiliza el catalizador de ZrO₂ volvería a ser la que menor impacto tendría, al no poder ganar dichos procesos créditos ambientales por la sustitución del producto de vapor industrial.

Respecto al consumo de agua, se puede decir que los 4 procesos tienen un impacto parecido, debido a que éste proviene del principalmente del bioetanol, que en todos los casos su consumo por kilogramo de butadieno es muy similar.

Esta categoría es la que puede abrir el debate de la sustitución de una vía de producción de butadieno por otra, puesto que la vía fósil siempre tendrá un alto impacto en, por ejemplo, el agotamiento de recursos fósiles, pero que en comparación con la vía a partir de bioetanol su consumo de agua es casi despreciable.

7.4 GENERALES

De los 4 catalizadores estudiados, el de Y:Zn destaca claramente por su potencial en el ámbito económico. Por lo tanto al ser uno de los catalizadores con resultados menos probados (como también ocurre con el de ZrO₂), es un buen candidato para su revisión en busca de la refutación de sus características encontradas en la literatura. Cabe añadir que la producción de butadieno utilizando este catalizador debe mejorar su proceso para terminar de ser competitivo en el ámbito ambiental con el de producción a partir de naftas. En este caso esto podría conseguirse con la generación de energía industrial a partir de solo exclusivamente fuentes de energía renovables como el uso de biocombustibles o intensificación eléctrica de origen renovable de los procesos, con la complicación técnica que esto supone.

El resto de catalizadores, al menos en los tiempos actuales, no tendrían sentido en la industria por su baja rentabilidad económica, aunque desde el punto de vista ambiental resultan mejores que el anterior. Este beneficio ambiental de estos 3 catalizadores podría ser potenciado si se cumpliera la condición mencionada para la mejora del otro catalizador, además de la oferta de productos de origen no fósil en la industria en general y la posibilidad de salida de los subproductos considerados al mercado.

En general se puede decir que esta vía de producción de butadieno solo tiene sentido si toda la industria se enfocara en la generación de todos sus productos con independencia de los recursos fósiles y considerando que este cambio de modelo de producción industrial hacia una vía más renovable evitará impactos como efecto invernadero o agotamiento de recursos fósiles, pero existirá una mayor repercusión en otros como el consumo de recursos hídricos.

REFERENCIAS

- [1] G.M. Cabello Gonzalez, P. Concepcion, A.L. Villanueva Perales, A. Martinez, M. Campoy, F. Vidal-Barrero. Ethanol conversion into 1,3-butadiene over a mixed Hf-Zn catalyst: Effect of reaction conditions and water content in ethanol. *Fuel Processing Technology* 193 (2019) 263–272
- [2] C. E. Cabrera Camacho, Bernabe Alonso-Fariñas, A. L. Villanueva Perales, F. Vidal-Barrero, Pedro Ollero. Techno-economic and Life-Cycle Assessment of One-Step Production of 1,3-Butadiene from Bioethanol Using Reaction Data under Industrial Operating Conditions. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2020, 8, 10201–10211
- [3] G.M. Cabello González, R. Murciano, A.L. Villanueva Perales, A. Martínez, F. Vidal-Barrero, M. Campoy. Ethanol conversion into 1,3-butadiene over a mixed Hf-Zn catalyst: A study of the reaction pathway and catalyst deactivation. *Applied Catalysis A, General* 570 (2019) 96–106
- [4] UE: https://ec.europa.eu/clima/policies/strategies/2050_es
- [5] Grupo de Bioenergía: <http://grupo.us.es/bioenergia/es/>
- [6] . D. Dussol, N. Cadran, N. Laloue, L. Renaudot, J.-M. Schweitzer, New insights of Butadiene production from Ethanol: elucidation of concurrent reaction pathways and kinetic study, *Chemical Engineering Journal* (2019)
- [7] National Toxicology Program, Institute of Environmental Health Sciences, National Institutes of Health (NTP). 1992. National Toxicology Program Chemical Repository Database. Research Triangle Park, North Carolina.
- [8] McAuliffe C. Solubility in Water of Paraffin, Cycloparaffin, Olefin, Acetylene, Cycloolefin and Aromatic Hydrocarbons. *J Phys Chem* 70: 1267-75 (1966)
- [9] O'Neil, M.J. (ed.). *The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals*. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013., p. 267
- [10] Haynes, W.M. (ed.). *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 95th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2014-2015, p. 3-76
- [11] Braker W, Mossman A; Matheson Gas Data Book 6th ED p.79 (1980)
- [12] *CRC Handbook of Chemistry and Physics, Internet Version 2005*, CRC Press, Boca Raton, FL, 2005, p.6-76
- [13] *CRC Handbook of Chemistry and Physics, Internet Version 2005*, CRC Press, Boca Raton, FL, 2005, p.8-98
- [14] 6: U.S. Coast Guard. 1999. Chemical Hazard Response Information System (CHRIS) - Hazardous Chemical Data. Commandant Instruction 16465.12C. Washington, D.C.: U.S. Government Printing Office.
- [15] Verschueren, K. *Handbook of Environmental Data of Organic Chemicals*. 2nd ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold Co., 1983., p. 297
- [16] American Chemistry Council. *Product Stewardship Guidance Manual*. 2019
- [17] Norman L. Morrow. The Industrial Production and Use of 1,3-Butadiene. *Environmental Health Perspectives*. Vol. 86, pp. 7-8, 1990

- [18] IHS Markit's Chemical Economics Handbook –*Butadiene*, 2019
- [19] Jones, MD 2014, 'Catalytic transformation of ethanol into 1,3-butadiene', *Chemistry Central Journal*, vol. 8, 53
- [20] ICIS: <https://www.icis.com/explore/resources/news/2017/02/16/10079906/chemical-profile-europe-butadiene/>
- [21] Argus Butadiene. Argus DeWitt Butadiene. Issue 18-1 Friday 5 January 2018
- [22] Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Vol. 6. Butadiene. pg. 389
- [23] Claude White. Butadiene production process overview. *Chemico-Biological Interactions* 166 (2007) 10–14
- [24] Manual de procesos de producción de petroquímicos. Tomo I Manual de procesos de producción de petroquímicos. Tomo I. Capítulo 3.2. Pg. 3-11
- [25] Johann T.,Schindler G.P., Brodhagen A., Sven, Crone S., Benfer R., Sigl M.M., Duda M. (2004). *Method for the production of butadiene and 1-butene. US7488857B2*. BASF Aktiengesellschaft, Ludwigshafen (DE)
- [26] G.M. Cabello González, R. Murciano, A.L. Villanueva Perales, A. Martínez, F. Vidal-Barreroa, M. Campoy. Ethanol conversion into 1,3-butadiene over a mixed Hf-Zn catalyst: A study of the reaction pathway and catalyst deactivation. 570 (2019) 96–106
- [27] Ekaterina V. Makshina, Michiel Dusselier, Wout Janssens, Jan Degréve, Pierre A. Jacobs, Bert F. Sels. Review of old chemistry and new catalytic advances in the on-purpose synthesis of. *Chem. Soc. Rev.* 2014.43.7917-7953.
- [28] W. J. TOUSSAINT, J. T. DUNN, AND D. R. JACKSON. Production of Butadiene from Alcohol. Carbide and Carbon Chemicals Corporation, South Charleston, W. Va.
- [29] Matthew D. Jones, Callum G. Keir, Carlo Di Iulio, Ruth A. M. Robertson, Cliff V. Williams, David C. Apperley. Investigations into the conversion of ethanol into 1,3-butadiene. *Catal. Sci. Technol.*, 2011, 1, 267–272
- [30] S.K.BHATTACHARYYA AND B. N. AVASTHI. ONE-STEP CATALYTIC CONVERSION OF ETHANOL TO BUTADIENE IN A FLUIDIZED BED. Department of Applied Chemistry, Indian Institute of Technology, Kharagpur, India
- [31] Pavlo I. Kyriienko, Olga V. Larina, Sergiy O. Soloviev, Svitlana M. Orlyk, Christophe Calers, Stanislaw Dzwigaj. Ethanol Conversion into 1,3-Butadiene by the Lebedev Method over MTaSiBEA Zeolites (M = Ag, Cu, Zn). *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2017, 5, 2075–2083
- [32] G. Pomalaza, G. Vofo, M. Capron and F. Y. Dumeignil, *Green Chem.*, 2018, DOI: 10.1039/C8GC01211C
- [33] Yasumasa Sekiguchi, Sohta Akiyama, Wataru Urakawa, To-ru Koyama, Akimitsu Miyaji, Ken Motokura, Toshihide Baba, One-step catalytic conversion of ethanol into 1,3-butadiene using zinc-containing talc, *Catalysis Communications* (2015)
- [34] Alexander Klein, Kristina Keisers, Regina Palkovits, Formation of 1,3-butadiene from ethanol in a two-step process using modified zeolite-rbta catalysts, *Applied Catalysis A, General*
- [35] B.B. CORSON, E. JONES, C.E. WELLING, J.A. HINCKLEY, E.E. STAHLY. BUTADIENE FROM ETHYL ALCOHOL. *Catalysis in the One- and Two-Step Processes*. Mellon Institute, Pittsburgh, Pa.
- [36] (Burla, Jonathan; Fehnel, Ross; Louie, Philip; and Terpeluk, Peter, "TWO-STEP PRODUCTION OF 1,3-BUTADIENE FROM METHANOL" (2012). Senior Design Reports (CBE). 42.

- [37] Matthew D Jones. Catalytic transformation of ethanol into 1,3-butadiene. *Jones Chemistry Central Journal* 2014, 8:53
- [38] A. Posada, Akshay D. Patel, Alexander Roes, Kornelis Blok, André P.C. Faaij, Martin K. Patel. Potential of bioethanol as a chemical building block for biorefineries: Preliminary sustainability assessment of 12 bioethanol-based products *John. Energy & Resources, Copernicus Institute of Sustainable Development, Utrecht University, Budapestlaan 6, NL-3584 CD Utrecht, The Netherlands*
- [39] B. B. CORSON, . E. JONES, C. E. WELLING, J. A. HINCKLEY, E. E. STAHL. BUTADIENE FROM ETHYL ALCOHOL Catalysis in the One- and Two-Step Processes. Mellon Institute, Pittsburgh, Pa.
- [40] Vanessa Dagle, Richland, Robert A . Dagle (2018).SINGLE STEP CONVERSION OF ETHANOL TO BUTADIENE. US0222813 A1. Richland, WA (US). Bulletin of Romanian Chemical Engineering Society, Vol. 5, No. 1, 2018, Guillaume Pomalaza, Paola Arango Ponton, Mickaël Capron, Franck Dumeignil. Ethanol-to-butadiene: the reaction and its catalysts. *Catal. Sci. Technol.*,2020,10,4860
- [41] H. Zhou a, J.Y. Wang a, X. Chen a, Chi-Lin O'Young b, Steven L. Suib. Studies of oxidative dehydrogenation of ethanol over manganese oxide octahedral molecular sieve catalysts. *Microporous and Mesoporous Materials* 21 (1998) 315- 324.
- [42] R. Tesser, V. Maradei, M. Di Serio, and E. Santacesaria. Kinetics of the Oxidative Dehydrogenation of Ethanol to Acetaldehyde on V₂O₅/TiO₂-SiO₂Catalysts Prepared by Grafting. *Ind. Eng. Chem. Res.*2004,43,1623-1633
- [43] Jeerati Ob-eye , Piyasan Praserttham, Bunjerd Jongsonjitt. Dehydrogenation of Ethanol to Acetaldehyde over Different Metals Supported on Carbon Catalysts. *Catalysts* 2019, 9, 66
- [44] Weili Dai, Shanshan Zhang, Zhiyang Yu, Tingting Yan, Guangjun Wu, Najia Guan, and Landong Li. Zeolite Structural Confinement Effects Enhance One-Pot Catalytic Conversion of Ethanol to Butadiene. *ACS Catal.* 24 Apr 2017
- [45] Qing-NanWang,LeiShi,andAn-HuiLu. Highly Selective Copper Catalyst Supportedon Mesoporous Carbonfor the Dehydrogenation of Ethanol to Acetaldehyde. *ChemCatChem*2015,7,2846–2852
- [46] Garbarino, G., *Catalysis Today*, <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2019.01.002>
- [47] Ho-Jeong Chae, Tae-Wan Kim, Young-Kyun Moon, Han-Kyu Kim, Kwang-Eun Jeong, Chul-Ung Kim, Soon-Yong Jeong. Butadiene production from bioethanol and acetaldehyde over tantalum oxide-supported ordered mesoporous silica catalysts. *Applied Catalysis B: Environmental* 150– 151 (2014) 596–604
- [48] Zheng Han, Xiang Li, Minhua Zhang, Zongzhang Liu, Meixiang Gao. Sol–gel synthesis of ZrO₂–SiO₂ catalysts for the transformation of bioethanol and acetaldehyde into 1,3-butadiene. *RSC Adv.*, 2015, 5, 103982
- [49] Meixiang Gao. Minhua Zhang. Haoxi Jiang. 1,3-Butadiene Production from Bioethanol and Acetaldehyde over Zirconium Oxide Supported on Series Silica Catalysts. *Catalysis Surveys from Asia* (2018) 22:118–122
- [50] Qiangqiang Zhu, Bin Wang, Tianwei Tan. Conversion of Ethanol and Acetaldehyde to Butadiene over MgO–SiO₂Catalysts: Effect of Reaction Parameters and Interactionbetween MgO and SiO₂ on Catalytic Performance. *ACS Sustainable Chem. Eng.*2017, 5, 722–733
- [51] Pavlo I. Kyriienko, Olga V. Larina, Sergiy O. Soloviev, Svitlana M. Orlyk, Stanislaw Dzwigaj. High selectivity of TaSiBEA zeolite catalysts in 1,3-butadiene productionfrom ethanol and acetaldehyde mixture. *Catalysis Communications* 77 (2016) 123–126
- [52] C. E. Cabrera Camacho, Bernabé Alonso-Fariñas, A. L. Villanueva Perales, F. Vidal-Barrero, Pedro Ollero. Techno-economic and Life-Cycle Assessment of One-Step Production of 1,3-Butadiene from

- Bioethanol Using Reaction Data under Industrial Operating Conditions. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2020, 8, 10201–10211, D. Cespi, F. Passarini, I. Vassura, F. Cavani. Butadiene from biomass, a life cycle perspective to address sustainability in the chemical industry *Green Chem.*, 2015
- [53] Lewandowski, M, Babu, GS, Vezzoli, M, Jones, MD, Owen, RE, Mattia, D, Plucinski, P, Mikolajska, E, Ochendusko, A & Apperley, DC 2014, 'Investigations into the conversion of ethanol to 1,3-butadiene using MgO: SiO₂ supported catalysts', *Catalysis Communications*, vol. 49, pp. 25-28.
- [54] Trees De Baerdemaeker, Mathias Feyen, Ulrich Muller, Bilge Yilmaz, Feng-Shou Xiao, Weiping Zhang, Toshiyuki Yokoi, Xinhe Bao, Hermann Gies, and Dirk E. De Vos. Bimetallic Zn and Hf on Silica Catalysts for the Conversion of Ethanol to 1,3-Butadiene. *ACS Catal.* 2015, 5, 6, 3393–3397
- [55] Meixiang Gao, Minhua Zhang, Yonghui Li. Transformation of bioethanol to 1,3-butadiene and other bulk chemicals over the surface of Mg–Al catalysts. *RSC Adv.*, 2017, 7, 26935
- [56] Gerald B. Hawkins. Steam Reforming. Types of Reformer Design. GBH ENTERPRISES. VULCAN Catalyst Process Technology Consultancy (2013).
- [57] Vitaly L. Sushkevich, Irina I. Ivanova, Esben Taarning. Ethanol conversion into butadiene over Zr-containing molecular sieves doped with silver. *GreenChem.*, 2015, 17, 2552
- [58] Weili Dai, Shanshan Zhang, Zhiyang Yu, Tingting Yan, Guangjun Wu, Naijia Guan, Landong Li. Zeolite Structural Confinement Effects Enhance One-Pot Catalytic Conversion of Ethanol to Butadiene. *ACS Catal.* 2017, 8, 2760–2773
- [59] Jian Liang Cheong, Yaling Shao, Sherman J. R. Tan, Xiukai Li, Yugen Zhang, and Su Seong Lee. Highly Active and Selective Zr/MCF Catalyst for Production of 1,3-Butadiene from Ethanol in a Dual Fixed Bed Reactor System. *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2016, 4, 4887–4894
- [60] Ethanol conversion into 1,3-butadiene over a mixed Hf-Zn catalyst: a study of the reaction pathway and catalyst deactivation G. M. Cabello González¹, R. Murciano², A. L. Villanueva Perales^{1*}, A. Martínez², F. Vidal-Barrero¹, M. Campoy¹ [1]
- [61] Tingting Yan, Weili Dai, Guangjun Wu, Swen Lang, Michael Hunger, Naijia Guan, and Landong Li. Mechanistic Insights into One-Step Catalytic Conversion of Ethanol to Butadiene over Bifunctional Zn–Y/Beta Zeolite. *ACS Catal.* 2018, 8, 2760–2773
- [62] Estimating Precommercial Heterogeneous Catalyst Price: A Simple Step-Based Method. Frederick G. Baddour, Lesley Snowden-Swan, John D. Super, Kurt M. Van Allsburg. *Org. Process Res. Dev.* 2018, 22, 1599–1605
- [63] Logsdon JE; Ethanol. *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology.* (1999-2017). New York, NY: John Wiley & Sons. Online Posting Date: 18 Jun 2004
- [64] O'Neil, M.J. (ed.). *The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals.* Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013.,
- [65] Hagemeyer HJ; Acetaldehyde. *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology.* (1999-2015). New York, NY: John Wiley & Sons. Online Posting Date: Apr 20, 2014.
- [66] Haynes, W.M. (ed.). *CRC Handbook of Chemistry and Physics.* 95th Edition. CRC Press LLC, Boca Raton: FL 2014-2015.
- [67] Iranian Chemical Engineers Website: www.IrChe.com
- [68] Carlson, Eric C. Don't Gamble With Physical Properties For Simulations. *CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS.* October 1996
- [69] Cabrera Camacho, Camilo Ernesto. ESTUDIO TECNO-ECONÓMICO Y ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA DE LA PRODUCCIÓN DE BIOBUTADIENO A PARTIR DE BIOETANOL. Departamento

de Ingeniería Química y Ambiental. Escuela Técnica Superior de Ingeniería. Universidad de Sevilla, 2020

[70] Huanhuan Sun, Cheng Liu, Zhongfeng Geng, Yang Lu, Yixuan Chen .Isobaric Vapor–Liquid Equilibrium for Three Binary Systems of Acetaldehyde + Ethanol, Ethyl Acetate, 1-Butanol at 101.3 kPa. *J. Chem. Eng. Data* 2017, 62, 2136–2142

[71] S.G.d'ÁVILA, R.S.F.SILVA. Liquid Equilibrium Data by Total Pressure Method Systems Acetaldehyde-Ethanol, Acetaldehyde-Water, and Ethanol-Water. COPRE, Coordenagaodos Programas de Pós-Graduagao de Engenharia, Rio de Janeiro, Brazil

[72] Minhua Zhang, Lihang Chen, Huaming Yang, Jing Ma. Vapor Liquid Equilibria for Acetic Acid–Acetaldehyde–Crotonaldehyde System: Gibbs Ensemble Molecular Simulation for Pure Components and Binary Systems and NRTL Model Prediction for Ternary System. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2018, 57, 2353–2364

[73] Huanhuan Sun, Cheng Liu, Zhongfeng Geng, Yang Lu, Yixuan Chen .Isobaric Vapor–Liquid Equilibrium for Three Binary Systems of Acetaldehyde + Ethanol, Ethyl Acetate, 1-Butanol at 101.3 kPa. *J. Chem. Eng. Data* 2017, 62, 2136–2142

[74]Dechema, “Detherm...on the web,” 2016. [Online]. Available: <https://i-systems.dechema.de/detherm/mixture.php>.

[75] *Journal of Chemical Engineering of Japan*, Vol. 42, No. 6, pp. 376–380, 2009

[76] Maria Teresa Hernández Nodarse. TENDENCIAS ACTUALES EN LA PRODUCCIÓN DE BIOETANOL. 2007. TEC Landívar, Universidad Rafael Landívar.

[77] C. Chuck-Hernández, E. Pérez-Carrillo, E. Heredia-Olea, S.O. Serna-Saldívar. Sorghum as a multifunctional crop for bioethanol production in Mexico: technologies, advances and improvement opportunities. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* Vol. 10, No. 3 (2011) 529-549

[78] C. E. Wyman. *Handbook on Bioethanol: Production and Utilization*, Washington, DC: Taylor & Francis, 1996.)

[79] Jeppe Rass-Hansen, Hanne Falsig, Betina Jørgensen and Claus H Christensen. Perspective Bioethanol: fuel or feedstock?. *Chem Technol Biotechnol* 182:329 – 333 (2007)

[80] Mohammad J. Taherzadeh and Keikhosro Karimi. Chapter 3: Bioethanol: Market and Production Processes. 2008

[81] Ortiz Marcos, Susana. Buscando combustibles alternativos: el bioetanol. *anales de mecánica y electricidad*. 2003

[82] D. Hill and F. C. Justice, “Understand thermodynamics to improve process simulations,” *Chem. Eng. Prog.*, vol. 107, no. 12, pp. 20–25, 2011

[83] Bertucco. A, Barolo. M, Elvassore. N. Thermodynamic Consistency of Vapor-Liquid Equilibrium Data at High Pressure. *AIChE Journal*. Vol. 43. N°2

[84] S. SIRCAR & T. C. GOLDEN (2000) Purification of Hydrogen by Pressure Swing Adsorption, *Separation Science and Technology*, 35:5, 667-687, DOI: 10.1081/SS-100100183)

[85] Gael D. Ulrich, Palligarnai T. Vasudevan. How To Estimate Utility Costs. University of New Hampshire. *CHEMICAL ENGINEERING*. WWW.CHE.COM. APRIL 2006

[86] *Chemical Engineering Journal*, página web, The Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI), última consulta: mayo 2019 www.chemengonline.com/pci

[87] (SunSirs. China Commodity Data Group. <http://www.sunsirs.com>

[88] : Precio Gas. <https://preciogas.com/faq/precio-kwh>

- [89] S.A. Klein y F.L. Alvarado, "Engineering Equation Solver Software (EES)", Academia Versión 6.271 (20-07-2001).
- [90] Gasservei. Ficha técnica. R-449A)
- [91] Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 7th ed. (1999-2015). New York, NY: John Wiley & Sons. Online Posting Date: Dec 15, 2006
- [92] (Kemp I C, Pinch Analysis and Process Integration, Second Edition, 2007, Butterworth-Heinemann)
- [93] Zhigang Lei , Chengyue Li & Biaohua Chen (2003) Extractive Distillation: A Review, Separation & Purification Reviews, 32:2, 121-213, DOI: 10.1081/SPM-120026627
- [94] Z. Lei et al. / Chemical Engineering Journal 85 (2002) 379–386
- [95] (Kovach, 1979; Walas, 1988
- [96] Liemberger, W., Groß, M., Miltner, M., & Harasek, M. (2017). *Experimental analysis of membrane and pressure swing adsorption (PSA) for the hydrogen separation from natural gas. Journal of Cleaner Production, 167, 896–907*
- [97] JR Couper, WR Penney, JR Fair, SM Walas. Chemical process equipment: selection and design Chapter 21. (2005)
- [98] A. Fedotov, G. Konstantinov, V. Uvarov, M. Tsodikov, S. Paul, S. Heyte, P. Simon, F. Dumeignil. The production of 1,3-butadiene from bio-1-butanol over Re-W/ α -Al₂O₃ porous ceramic converter. Catalysis Communications 128 (2019) 105714
- [99] Marcos A. das Neves, Toshinori Kimura, Naoto Shimizu, Mitsutoshi Nakajima. State of the Art and Future Trends of Bioethanol Production. Dynamic Biochemistry, Process Biotechnology and Molecular Biology . 2007 Global Science Books
- [100] O'Neil, M.J. (ed.). The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Cambridge, UK: Royal Society of Chemistry, 2013., p. 696
- [101] Nordio, M., Wassie, S. A., Van Sint Annaland, M., Pacheco Tanaka, D. A., Viviente Sole, J. L., Gallucci, F. (2020). *Techno-economic evaluation on a hybrid technology for low hydrogen concentration separation and purification from natural gas grid. International Journal of Hydrogen Energy*
- [102] Ohs, B., Falkenberg, M., Wessling, M. (2019). *Optimizing a hybrid membrane-pressure swing adsorption processes for biogenic hydrogen recovery. Chemical Engineering Journal.*
- [103] <https://user.eng.umd.edu/~adomaiti/chbe446/literature/ChECostIndexJan2015.pdf>
- [104] Márquez Robles, José L., López Sandoval, Eduardo. Estimado del costo de inversión (1999)
- [105] Happel, John. Jodar, Donald G. Economía de procesos químicos. Ed. Reverté
- [106] Markets Insider, "Ethanol price commodity," *Commodities*: <https://markets.businessinsider.com/commodities/ethanol-price>
- [107] SunSirs. Commodity Data Group. Commodity News. http://www.sunsirs.com/uk/detail_news-864.html
- [108] Duncan Seddon, FRACI, CChem, MSPE, Duncan Seddon & Associates Pty Ltd. THE HIGH PRICE OF BUTADIENE. 2012
- [109] ENDESA, "Gas Empresas," 2018. [Online]. Available: <https://www.endesaclientes.com/empresas/tarifa-gas-empresas.html>.

- [110] R. K. SINNOTT. Coulson & Richardson's Chemical Engineering. Chemical Engineering Design. Volume 6. Fourth edition
- [111] VAM INDUSTRY. Planta de Acetato de Vinilo. Evaluación económica (2016)
- [112] U.S BUREAU OF LABOR STATISTICS. [https://www.bls.gov/oes/current/oes518091.htm#\(2\)](https://www.bls.gov/oes/current/oes518091.htm#(2))
- [113] SunSirs. Commodity Data Group. Commodity News. http://www.sunsirs.com/uk/detail_news-657.html
- [114] SunSirs. Commodity Data Group. Commodity News. http://www.sunsirs.com/uk/detail_news-1118.html
- [115] SunSirs. Commodity Data Group. Commodity News: http://www.sunsirs.com/uk/detail_news-966.html
- [116] González Falcón, Rocio; Velázquez Alonsa, Davida. Tecnología Energética. Tablas y Gráficos. ETSI-US
- [117] Gestión ambiental Análisis del ciclo de vida Principios y marco de referencia (ISO 14040:2006)
- [118] Vasilis Fthenakis, Hyung Chul Kim. Life-cycle uses of water in U.S. electricity generation. Renewable and Sustainable Energy Reviews 14 (2010) 2039–2048
- [119] Gordon B. Haxel, Sara Boore, and Susan Mayfield from USGS; vectorized by User:michbich - <http://pubs.usgs.gov/fs/2002/fs087-02/>
- [120] J.M. Dabrowski, K. Murray, P.J. Ashton, J.J. Leaner. Agricultural impacts on water quality and implications for virtual water trading decisions. ECOLOGICAL ECONOMICS 68 (2009) 1074–1082
- [121] Christian Hernández, Carlos Escamilla-Alvarado, Arturo Sánchez, Enrique Alarcón, Fabio Ziarelli, Ricardo Musule, Dania Valdez-Vazquez. Wheat straw, corn stover, sugarcane, and Agave biomasses: chemical properties, availability, and cellulosic-bioethanol production potential in Mexico. Biofuels, Bioprod. Bioref. 13:1143–1159 (2019)

ANEXO I: Procesos de fabricación y cálculo de coste de los catalizadores

En este anexo, se analizará el procedimiento de obtención de cada catalizador proporcionado en la bibliografía expuesta anteriormente.

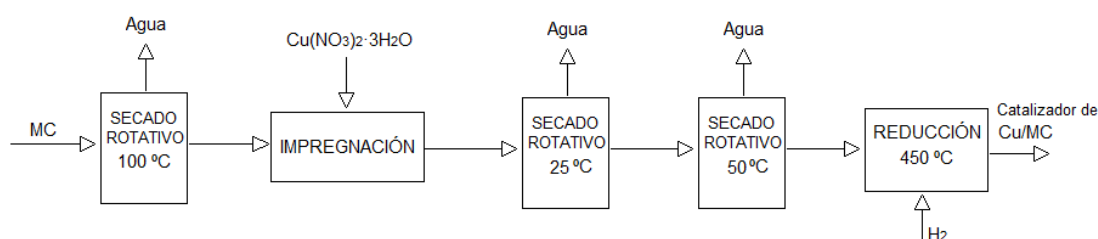
Esto es importante puesto que la preparación de cada catalizador, dependiendo de cuál sea su procedimiento para la obtención, tendrá repercusiones directas tanto en el aspecto económico, ya que este proceso determinará su precio, y en el ámbito ambiental, los cuales son el objetivo de análisis del presente trabajo.

Catalizador de Cu (2 Pasos)

Este primer catalizador consiste en uno formado por óxido de cobre (al 10% en peso de expresado en Cu). En este proyecto, su función sería la de satisfacer la reacción química de la primera etapa de ambos procesos de dos pasos a estudiar, a partir de la conversión de acetaldehído en etanol.

Este cobre se encuentra soportado por un material carbonoso mesoporoso (MC) con una superficie específica mayor de 545 m²/g y un diámetro de poro de entre 4,4 y 5,8 nm.

El proceso para la fabricación de este catalizador, empieza por el secado de este material para eliminar posibles restos de agua, a una temperatura de 120 °C durante 2 horas. Para impregnar el compuesto metálico al soporte se realiza una impregnación en seco a partir de la mezcla del MC con una solución acuosa de 0,625 g/mL de Cu(NO₃)₂·3H₂O. Posteriormente, se realizan dos secados sucesivos, uno a 25 °C (o a temperatura ambiente) durante 30 minutos y otro a 50 °C durante 12. Por último, el sólido resultante se reduce en un reactor mediante el uso de H₂ al 10% en volumen, con un ratio de 12 g de H₂ por gramo de MC.



El balance de materia del proceso anterior, viene dado por los siguientes valores calculados a partir de las ecuaciones del Anexo II:

MATERIALES			EMISIONES
MC (g)	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O (g)	H ₂ (g)	Agua evaporada (g)
0,7047	0,3803	8,457	0,085*

*: El agua evaporada es igual al agua intramolecular del portador

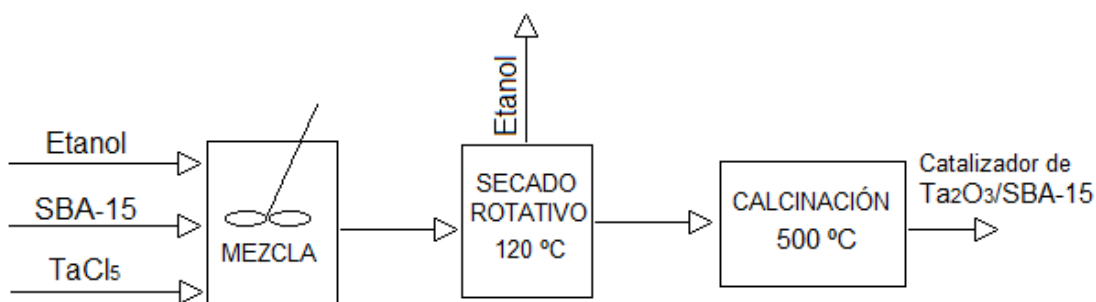
Catalizador de Ta₂O₃ (2 Pasos)

En este caso, el objetivo es la preparación del catalizador de Óxido de Tantalio (III) al 2 % en peso de Ta₂O₃ para la conversión de acetaldehído y etanol a 1,3-butadieno.

A este catalizador, se le añade un soporte de zeolita llamado SBA-15-100 mesoporoso (de 8 nm de diámetro de poro) 2-D hexagonal, que le confiere una superficie específica BET de 805 m²/g.

El proceso para la preparación de este se adiciona TaCl₅ al soporte SBA-15, utilizando como solvente 100 mL de etanol (312,5 mL/g cat). Esta mezcla es agitada durante 2 horas y secada en un secador rotativo durante 10 h a 120 °C, eliminando así el etano. Una vez concluido este paso el catalizador es calcinado a 500°C durante 5 h, obteniendo finalmente así dicho catalizador.

El proceso anterior se podría presentar en forma de diagrama de bloques como:



El balance de materia del proceso anterior, viene dado por los siguientes valores calculados a partir de las ecuaciones del Anexo II:

MATERIALES			EMISIONES
SBA-15 (g)	TaCl ₅ (g)	Etanol (mL)	Etanol Evaporado* (mL)
0,965	0,035	10,93	10,93

*:El etanol evaporado se supone igual que al que se utiliza como disolvente

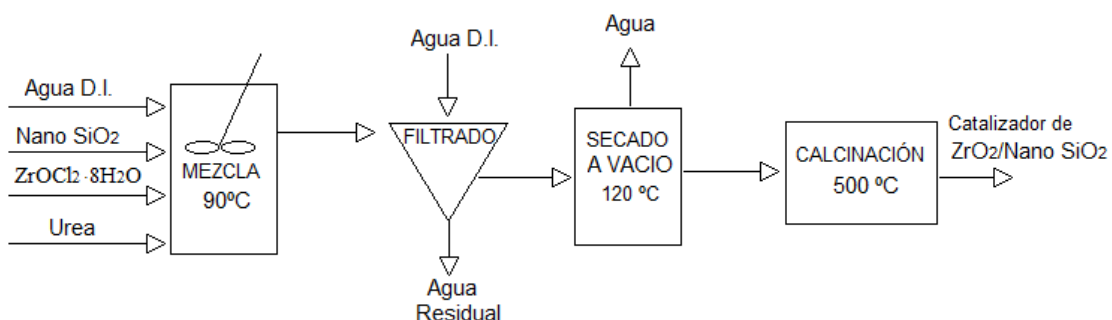
Catalizador de ZrO₂ (2 Pasos)

Aquí, igualmente que en el caso anterior el objetivo es la preparación del catalizador de Óxido de Zirconio (IV) al 2 % en peso de ZrO₂ para la conversión de acetaldehído y etanol a 1,3-butadieno.

A este catalizador, se le añade un soporte de sílice (SiO₂) nanoparticulado (menor de 100nm), el cual se trata de un material amorfo mesoporoso con un diámetro medio de 11,62 nm y una superficie BET de 131 m²/g.

Para fabricar catalizador, se añade el soporte de nanoSiO₂ suspendido en agua desionizada (20mL/g de soporte), junto con una sal portadora de circonio como puede ser el ZrOCl₂·8H₂O. A esta mezcla se le añade urea en un ratio de 1:10 molar respecto al circonio introducido. El conjunto resultante se agita durante 6 horas a 90 °C. Posteriormente, se filtra la suspensión y se lava varias con agua desionizada, cuya cantidad se puede estimar en 1 L por cada kilogramo de catalizador. En el siguiente paso se realiza un secado a vacío durante 12 h y por último se calcina a 500°C durante 3 horas⁵⁹.

El proceso anterior se podría presentar en forma de diagrama de bloques como:



El balance de materia del proceso anterior, viene dado por los siguientes valores calculados a partir de las ecuaciones del Anexo II:

MATERIALES				EMISIONES	
NanoSiO2 (g)	ZrOCl2·8H2O (g)	Agua DI (mL)	Urea (g)	Agua Residual* (g)	Agua Evaporada (g)
0,8953	0,1047	18,91	0,001951	18,912	0,04683

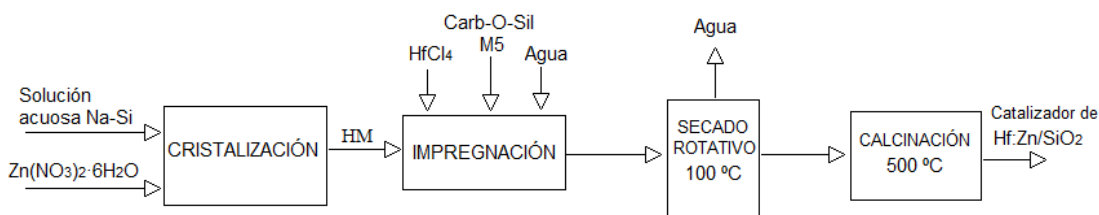
*: Toda la urea utilizada sale junto con el agua residual

Catalizador de Hf:Zn (1 Paso)

En este caso se trata del primer catalizador de un paso estudiado, es decir, utilizado para la conversión directa de etanol en el producto de 1,3-Butadieno.

Este consiste en un catalizador formado por metales como el hafnio y el zinc en soporte de sílice (SiO₂), en una proporción de 2,5; 16 y 81,5 % en peso respectivamente.

El proceso de síntesis de este catalizador consiste en la precipitación del Zn en el soporte mediante la adición de la cantidad necesaria de portador de zinc, el cual será Zn(NO₃)₂·6H₂O, a una solución acuosa de soporte formada por SiO₂, Na₂O y agua en una proporción de 26,8; 10,6; 62,6% en peso respectivamente, creando así la Hemimorfita que se utilizará en el catalizador como fuente de Zn (Zn₄Si₂O₇(OH)·H₂O). Por otro lado, para conseguir introducir el hafnio en el catalizador, se realiza una impregnación húmeda con HfCl₄ y una sílice comercial como puede ser (Carb-O-Sil M5) en las proporciones necesarias con un ratio de agua de 20 mL/g de sólido introducido. Una vez conseguido introducir los metales en el catalizador, se seca en un secadero rotatorio a 100 °C durante 12 horas para eliminar el sobrante de agua y por último se calcina sobre 12 horas el sólido resultante a 500°C.⁶⁰



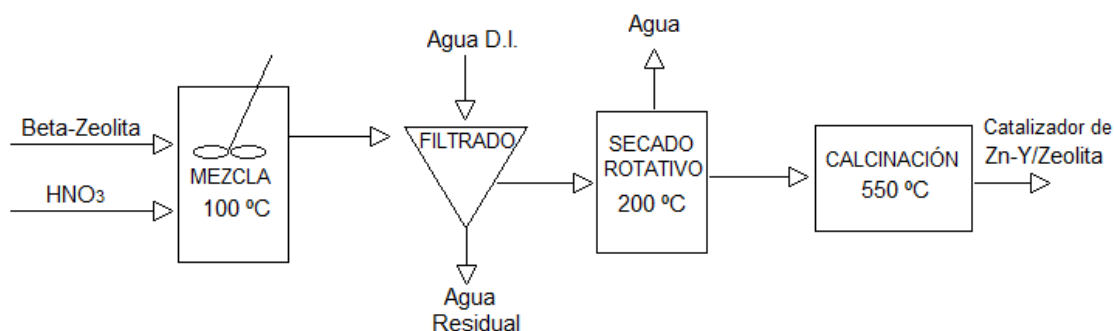
El balance de materia del proceso anterior, viene dado por los siguientes valores calculados a partir de las ecuaciones del Anexo II:

MATERIALES						EMISIONES
Car-O-Sil M5 (g)	Zn(NO3)2·6H2O (g)	HfCl4 (g)	SiO2 (g)	Na2O (g)	Agua DI (mL)	Agua Evaporada (g)
0,3869	0,7311	0,04483	0,0739	0,0292	8,807	9,073

Catalizador de Zn:Y (1 Paso)

El segundo catalizador de 1 paso para la producción de Butadieno es el catalizador bimetalico de zinc (2% en peso) e itrio (8% en peso) en un soporte de beta-zeolita, cuyo diámetro de poro medio ronda los 0,8 nm.

Según la bibliografía, este catalizador se puede obtener mediante una zeolita con un ratio Si/Al molar de 13,5. Para eliminar el Aluminio del soporte para que no interfiera en la reacción de producción de butadieno, se debe realizar un lavado con HNO₃ acuoso al 60% (que se puede estimar en un volumen necesario de 0,5 L por kg de zeolita), para llevar a cabo la extracción de este metal, se debe agitar la mezcla durante 20 horas a 100 °C. Posteriormente, el sólido resultante se filtra y se lava con agua (1 L/kg de sólido). Tras la filtración, se seca la zeolita durante 12 horas a 200°C y se mezcla con los portadores de Y e Zn (que serán ambos en forma de nitratos). Posteriormente se tritura toda la mezcla sólida durante 10 minutos y se calcina a 550 °C 6 horas.⁶¹



El balance de materia del proceso anterior, viene dado por los siguientes valores calculados a partir de las ecuaciones del Anexo II:

MATERIALES					EMISIONES	
β -Zeolita (g)	$Y(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ (g)	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ (g)	Nítrico (60 %) (mL)	Agua DI (mL)	Agua Residual (mL)*	Agua Evaporada (g)
0,7091	0,3335	0,08769	0,3546	0,7091	1,064	0,1303

*: Todo el nítrico utilizado se arrastra con el agua de lavado a las aguas residuales

ESTIMACIÓN DEL COSTE DE LOS CATALIZADORES

Una vez se conoce toda la información anterior, como es el balance de materia y los procesos que hace posible la fabricación de estos catalizadores, es posible estimar su coste a partir de un método sencillo encontrado en la literatura.⁶²

Para ello, primero se debe determinar, que tipo de industria de fabricantes de catalizadores se encargará de el suministro del catalizador a cada una de las plantas, estas pueden ser, fabricantes a gran escala, a media y pequeña.

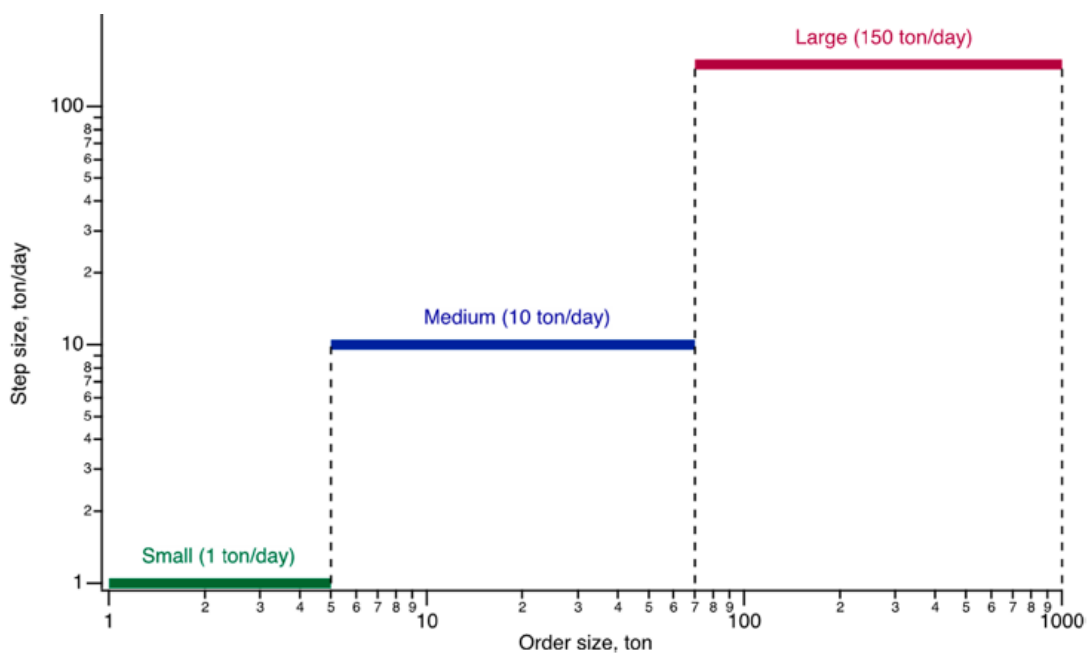
Los datos necesarios para conocer esto, es la cantidad de catalizar que se le encargará al fabricante por lote. Por lo tanto, suponiendo que en todas las plantas el catalizador tiene una vida útil de un año, se deberá realizar un pedido al año al fabricante de estos.

Para calcular la cantidad necesaria anual de catalizador en cada uno de los casos, se construye la siguiente tabla, sabiendo los valores del WHSV de cada catalizador (Apartado 3.3) y el caudal de etanol a procesar por el reactor de cada catalizador en su punto nominal de operación (Apartado 4).

	Cu/MC	Ta2O3	ZrO2	Hf:Zn	Y:Zn
$F_{ETANOL,RQ}$ (kmol/h)	55,8715*	125	184	105,43	107,2
$F_{ETANOL,RQ}$ (kg/h)	2570,089	5750	8464	4849,78	4931,2
WHSV (1/h)	2,4	1	1,8	0,64	0,3
Mcat (kg/año)	1070,87042	5750	4702,22222	7577,78125	16437,3333

*: Valor medio entre el caudal de etanol en la planta que usa el catalizador de Ta2O3 y el de ZrO2 (Procesos de 2 pasos)

Una vez conocida la cantidad de catalizador anual que usaría cada uno, se determina la escala de industria del proveedor del catalizador con la siguiente gráfico:



De la gráfica anterior se observa que los periodos de catalizador de Cu/MC y ZrO₂ deben ser realizados a proveedores de pequeña escala, mientras que el de Ta₂O₃ de media y los de Hf:Zn y Y:Zn de grande.

A partir de aquí se construyen las siguientes tablas:

COSTE DEL MATERIAL			
Material	Coste Material (\$/kg)^a	Cantidad Necesaria (kg/kg de catalizador)	Coste unitario (\$/kg de catalizador)
MC	20,832	0,7047	14,6803104
Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	0,3888	0,3803	0,14786064
H ₂	5,1	8,457	43,1307
TOTAL	26,3208	-	57,95887104
COSTE DEL PROCESO			
PROCESO	PRECIO (\$/h)	PRECIO (\$/dia)	
Mezcla en Slurry	75	1800	
Impregnación	75	1800	
Secado rotativo (25°C)	100	2400	
Secado rotativo (50°C)	100	2400	
Reacción de reducción	30	720	
TOTAL	380	9120	
COSTE DE CAMPAÑA			
Tamaño del lote (kg)		1070,870417	
Escala de producción		Pequeña	

Coste del proceso (\$/dia)	9120
Tiempo de campaña (dia) ^b	1,5
Coste de campaña (\$)	13680
Costde de campaña (\$/kg catalizador)	12,77465489
SUBTOTAL ANTES DEL MARGEN Y COSTES GENERALES	
Coste del material (\$/kg catalizador)	57,95887104
Coste de campaña (\$/kg catalizador)	12,77465489
SUBTOTAL (\$/kg catalizador)	70,73352593
COSTES GENERALES Y MARGEN	
Costes generales y administrativos [G&A] (\$/kg catalizador) ^c	3,536676296
Costes de venta, administrativos, investigación y distribución [SARD] (\$/kg de catalizador) ^d	3,713510111
Margen (\$/kg catalizador) ^e	38,99185617
PRECIO ESTIMADO (\$/kg catalizador)	116,9755685

^a: Estimación del precio a partir del proporcionado por Sigma Aldrich entre 1000 (Factor de pedido en grandes cantidades)

^b: Gráfica de tamaño de lotes (al final de Anexo I)

^c: 5% del Subtotal

^d: 5% del (Subtotal + G&A)

^e: X·(Subtotal+G&A+SARD). X=50% (Pequeña escala); X=33% (Media escala); X=11% (Gran escala)

COSTE DEL MATERIAL			
Material	Coste Material (\$/kg)	Cantidad Necesaria (kg/kg de catalizador)	Coste unitario (\$/kg de catalizador)
SBA-15	63,84	0,965	61,6056
TaCl5	9,6	0,035	0,336
Etanol	0,018	10,93	0,19674
TOTAL	73,458	-	62,13834
COSTE DEL PROCESO			
PROCESO	PRECIO (\$/h)	PRECIO (\$/dia)	
Mezcla en Slurry	100	2400	
Secado rotativo (120°C)	150	3600	
Calcinación (500°C)	225	5400	
TOTAL	475	11400	
COSTE DE CAMPAÑA			
Tamaño del lote (kg)		5750	
Escala de producción		Media	

Coste del proceso (\$/dia)	11400
Tiempo de campaña (dia)	1,5
Coste de campaña (\$)	17100
Coste de campaña (\$/kg catalizador)	2,973913043
SUBTOTAL ANTES DEL MARGEN Y COSTES GENERALES	
Coste del material (\$/kg catalizador)	62,13834
Coste de campaña (\$/kg catalizador)	2,973913043
SUBTOTAL (\$/kg catalizador)	65,11225304
COSTES GENERALES Y MARGEN	
Costes generales y administrativos [G&A] (\$/kg catalizador)	3,255612652
Costes de venta, administrativos, investigación y distribución [SARD] (\$/kg de catalizador)	3,418393285
Margen (\$/kg catalizador)	23,68946546
PRECIO ESTIMADO (\$/kg catalizador)	95,47572444

COSTE DEL MATERIAL			
Material	Coste Material (\$/kg)	Cantidad Necesaria (kg/kg de catalizador)	Coste unitario (\$/kg de catalizador)
NanoSiO2	1,68	0,8953	1,504104
ZrOCl2·8H2O	1,0776	0,1047	0,11282472
Agua DI	0,01584	18,91	0,04483
Urea	0,03456	0,001951	6,74266E-05
TOTAL	2,808	-	1,661826147
COSTE DEL PROCESO			
PROCESO	PRECIO (\$/h)	PRECIO (\$/dia)	
Mezcla en Slurry	75	1800	
Filtrado	125	3000	
Secado a vacio (120 °C)	50	1200	
Calcinación (500°C)	75	1800	
TOTAL	325	7800	
COSTE DE CAMPAÑA			
Tamaño del lote (kg)		4702,222222	
Escala de producción		Pequeña	
Coste del proceso (\$/dia)		7800	
Tiempo de campaña (dia)		5	

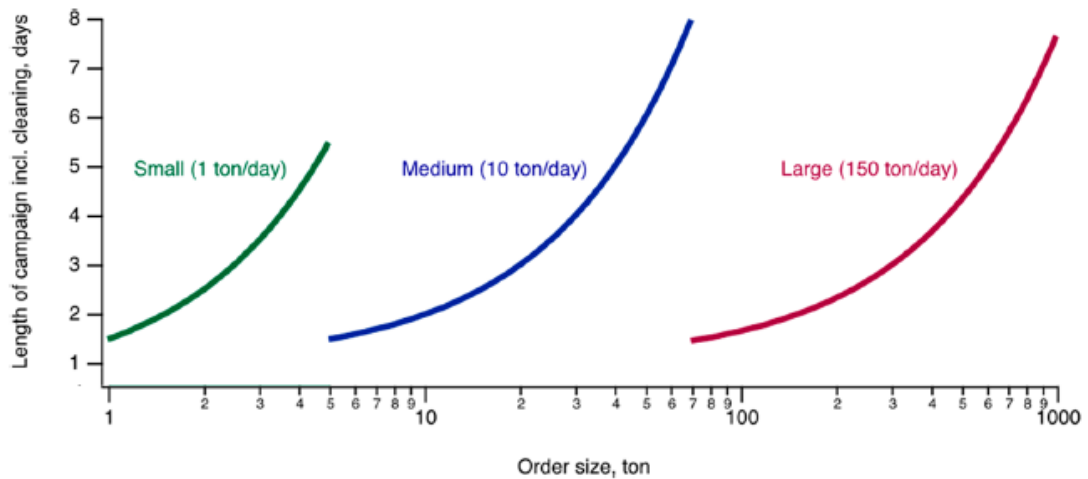
Coste de campaña (\$)	39000
Coste de campaña (\$/kg catalizador)	8,293950851
SUBTOTAL ANTES DEL MARGEN Y COSTES GENERALES	
Coste del material (\$/kg catalizador)	1,661826147
Coste de campaña (\$/kg catalizador)	8,293950851
SUBTOTAL (\$/kg catalizador)	9,955776997
COSTES GENERALES Y MARGEN	
Costes generales y administrativos [G&A] (\$/kg catalizador)	0,49778885
Costes de venta, administrativos, investigación y distribución [SARD] (\$/kg de catalizador)	0,522678292
Margen (\$/kg catalizador)	5,48812207
PRECIO ESTIMADO (\$/kg catalizador)	16,46436621

COSTE DEL MATERIAL			
Material	Coste Material (\$/kg)	Cantidad Necesaria (kg/kg de catalizador)	Coste unitario (\$/kg de catalizador)
Car-O-Sil M5	0,172	0,3869	0,0665468
Zn(NO3)2·6H2O	0,11928	0,7311	
HfCl4	2,028	0,04483	
SiO2	0,4392	0,07385	0,03243492
Na2O	1,4544	0,02921	0,042483024
Agua DI	0,01584	8,807	0,13950288
TOTAL	4,22872	-	0,280967624
COSTE DEL PROCESO			
PROCESO	PRECIO (\$/h)	PRECIO (\$/dia)	
Cristalización	300	7200	
Impregnación	200	4800	
Secado rotativo (100 °C)	300	7200	
Calcinación (500°C)	400	9600	
TOTAL	1200	28800	
COSTE DE CAMPAÑA			
Tamaño del lote (kg)		7577,78125	
Escala de producción		Grande	
Coste del proceso (\$/dia)		28800	
Tiempo de campaña (dia)		1,5	

Coste de campaña (\$)	43200
Coste de campaña (\$/kg catalizador)	5,700877153
SUBTOTAL ANTES DEL MARGEN Y COSTES GENERALES	
Coste del material (\$/kg catalizador)	0,280967624
Coste de campaña (\$/kg catalizador)	5,700877153
SUBTOTAL (\$/kg catalizador)	5,981844777
COSTES GENERALES Y MARGEN	
Costes generales y administrativos [G&A] (\$/kg catalizador)	0,299092239
Costes de venta, administrativos, investigación y distribución [SARD] (\$/kg de catalizador)	0,314046851
Margen (\$/kg catalizador)	0,725448225
PRECIO ESTIMADO (\$/kg catalizador)	7,320432092

COSTE DEL MATERIAL			
Material	Coste Material (\$/kg)	Cantidad Necesaria (kg/kg de catalizador)	Coste unitario (\$/kg de catalizador)
Beta-Zeolita	0,508	0,7091	0,3602228
Y(NO ₃) ₃ ·6H ₂ O	0,11928	0,3335	0,03977988
Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	0,11928	0,08769	0,010459663
Nitrico (60 %)	0,4392	0,3546	0,15574032
Agua DI	0,01584	0,7091	0,011232144
TOTAL	1,2016	-	0,577434807
COSTE DEL PROCESO			
PROCESO	PRECIO (\$/h)	PRECIO (\$/dia)	
Cristalización	300	7200	
Impregnación	200	4800	
Secado rotativo (100 °C)	300	7200	
Calcinación (500°C)	400	9600	
TOTAL	1200	28800	
COSTE DE CAMPAÑA			
Tamaño del lote (kg)		16437,33333	
Escala de producción		Grande	
Coste del proceso (\$/dia)		28800	
Tiempo de campaña (dia)		5	
Coste de campaña (\$)		144000	

Coste de campaña (\$/kg catalizador)	8,760545101
SUBTOTAL ANTES DEL MARGEN Y COSTES GENERALES	
Coste del material (\$/kg catalizador)	0,577434807
Coste de campaña (\$/kg catalizador)	8,760545101
SUBTOTAL (\$/kg catalizador)	9,337979908
COSTES GENERALES Y MARGEN	
Costes generales y administrativos [G&A] (\$/kg catalizador)	0,466898995
Costes de venta, administrativos, investigación y distribución [SARD] (\$/kg de catalizador)	0,490243945
Margen (\$/kg catalizador)	1,132463513
PRECIO ESTIMADO (\$/kg catalizador)	11,42758636



En resumen de lo anterior se muestran los costes de cada catalizador en la siguiente tabla:

	CATALIZADOR				
	Cu/MC	Ta ₂ O ₃	ZrO ₂	Hf:Zn	Y:Zn
Precio (\$/kg)	116,98	95,48	16,46	7,32	11,43

ANEXO II: Código EES del balance de materia para fabricación de los catalizadores

{Catalizador de Cu/MC}

"Datos"

$PM_{Cu}=63,5$ "Peso molecular cobre"

$PM_{NO32}=(14+16*3)*2$ "Peso molecular del $(NO_3)_2$ "

$PM_{Portador1}=63,5+(14+16*3)*2+3*(1*2+16)$ "Peso molecular Portador de cobre $Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$ "

$PM_{H2}=2$ "Peso molecular hidrógeno"

$PM_{N2}=28$ "Peso molecular de nitrógeno"

$y_{H2}=0,1$ "Concentración de oxígeno en la corriente de reducción"

$x_{cat.Cu}=0,1$ "Porcentaje en peso de cobre en el catalizador"

$m_{cat.Cu}=1$ "Base de calculo (g)"

$x_{cat.Cu}=m_{Cu}/m_{cat.Cu}$

$n_{Portador1}=m_{Cu}/PM_{Cu}$

$m_{Portador1}=n_{Portador1}*PM_{Portador1}$

$m_{NO32}=n_{Portador1}*PM_{NO32}$

$m_{cat.Cu}=m_{Cu}+m_{NO32}+m_{MC}$

$AguaEvap.1=n_{Portador1}*PM_{Portador1}-(m_{Cu}+m_{NO32})$

$m_{H2}=m_{MC}*12$

$n_{H2}=m_{H2}/PM_{H2}$

$n_{N2}=n_{H2}*((1-y_{H2})/y_{H2})$

$m_{N2}=n_{N2}*PM_{N2}$

.....

{Catalizador de $Ta_2O_3/SBA-15$ }

"Datos"

PM_Portador2=181+35,5*5 "Peso molecular del portador de tantalio TaCl5"

PM-Ta2O3=181*2+16*3 "Peso molecular del Óxido de tantalio (III)"

x_cat.Ta=0,02 "Porcentaje de oxido de tantalio en el catalizador"

m_cat.Ta=1 "Base de calculo (g)"

$x_{cat.Ta} = \frac{m_{Ta2O3}}{m_{cat.Ta}}$

$n_{Ta2O3} = \frac{m_{Ta2O3}}{PM_{Ta2O3}}$

$n_{portador2} = n_{Ta2O3} * 2$

$m_{portador2} = n_{portador2} * PM_{portador2}$

$m_{cat.Ta} = m_{portador2} + m_{SBA15}$

$m_{etanol} = 312,5 * m_{Portador2}$

$m_{etanol.evap} = m_{etanol}$

.....

{Catalizador de ZrO2/NanoSiO2}

"Datos"

PM_Portador3=91+16+35,5*2+8*(2+16) "Peso molecular del portador de zirconio ZrOcl2·8H2O"

PM_ZrO2=91+2*16 "Peso molecular del Óxido de Zirconio (IV)"

PM_H2O=18 "Peso molecular agua"

x_cat.Zr=0,02 "Porcentaje de oxido de zirconio en el catalizador"

m_cat.Zr=1 "Base de calculo (g)"

$x_{cat.Zr} = \frac{m_{ZrO2}}{m_{cat.Zr}}$

$n_{ZrO2} = \frac{m_{ZrO2}}{PM_{ZrO2}}$

$n_{portador3} = n_{ZrO2} * 2$

$m_{portador3} = n_{portador3} * PM_{portador3}$

$m_{cat.Zr} = m_{portador3} + m_{NanoSiO2}$

Consumo.Agua3=1*m_cat.Zr+20*m_NanoSiO2 "mL"

Consumo.Urea3=0,1*n_portador3*60 "g"

Agua.Residual3=Consumo.Agua3*1+Consumo.Urea3 "g"

Agua.Evap3=n_portador3*8*PM_H2O

.....

{Catalizador de Hf:Zn}

"Datos"

PM_Portadpr4.Zn=65+(14+16*3)*2+6*(1*2+16) "Peso molecular del portador de Zinc
Zn(NO3)2·6H2O"

PM_portador4.Hf=179+(35,5*4) "Peso molecular del portador de Hafnio HfCl5"

PM_Zn=65 "Peso molecular Zn"

PM_Na2O=23*2+16 "Peso molecular Na2O"

PM_SiO2=28+16*2 "Peso molecular SiO2"

PM_H2O=1*2+16 "Peso molecular H2O"

PM_Hf=179 "Peso molecular Hafnio"

m_cat.4=1 "Base de cálculo"

x_cat.Zn=0,16

x_cat.Hf=0,025

x_cat.Zn=m_Zn/m_cat.4

n_Zn=m_Zn/PM_Zn

n_HM=n_Zn/4

n_Si=n_HM*2

x_SiO2.sol=(26,8/PM_SiO2)/((26,8/PM_SiO2)+(10,6/PM_Na2O)+(62,6/PM_H2O))
"Porcentaje molar de SiO2 en la diseolución"

x_Na2O.sol=(10,6/PM_Na2O)/((26,8/PM_SiO2)+(10,6/PM_Na2O)+(62,6/PM_H2O))
"Porcentaje molar de SiO2 en la diseolución"

x_H2O.sol=(62,6/PM_H2O)/((26,8/PM_SiO2)+(10,6/PM_Na2O)+(62,6/PM_H2O))
"Porcentaje molar de SiO2 en la diseolución"

n_sol.TOTAL=n_Si/x_SiO2.sol "Número de moles de disolución a introducir"

n_SiO2=x_SiO2.sol*n_sol.TOTAL

n_Na2O=x_Na2O.sol*n_sol.TOTAL

$$n_{H_2O} = x_{H_2O} \cdot n_{sol} \cdot TOTAL$$

$$m_{SiO_2} = n_{SiO_2} \cdot PM_{SiO_2}$$

$$m_{Na_2O} = n_{Na_2O} \cdot PM_{Na_2O}$$

$$m_{H_2O} = n_{H_2O} \cdot PM_{H_2O}$$

$$m_{portador4.Zn} = n_{Zn} \cdot PM_{Portadpr4.Zn}$$

$$x_{cat.Hf} = m_{Hf} / m_{cat.4}$$

$$n_{Hf} = m_{Hf} / PM_{Hf}$$

$$n_{portador4.Hf} = n_{Hf}$$

$$m_{portador4.Hf} = n_{portador4.Hf} \cdot PM_{portador4.Hf}$$

$$m_{cat.4} = m_{portador4.Hf} + (m_{portador4.Zn} - n_{Zn} \cdot 6 \cdot PM_{H_2O}) + m_{Na_2O} + m_{SiO_2} + m_{COSM15}$$

$$Agua.Impreg.Hum = (m_{COSM15} + m_{portador4.Hf}) \cdot 20$$

$$Consumo.Agua.4 = m_{H_2O} + Agua.Impreg.Hum \text{ "g"}$$

$$Agua.Evap.4 = n_{Zn} \cdot 6 \cdot PM_{H_2O} + m_{H_2O} + Agua.Impreg.Hum \text{ "g"}$$

.....
{Catalizador de Y:Zn}

"Datos"

$$PM_{Portador5.Y} = 89 + (14 + 3 \cdot 16) \cdot 3 + 6 \cdot 16$$

$$PM_{Portador5.Zn} = 65 + (14 + 3 \cdot 16) \cdot 2 + 6 \cdot 16$$

$$PM_Y = 89$$

$$PM_{Zn} = 65$$

$$PM_{H_2O} = 18$$

$$m_{cat.5} = 1 \text{ "Base de cálculo"}$$

$$x_{cat.Y} = 0,08$$

$$x_{cat.Zn} = 0,02$$

$$m_Y = x_{cat.Y} \cdot m_{cat.5}$$

$$m_{Zn} = x_{cat.Zn} \cdot m_{cat.5}$$

$$n_Y = m_Y / PM_Y$$

$$n_{Zn} = m_{Zn} / PM_{Zn}$$

$$n_{portador5.Y} = n_Y$$

$$n_{portador5.Zn} = n_{Zn}$$

$$m_{portador5.Y} = n_{portador5.Y} * PM_{Portador5.Y}$$

$$m_{portador5.Zn} = n_{portador5.Zn} * PM_{Portador5.Zn}$$

$$m_{cat.5} = (m_{portador5.Y} - n_{portador5.Y} * 6 * PM_{H2O}) + (m_{portador5.Zn} - n_{portador5.Zn} * 6 * PM_{H2O}) + m_{Zeolita}$$

$$Consumo.Agua5 = 1 * m_{Zeolita}$$

$$Consumo.Nitrico = 0,5 * m_{Zeolita}$$

$$Densidad.nitrico.60 = (0,6/1,5 + 0,4/1)^{-1} \text{ "g/mL"}$$

$$Agua.Residual5 = Consumo.Agua5 + Consumo.Nitrico$$

$$Agua.Evap = n_{portador5.Y} * 6 * PM_{H2O} + n_{portador5.Zn} * 6 * PM_{H2O}$$

ANEXO III. Datos de equilibrio LV Butadieno-Etanol

TEMP	MOLEFRAC ETANOL	TOTAL PRES	VAPOR MOLEFRAC ETANOL	VAPOR MOLEFRAC 13-BD	LIQUID1 MOLEFRAC ETANOL	LIQUID1 MOLEFRAC 13-BD
C°		bar				
50	0	5,68031	0	1	0	1
50	0,02	5,63878	0,0109191	0,989081	0,02	0,98
50	0,04	5,59606	0,0185345	0,981466	0,04	0,96
50	0,06	5,55529	0,0239544	0,976046	0,06	0,94
50	0,08	5,51788	0,0278811	0,972119	0,08	0,92
50	0,1	5,48429	0,0307735	0,969226	0,1	0,9
50	0,12	5,45449	0,032939	0,967061	0,12	0,88
50	0,14	5,42816	0,0345877	0,965412	0,14	0,86
50	0,16	5,40487	0,035866	0,964134	0,16	0,84
50	0,18	5,38413	0,0368775	0,963123	0,18	0,82
50	0,2	5,36545	0,0376964	0,962304	0,2	0,8
50	0,22	5,34835	0,0383766	0,961623	0,22	0,78
50	0,24	5,3324	0,0389576	0,961042	0,24	0,76

50	0,26	5,31719	0,0394688	0,960531	0,26	0,74
50	0,28	5,30233	0,0399323	0,960068	0,28	0,72
50	0,3	5,2875	0,0403646	0,959635	0,3	0,7
50	0,32	5,27237	0,0407785	0,959221	0,32	0,68
50	0,34	5,25667	0,0411841	0,958816	0,34	0,66
50	0,36	5,24014	0,0415891	0,958411	0,36	0,64
50	0,38	5,22252	0,0420001	0,958	0,38	0,62
50	0,4	5,20358	0,0424223	0,957578	0,4	0,6
50	0,42	5,1831	0,0428604	0,95714	0,42	0,58
50	0,44	5,16086	0,0433186	0,956681	0,44	0,56
50	0,46	5,13663	0,0438009	0,956199	0,46	0,54
50	0,48	5,11018	0,0443113	0,955689	0,48	0,52
50	0,5	5,08126	0,044854	0,955146	0,5	0,5
50	0,52	5,04959	0,0454336	0,954566	0,52	0,48
50	0,54	5,01488	0,0460551	0,953945	0,54	0,46
50	0,56	4,97679	0,0467247	0,953275	0,56	0,44
50	0,58	4,93494	0,0474492	0,952551	0,58	0,42
50	0,6	4,88887	0,0482371	0,951763	0,6	0,4
50	0,62	4,83806	0,0490987	0,950901	0,62	0,38
50	0,64	4,78188	0,0500464	0,949954	0,64	0,36
50	0,66	4,71962	0,0510959	0,948904	0,66	0,34
50	0,68	4,65039	0,0522669	0,947733	0,68	0,32
50	0,7	4,57316	0,0535842	0,946416	0,7	0,3
50	0,72	4,48666	0,0550801	0,94492	0,72	0,28
50	0,74	4,38939	0,0567967	0,943203	0,74	0,26
50	0,76	4,27951	0,0587901	0,94121	0,76	0,24
50	0,78	4,15482	0,0611365	0,938864	0,78	0,22
50	0,8	4,0126	0,0639421	0,936058	0,8	0,2
50	0,82	3,84955	0,0673588	0,932641	0,82	0,18
50	0,84	3,66158	0,0716117	0,928388	0,84	0,16
50	0,86	3,44369	0,0770492	0,922951	0,86	0,14
50	0,88	3,18965	0,084239	0,915761	0,88	0,12
50	0,9	2,89168	0,0941738	0,905826	0,9	0,1
50	0,92	2,54007	0,108759	0,891241	0,92	0,08
50	0,94	2,12254	0,13217	0,86783	0,94	0,06
50	0,96	1,62354	0,175673	0,824327	0,96	0,04
50	0,98	1,0232	0,283754	0,716247	0,98	0,02
50	1	0,295977	1	0	1	0

ANEXO IV: Parámetros de interacción binaria de los métodos utilizados

MÉTODO NRTL

Compuesto i	ETANOL	ETANOL	ETANOL	ETANOL	ETANOL	ETANOL	ETANOL
Compuesto j	AGUA	ACETALDE	BUTANONA	ACETONA	ACETATO	CROTONAL	DEE
Aij	-8,8099	11,36	-0,404869	-1,0787	-1,1512	0	16,4596
Aji	13,8176	-6,35	-0,048297	-0,3471	-0,2431	0	-15,3075
Bij	1787,89	-3406,94	217,943	479,05	524,424	128,315	753,933
Bji	-2721,34	1758,41	107,993	206,597	282,956	-134,414	-193,151
Cij	0,046934	0,3	-2,4551	0,3	0,3	0,3038	0,00666
Dij	0	0	0	0	0	0	0
Eij	0	0	0	0	0	0	0
Eji	0	0	0	0	0	0	0
Fij	0	0	0	0	0	0	0
Fji	0	0	0	0	0	0	0
Tmin (°C)	0	0	25	25	40	75	20
Tmax (°C)	1000	1000	78,3	78,3	78,45	85	76,6
Prioridad	Alta-Alta	Alta-Alta	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja
R ²	10,2193	0,37	4,09062	17,041	12,273	-	23,8466
Fuente	NIST Aspen	[70]	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen

Compuesto i	ETANOL	ETANOL	ETANOL	ETANOL	ETANOL	ETANOL
Compuesto j	BUTANOL	13-BD	1-BUTENO	2-BUTENO	PESADOS	BUTANAL
Aij	0	28,199	2,02713	-27,128	10,1737	0
Aji	0	32,7729	30,6241	26,856	-22,332	0
Bij	-85,2188	-8722,47	-515,42	10000	-4616,18	-94,1633
Bji	128,502	-9989,67	-9995,62	-9374,5	10000	288,158
Cij	0,3	0,485825	-2,39782	0,0903085	0,198306	0,3
Dij	0	0	0	0	0	0
Eij	0	0	0	0	0	0
Eji	0	0	0	0	0	0
Fij	0	0	0	0	0	0
Fji	0	0	0	0	0	0
Tmin (°C)	70	0	-273,15	-273,15	-273,15	72,75
Tmax (°C)	110,95	1000	726,85	726,85	726,85	78,3
Prioridad	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja
R ²	3,1773	-	75,1439	89,5779	9,0793	6,3078
Fuente	NIST Aspen	Estimado	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen

Compuesto i	AGUA	ACETALDE	ACETALDE	ACETALDE	ACETALDE	ACETALDE
Compuesto j	ACETALDE	ACETONA	CROTONAL	DEE	PESADOS	BUTANOL
Aij	-0,268049	2,09055	0	0	0	-8,59
Aji	28,1653	4,05696	0	0	0	18,54
Bij	439,867	-1232,08	-5,52	398,274	-212,68	2574,9
Bji	-7316,2	-779,74	5,71	-85,2066	377,01	-5774
Cij	0,761428	0,00939305	0,3	0,3	0,3	0,3
Dij	0	0	0	0	0	0
Eij	0	0	0	0	0	0
Eji		0	0	0	0	0
Fij	0	0	0	0	0	0
Fji	0	0	0	0	0	0
Tmin (°C)	10	20,2	0	19,65	0	0
Tmax (°C)	55,8	56,2	1000	31,15	1000	1000
Prioridad	Alta-Alta	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja
R ²	16,1825	21,3856	0,028*	4,2715	0,096*	0,18
Fuente	[71]	NIST Aspen	[72]	NIST Aspen	[72]	[73]

*: Desviación Media Absoluta (AAD)

Compuesto i	ACETALDE	13-BD	ACETALDE	ACETALDE	ACETALDE	ACETALDE
Compuesto j	ACETATO	ACETALDE	1-BUTENO	2-BUTENO	BUTANONA	BUTANAL
Aij	-2,15	-18,7177	0	0	0	0
Aji	2,98	37,9959	0	0	0	0
Bij	493,33	5305,66	8,50466	62,3119	203,977	-5,52
Bji	-756,92	-10000	339,265	335,229	-171,784	5,71
Cij	0,3	0,878841	0,3	0,3	0,3	0,3
Dij	0	0	0	0	0	0
Eij	0	0	0	0	0	0
Eji	0	0	0	0	0	0
Fij	0	0	0	0	0	0
Fji	0	0	0	0	0	0
Tmin (°C)	0	0	25	25	25	0
Tmax (°C)	1000	1000	25	25	25	1000
Prioridad	Alta-Baja	Alta-Alta	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja
R ²	0,36	23,8071				-
Fuente	[73]	[74]	Estimación Aspen	Estimación Aspen	Estimación Aspen	Estimación

Compuesto i	AGUA	ACETATO	13-BD	13-BD	13-BD	ACETONA
Compuesto j	13-BD	13-BD	1-BUTENO	DEE	2-BUTENO	13-BD
Aij	-1,6062	0	0	0	0	0
Aji	-1,6072	0	0	0	0	0
Bij	2014,22	87,5614	-39,4973	29,0179	12,7828	90,7943
Bji	2014,52	-54,941	51,4391	-77,2478	-6,4297	117,97
Cij	0,3	0,3	0,3059	0,3	0,3	0,3
Dij	0	0	0	0	0	0
Eij	0	0	0	0	0	0
Eji	0	0	0	0	0	0
Fij	0	0	0	0	0	0
Fji	0	0	0	0	0	0
Tmin (°C)	7	25	51	25	5	25
Tmax (°C)	21	25	51	25	65	25
Prioridad	Alta-Alta	Baja-Alta	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja	Baja-Alta
R ²	113,2953	9,1231	-	2,9252	1,8866	
Fuente	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen	Estimación Aspen

Compuesto i	13-BD	PESADOS	13-BD	BUTANONA	13-BD
Compuesto j	CROTONAL	13-BD	BUTANOL	13-BD	BUTANAL
Aij	0	0	0	0	0
Aji	0	0	0	0	0
Bij	385,793	625,558	453,551	0,00076439	385,793
Bji	-176,541	163,685	65,812	146,094	-176,541
Cij	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3
Dij	0	0	0	0	0
Eij	0	0	0	0	0
Eji	0	0	0	0	0
Fij	0	0	0	0	0
Fji	0	0	0	0	0
Tmin (°C)	25	25	25	25	25
Tmax (°C)	25	25	25	25	25
Prioridad	Alta-Baja	Baja-Alta	Alta-Baja	Baja-Alta	Alta-Baja
R ²	-	-	-	-	0
Fuente	Estimacion Aspen	Estimacion Aspen	Estimacion Aspen	Estimacion Aspen	Estimación

Compuesto i	AGUA	ACETONA	AGUA	AGUA	AGUA
Compuesto j	BUTANONA	AGUA	ACETATO	DEE	BUTANOL
Aij	0	0,418234	9,4632	107,179	13,1102
Aji	0	-8,785194	-3,7198	-43,365	-2,0405
Bij	1087,74	419,6897	-1705,68	-6697,94	-3338,95
Bji	201,301	8785,19365	1286,14	3154,52	763,869
Cij	0,3	0,5466	0,2	0,2	0,3
Dij	0	0	0	0	0
Eij	0	0	0	-14,3108	0
Eji	0	0	0	6,0307	0
Fij	0	-0,0019	0	0	0
Fji	0	-0,006855	0	0	0
Tmin (°C)	73,3	0	0	-3,83	19,17
Tmax (°C)	100	1000	70,4	95	117,6
Prioridad	Alta-Baja	Baja-Alta	Alta-Baja	Alta-Baja	Alta-Baja
R ²	20,272	-	4,1281	6,7959	24,032
Fuente	NIST Aspen	[75]	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen

Compuesto i	AGUA	AGUA	PESADOS	AGUA	AGUA
Compuesto j	1-BUTENO	2-BUTENO	AGUA	CROTONAL	BUTANAL
Aij	10,154	0	-9,80982	0	8,41135
Aji	-3,12098	0	4,17174	0	-27,5147
Bij	5292,43	1599,29	3917,83	1062,7	-1807,75
Bji	1562,54	900,959	-1486,5	254,649	9897,43
Cij	0,318129	0,3	2,82664	0,3	0,487418
Dij	0	0	0	0	0
Eij	0	0	0	0	0
Eji	0	0	0	0	0
Fij	0	0	0	0	0
Fji	0	0	0	0	0
Tmin (°C)	-273,15	25	0	25	50
Tmax (°C)	726,85	25	0	25	93,1
Prioridad	Alta-Baja	Alta-Baja	Baja-Alta	Alta-Baja	Alta-Baja
R ²	389,168	-	7,0694	-	20,1236
Fuente	NIST Aspen	Estimacion Aspen	NIST Aspen	Estimacion Aspen	NIST Aspen

MÉTODO DE SOAVE-REDLICH-KWONG

Compuesto i	PROPILEN	PROPILEN	ETILENO
Compuesto j	ETILENO	13BD	13BD
kijA	-1,16636	36,6135	-9,16388
kijB	0,00214182	-0,0149645	0,0331652
kijC	157,552	-10000	-166,233
Tmín (°C)	-273,15	-273,15	-273,15
Tmáx (°C)	726,85	726,85	726,85
R2	5,9722	7,8814	20,0176
Fuente	NIST Aspen	NIST Aspen	[83]

MÉTODO DE WILSON

Compuesto i	AGUA	DMF	DMF	DMF	DMF
Compuesto j	DMF	1-BUTENO	2-BUTENO	1,3-BD	ACETALDE
aij	1,3437	0,1681	0,2147	0,1237	0
aji	-1,5747	-0,1681	-0,2147	-0,1237	0
bij	-339,403	-789,4	-836,42	-595,43	155,737
bji	197,983	-100,53	-160,43	55,75	-4,96362
Tmín (°C)	52,1	0	0	0	0
Tmáx (°C)	153	1000	1000	1000	1000
R2	12,293	-	-	-	20,369
Fuente	NIST Aspen	[94]	[94]	[94]	NIST Aspen

SOLUBILIDAD DE GASES

Compuesto i	H2	H2	H2	ETILENO	ETILENO
Compuesto j	AGUA	ETANOL	ACETALDE	AGUA	ETANOL
Unidades	bar	bar	bar	bar	bar
a _{ij}	180,066	-39,8852	20,3388	152,936	5,13417
b _{ij}	-6993,51	1472,4	46,955	-7959,74	0
c _{ij}	-26,3119	8,5486	-2,2134	-20,5108	0
d _{ij}	0,0150431	-0,017699	0,000789	0	0
T _{mín} (°C)	0,85	-60	0	13,85	25
T _{max} (°C)	65,85	50	2000	72,85	25
Prioridad					
R ²	-	0,9017	1,018	-	0
Fuente	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen	NIST Aspen

Compuesto i	ETILENO	PROPILEN	PROPILEN	PROPILEN
Compuesto j	ACETALDE	AGUA	ETANOL	ACETALDE
Unidades	bar	bar	Bar	bar
a _{ij}	79,3972	299,173	12,2082	167,75
b _{ij}	-2296,6	-15567,4	-2344,5	-10000
c _{ij}	-13,389	-41,7376	0	-22,3162
d _{ij}	0,030585	0	0	-0,0128937
T _{mín} (°C)	0	20,85	20	-273,15
T _{max} (°C)	2000	104,85	40	1726,85
Prioridad	Baja-Alta	Baja-Alta	Baja-Alta	Baja-Alta
R ²	3,5724*	-	0	51,9283*
Fuente	Estimado	NIST Aspen	NIST Aspen	Estimado

*: R² de la constante de Henry con la acetona acetona

ANEXO V: Código EES del balance de materia aproximado de los procesos

Las siguientes numeraciones de corrientes, se corresponden con las figuras 11, 12, 13 y 14 presentadas en la memoria.

PLANTA DE ACETALDEHÍDO:

• Código:

$$F_{14}[1]/F_{14}[7]=1$$

$$F_{1}[1]+F_{9}[1]=107,2$$

$$\{F_{1}[1]=57,82\}$$

$$F_{1}[2]=F_{1}[1]*(10,97/89,03)$$

$$F_{1}[3]=0$$

$$F_{1}[4]=0$$

$$F_{1}[5]=0$$

$$F_{1}[6]=0$$

$$F_{1}[7]=0$$

$$F_{1}[8]=0$$

$$F_{1}[9]=0$$

$$F_{1}[10]=0$$

$$F_{1}[11]=0$$

$$F_{1}[12]=0$$

$$F_{1}[13]=0$$

$$F_{1}[14]=0$$

$$F_{1}[15]=0$$

$$F_{2}[1]=F_{1}[1]$$

$$F_{2}[2]=F_{1}[2]$$

$$F_{2}[3]=F_{1}[3]$$

$$F_{2}[4]=F_{1}[4]$$

$$F_{2}[5]=F_{1}[5]$$

$$F_{2}[6]=F_{1}[6]$$

$$F_{2}[7]=F_{1}[7]$$

$$F_{2}[8]=F_{1}[8]$$

$$F_{2}[9]=F_{1}[9]$$

$$F_{2}[10]=F_{1}[10]$$

$$F_{2}[11]=F_{1}[11]$$

$$F_{2}[12]=F_{1}[12]$$

$$F_2[13]=F_1[13]$$

$$F_2[14]=F_1[14]$$

$$F_2[15]=F_1[15]$$

{Balance Atómico}

$$x_{et}=0,83$$

$$x_{acet}=0$$

$$F_3[1]=F_2[1]*(1-x_{et})$$

$$F_3[2]*1=F_2[2]*1+(F_2[1]-F_3[1])*1+(F_2[3]-F_3[3])*0+(F_2[4]-F_3[4])*0+(F_2[5]-F_3[5])*0+(F_2[6]-F_3[6])*0+(F_2[7]-F_3[7])*1+(F_2[9]-F_3[9])*1+(F_2[10]-F_3[10])*1+(F_2[11]-F_3[11])*2+(F_2[12]-F_3[12])*1+(F_2[13]-F_3[13])*1+(F_2[14]-F_3[14])*2+(F_2[15]-F_3[15])*1$$

$$F_3[3]=F_2[3]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0/4$$

$$F_3[4]=F_2[4]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0/4$$

$$F_3[5]=F_2[5]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0/2$$

$$F_3[6]=F_2[6]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0/3$$

$$F_3[7]=F_2[7]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0,951/2$$

$$F_3[8]*2=F_2[8]*2+(F_2[1]-F_3[1])*6+(F_2[3]-F_3[3])*6+(F_2[4]-F_3[4])*8+(F_2[5]-F_3[5])*4+(F_2[6]-F_3[6])*6+(F_2[7]-F_3[7])*4+(F_2[9]-F_3[9])*8+(F_2[10]-F_3[10])*6+(F_2[11]-F_3[11])*8+(F_2[12]-F_3[12])*6+(F_2[13]-F_3[13])*10+(F_2[14]-F_3[14])*4+(F_2[15]-F_3[15])*10+(F_2[2]-F_3[2])*2$$

$$F_3[9]=F_2[9]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0,007/4$$

$$F_3[10]=F_2[10]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0,007/3$$

$$F_3[11]=F_2[11]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0,017/4$$

$$F_3[12]=F_2[12]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0/4$$

$$F_3[13]=F_2[13]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0/4$$

$$F_3[14]=F_2[14]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0,018/2$$

$$F_3[15]=F_2[15]+(F_2[1]*x_{et}+F_2[7]*x_{acet})^2*0/4$$

$$F_3=\text{sum}(F_3[i];i=1;15)$$

$$F_2=\text{sum}(F_2[i];i=1;15)$$

{ya}

$$F_5[1]=F_3[1]*0,174$$

$$F_5[2]=F_3[2]*0,189$$

$$F_5[3]=F_3[3]*0,1$$

F_5[4]=F_3[4]*0
F_5[5]=F_3[5]*0
F_5[6]=F_3[6]*0
F_5[7]=F_3[7]*0,76974
F_5[8]=F_3[8]*0,999998
F_5[9]=F_3[9]*0,34372
F_5[10]=F_3[10]*0,46703
F_5[11]=F_3[11]*0,378714
F_5[12]=F_3[12]*0,0
F_5[13]=F_3[13]*0,0
F_5[14]=F_3[14]*0,046703
F_5[15]=F_3[15]*0,0

F_4[1]=F_3[1]-F_5[1]
F_4[2]=F_3[2]-F_5[2]
F_4[3]=F_3[3]-F_5[3]
F_4[4]=F_3[4]-F_5[4]
F_4[5]=F_3[5]-F_5[5]
F_4[6]=F_3[6]-F_5[6]
F_4[7]=F_3[7]-F_5[7]
F_4[8]=F_3[8]-F_5[8]
F_4[9]=F_3[9]-F_5[9]
F_4[10]=F_3[10]-F_5[10]
F_4[11]=F_3[11]-F_5[11]
F_4[12]=F_3[12]-F_5[12]
F_4[13]=F_3[13]-F_5[13]
F_4[14]=F_3[14]-F_5[14]
F_4[15]=F_3[15]-F_5[15]

"Venteo columna destilacion"

F_7[1]=F_4[1]*0
F_7[2]=F_4[2]*0
F_7[3]=F_4[3]*0
F_7[4]=F_4[4]*0
F_7[5]=F_4[5]*0
F_7[6]=F_4[6]*0
F_7[7]=F_4[7]*0,000272
F_7[8]=F_4[8]*0,9264
F_7[9]=F_4[9]*0
F_7[10]=F_4[10]*0

F_7[11]=F_4[11]*0
F_7[12]=F_4[12]*0
F_7[13]=F_4[13]*0
F_7[14]=F_4[14]*0
F_7[15]=F_4[15]*0

"Destilado"

F_8[1]=F_4[1]*0,9
F_8[2]=F_4[2]*0,00745
F_8[3]=F_4[3]*0
F_8[4]=F_4[4]*0
F_8[5]=F_4[5]*0
F_8[6]=F_4[6]*0
F_8[7]=F_4[7]*0,91582
F_8[8]=F_4[8]*0
F_8[9]=F_4[9]*0
F_8[10]=F_4[10]*0,00077
F_8[11]=F_4[11]*0
F_8[12]=F_4[12]*0
F_8[13]=F_4[13]*0
F_8[14]=F_4[14]*0
F_8[15]=F_4[15]*0

F_6[1]=F_4[1]-F_7[1]-F_8[1]
F_6[2]=F_4[2]-F_7[2]-F_8[2]
F_6[3]=F_4[3]-F_7[3]-F_8[3]
F_6[4]=F_4[4]-F_7[4]-F_8[4]
F_6[5]=F_4[5]-F_7[5]-F_8[5]
F_6[6]=F_4[6]-F_7[6]-F_8[6]
F_6[7]=F_4[7]-F_7[7]-F_8[7]
F_6[8]=F_4[8]-F_7[8]-F_8[8]
F_6[9]=F_4[9]-F_7[9]-F_8[9]
F_6[10]=F_4[10]-F_7[10]-F_8[10]
F_6[11]=F_4[11]-F_7[11]-F_8[11]
F_6[12]=F_4[12]-F_7[12]-F_8[12]
F_6[13]=F_4[13]-F_7[13]-F_8[13]
F_6[14]=F_4[14]-F_7[14]-F_8[14]
F_6[15]=F_4[15]-F_7[15]-F_8[15]

"ZONA SUPERIOR DEL FLASH"

{F_9[1]=}

F_9[2]=F_9[1]*(10,97/89,03)

F_9[3]=0

F_9[4]=0

F_9[5]=0

F_9[6]=0

F_9[7]=0

F_9[8]=0

F_9[9]=0

F_9[10]=0

F_9[11]=0

F_9[12]=0

F_9[13]=0

F_9[14]=0

F_9[15]=0

F_11[1]=F_5[1]*0,250184

F_11[2]=F_5[2]*0,209164

F_11[3]=F_5[3]*1

F_11[4]=F_5[4]*1

F_11[5]=F_5[5]*1

F_11[6]=F_5[6]*1

F_11[7]=F_5[7]*0,34625

F_11[8]=F_5[8]*0,99998

F_11[9]=F_5[9]*0

F_11[10]=F_5[10]*0

F_11[11]=F_5[11]*0

F_11[12]=F_5[12]*0

F_11[13]=F_5[13]*0

F_11[14]=F_5[14]*0

F_11[15]=F_5[15]*0

F_10[1]=F_5[1]+F_9[1]-F_11[1]

F_10[2]=F_5[2]+F_9[2]-F_11[2]

F_10[3]=F_5[3]+F_9[3]-F_11[3]

F_10[4]=F_5[4]+F_9[4]-F_11[4]

F_10[5]=F_5[5]+F_9[5]-F_11[5]

F_10[6]=F_5[6]+F_9[6]-F_11[6]

F_10[7]=F_5[7]+F_9[7]-F_11[7]

$F_{10}[8]=F_5[8]+F_9[8]-F_{11}[8]$
 $F_{10}[9]=F_5[9]+F_9[9]-F_{11}[9]$
 $F_{10}[10]=F_5[10]+F_9[10]-F_{11}[10]$
 $F_{10}[11]=F_5[11]+F_9[11]-F_{11}[11]$
 $F_{10}[12]=F_5[12]+F_9[12]-F_{11}[12]$
 $F_{10}[13]=F_5[13]+F_9[13]-F_{11}[13]$
 $F_{10}[14]=F_5[14]+F_9[14]-F_{11}[14]$
 $F_{10}[15]=F_5[15]+F_9[15]-F_{11}[15]$

$F_{12}[1]=F_{11}[1]*0,023164$
 $F_{12}[2]=F_{11}[2]*0,44689$
 $F_{12}[3]=F_{11}[3]*1$
 $F_{12}[4]=F_{11}[4]*1$
 $F_{12}[5]=F_{11}[5]*1$
 $F_{12}[6]=F_{11}[6]*1$
 $F_{12}[7]=F_{11}[7]*0,23086$
 $F_{12}[8]=F_{11}[8]*0,999991$
 $F_{12}[9]=F_{11}[9]*0$
 $F_{12}[10]=F_{11}[10]*0$
 $F_{12}[11]=F_{11}[11]*0$
 $F_{12}[12]=F_{11}[12]*0$
 $F_{12}[13]=F_{11}[13]*0$
 $F_{12}[14]=F_{11}[14]*0$
 $F_{12}[15]=F_{11}[15]*0$

$F_{13}[1]=F_{11}[1]-F_{12}[1]$
 $F_{13}[2]=F_{11}[2]-F_{12}[2]$
 $F_{13}[3]=F_{11}[3]-F_{12}[3]$
 $F_{13}[4]=F_{11}[4]-F_{12}[4]$
 $F_{13}[5]=F_{11}[5]-F_{12}[5]$
 $F_{13}[6]=F_{11}[6]-F_{12}[6]$
 $F_{13}[7]=F_{11}[7]-F_{12}[7]$
 $F_{13}[8]=F_{11}[8]-F_{12}[8]$
 $F_{13}[9]=F_{11}[9]-F_{12}[9]$
 $F_{13}[10]=F_{11}[10]-F_{12}[10]$
 $F_{13}[11]=F_{11}[11]-F_{12}[11]$
 $F_{13}[12]=F_{11}[12]-F_{12}[12]$
 $F_{13}[13]=F_{11}[13]-F_{12}[13]$
 $F_{13}[14]=F_{11}[14]-F_{12}[14]$
 $F_{13}[15]=F_{11}[15]-F_{12}[15]$

$F_{14}[1]=F_{13}[1]+F_{10}[1]+F_8[1]$
 $F_{14}[2]=F_{13}[2]+F_{10}[2]+F_8[2]$
 $F_{14}[3]=F_{13}[3]+F_{10}[3]+F_8[3]$
 $F_{14}[4]=F_{13}[4]+F_{10}[4]+F_8[4]$
 $F_{14}[5]=F_{13}[5]+F_{10}[5]+F_8[5]$
 $F_{14}[6]=F_{13}[6]+F_{10}[6]+F_8[6]$
 $F_{14}[7]=F_{13}[7]+F_{10}[7]+F_8[7]$
 $F_{14}[8]=F_{13}[8]+F_{10}[8]+F_8[8]$
 $F_{14}[9]=F_{13}[9]+F_{10}[9]+F_8[9]$
 $F_{14}[10]=F_{13}[10]+F_{10}[10]+F_8[10]$
 $F_{14}[11]=F_{13}[11]+F_{10}[11]+F_8[11]$
 $F_{14}[12]=F_{13}[12]+F_{10}[12]+F_8[12]$
 $F_{14}[13]=F_{13}[13]+F_{10}[13]+F_8[13]$
 $F_{14}[14]=F_{13}[14]+F_{10}[14]+F_8[14]$
 $F_{14}[15]=F_{13}[15]+F_{10}[15]+F_8[15]$

BALANCE DE MATERIA PRELIMINAR PLANTA DE ACETALDEHÍDO:

	F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9	F10	F11	F12	F13
Etanol	68,29	68,29	11,61	9,59	2,02	0,959	0	8,631	38,91	40,42	0,5054	0,01171	0,4937
Agua	8,415	8,415	7,725	6,265	1,46	6,219	0	0,04668	4,794	5,949	0,3054	0,1365	0,1689
1,3-BD	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Butenos	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Propileno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Acetaldehído	0	0	53,91	12,41	41,49	1,042	0,003376	11,37	0	27,13	14,37	3,317	11,05
Hidrógeno	0	0	57,37	0,000115	57,37	0	0,000106	0	0	0,001147	57,37	57,37	0,000516
Butanona	0	0	0,1984	0,1302	0,06819	0,1302	0	0	0	0,06819	0	0	0
Acetona	0	0	0,2645	0,141	0,1235	0,1409	0	0,000109	0	0,1235	0	0	0
Aceta. Etilo	0	0	0,4818	0,2993	0,1825	0,2993	0	0	0	0,1825	0	0	0
Crotonaldehy.	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Pesados	0	0	1,02	0,9727	0,04765	0,9727	0	0	0	0,04765	0	0	0
Butanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

PLANTA DE BUTADIENO CON CATALIZADOR DE Ta₂O₃

• Código

{1:Etanol 2:Agua 3:BD 4:B= 5:Et= 6:Pr= 7:Acetaldh 8:H2 9:Butona 10:Acetona
11:Acet. Etilo 12: Crotonal 13: DEE 14: Pesado 15: Butanol }

"R_ac=0,7"

"R_et=1"

{F_1[1]=Fa_14[1]

F_1[2]=Fa_14[2]

F_1[3]=Fa_14[3]

F_1[4]=Fa_14[4]

F_1[5]=Fa_14[5]

F_1[6]=Fa_14[6]

F_1[7]=Fa_14[7]

F_1[8]=Fa_14[8]

F_1[9]=Fa_14[9]

F_1[10]=Fa_14[10]

F_1[11]=Fa_14[11]

F_1[12]=Fa_14[12]

F_1[13]=Fa_14[13]

F_1[14]=Fa_14[14]

F_1[15]=Fa_14[15]}

F_2[1]=F_1[1]+F_11[1]+F_16[1]

F_2[2]=F_1[2]+F_11[2]+F_16[2]

F_2[3]=F_1[3]+F_11[3]+F_16[3]

F_2[4]=F_1[4]+F_11[4]+F_16[4]

F_2[5]=F_1[5]+F_11[5]+F_16[5]

F_2[6]=F_1[6]+F_11[6]+F_16[6]

F_2[7]=F_1[7]+F_11[7]+F_16[7]

F_2[8]=F_1[8]+F_11[8]+F_16[8]

F_2[9]=F_1[9]+F_11[9]+F_16[9]

F_2[10]=F_1[10]+F_11[10]+F_16[10]

F_2[11]=F_1[11]+F_11[11]+F_16[11]

F_2[12]=F_1[12]+F_11[12]+F_16[12]

F_2[13]=F_1[13]+F_11[13]+F_16[13]

F_2[14]=F_1[14]+F_11[14]+F_16[14]

$$F_2[15]=F_1[15]+F_{11}[15]+F_{16}[15]$$

$$F_2=\text{sum}(F_2[i];i=1;15)$$

{Balance Atómico}

$$x_{\text{et}}=0,386$$

$$x_{\text{acet}}=0,524$$

$$F_3[1]=F_2[1]*(1-x_{\text{et}})$$

$$F_3[2]*1=F_2[2]*1+(F_2[1]-F_3[1])*1+(F_2[3]-F_3[3])*0+(F_2[4]-F_3[4])*0+(F_2[5]-F_3[5])*0+(F_2[6]-F_3[6])*0+(F_2[7]-F_3[7])*1+(F_2[9]-F_3[9])*1+(F_2[10]-F_3[10])*1+(F_2[11]-F_3[11])*2+(F_2[12]-F_3[12])*1+(F_2[13]-F_3[13])*1+(F_2[14]-F_3[14])*2+(F_2[15]-F_3[15])*1$$

$$F_3[3]=F_2[3]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,798/4$$

$$F_3[4]=F_2[4]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,02/4$$

$$F_3[5]=F_2[5]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,045/2$$

$$F_3[6]=F_2[6]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,018/3$$

$$F_3[7]=F_2[7]*(1-x_{\text{acet}})$$

$$F_3[8]*2=F_2[8]*2+(F_2[1]-F_3[1])*6+(F_2[3]-F_3[3])*6+(F_2[4]-F_3[4])*8+(F_2[5]-F_3[5])*4+(F_2[6]-F_3[6])*6+(F_2[7]-F_3[7])*4+(F_2[9]-F_3[9])*8+(F_2[10]-F_3[10])*6+(F_2[11]-F_3[11])*8+(F_2[12]-F_3[12])*6+(F_2[13]-F_3[13])*10+(F_2[14]-F_3[14])*4+(F_2[15]-F_3[15])*10+(F_2[2]-F_3[2])*2$$

$$F_3[9]=F_2[9]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0/4$$

$$F_3[10]=F_2[10]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,002/3$$

$$F_3[11]=F_2[11]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,011/4$$

$$F_3[12]=F_2[12]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,01/4$$

$$F_3[13]=F_2[13]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,04/4$$

$$F_3[14]=F_2[14]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,056/2$$

$$F_3[15]=F_2[15]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0/4$$

$$F_3=\text{sum}(F_3[i];i=1;15)$$

{ya}

$$F_4[1]=F_3[1]*0,00371$$

$$F_4[2]=F_3[2]*0,0023$$

$$F_4[3]=F_3[3]*0,718$$

$$F_4[4]=F_3[4]*0,35$$

$$F_4[5]=F_3[5]*0,991$$

$$F_4[6]=F_3[6]*0,987$$

$F_4[7]=F_3[7]*0,27$
 $F_4[8]=F_3[8]*1$
 $F_4[9]=F_3[9]*0,085$
 $F_4[10]=F_3[10]*0,1716$
 $F_4[11]=F_3[11]*0,1564$
 $F_4[12]=F_3[12]*0$
 $F_4[13]=F_3[13]*0,722$
 $F_4[14]=F_3[14]*0$
 $F_4[15]=F_3[15]*0$

$F_5[1]=F_3[1]-F_4[1]$
 $F_5[2]=F_3[2]-F_4[2]$
 $F_5[3]=F_3[3]-F_4[3]$
 $F_5[4]=F_3[4]-F_4[4]$
 $F_5[5]=F_3[5]-F_4[5]$
 $F_5[6]=F_3[6]-F_4[6]$
 $F_5[7]=F_3[7]-F_4[7]$
 $F_5[8]=F_3[8]-F_4[8]$
 $F_5[9]=F_3[9]-F_4[9]$
 $F_5[10]=F_3[10]-F_4[10]$
 $F_5[11]=F_3[11]-F_4[11]$
 $F_5[12]=F_3[12]-F_4[12]$
 $F_5[13]=F_3[13]-F_4[13]$
 $F_5[14]=F_3[14]-F_4[14]$
 $F_5[15]=F_3[15]-F_4[15]$

"C1"

$F_6[1]=F_5[1]*0$
 $F_6[2]=F_5[2]*0$
 $F_6[3]=F_5[3]*1$
 $F_6[4]=F_5[4]*0,99$
 $F_6[5]=F_5[5]*1$
 $F_6[6]=F_5[6]*1$
 $F_6[7]=F_5[7]*0,99$
 $F_6[8]=F_5[8]*1$
 $F_6[9]=F_5[9]*0$
 $F_6[10]=F_5[10]*0$
 $F_6[11]=F_5[11]*0$
 $F_6[12]=F_5[12]*0$

$F_6[13]=F_5[13]*1$
 $F_6[14]=F_5[14]*0$
 $F_6[15]=F_5[15]*0$

$F_7[1]=F_5[1]-F_6[1]$
 $F_7[2]=F_5[2]-F_6[2]$
 $F_7[3]=F_5[3]-F_6[3]$
 $F_7[4]=F_5[4]-F_6[4]$
 $F_7[5]=F_5[5]-F_6[5]$
 $F_7[6]=F_5[6]-F_6[6]$
 $F_7[7]=F_5[7]-F_6[7]$
 $F_7[8]=F_5[8]-F_6[8]$
 $F_7[9]=F_5[9]-F_6[9]$
 $F_7[10]=F_5[10]-F_6[10]$
 $F_7[11]=F_5[11]-F_6[11]$
 $F_7[12]=F_5[12]-F_6[12]$
 $F_7[13]=F_5[13]-F_6[13]$
 $F_7[14]=F_5[14]-F_6[14]$
 $F_7[15]=F_5[15]-F_6[15]$

"C2"

$F_8[1]=F_7[1]*0,99$
 $F_8[2]=F_7[2]*0,15$
 $F_8[3]=F_7[3]*1$
 $F_8[4]=F_7[4]*1$
 $F_8[5]=F_7[5]*1$
 $F_8[6]=F_7[6]*1$
 $F_8[7]=F_7[7]*1$
 $F_8[8]=F_7[8]*1$
 $F_8[9]=F_7[9]*0,1$
 $F_8[10]=F_7[10]*1$
 $F_8[11]=F_7[11]*0,2$
 $F_8[12]=F_7[12]*0$
 $F_8[13]=F_7[13]*1$
 $F_8[14]=F_7[14]*0$
 $F_8[15]=F_7[15]*0$

$F_9[1]=F_7[1]-F_8[1]$
 $F_9[2]=F_7[2]-F_8[2]$
 $F_9[3]=F_7[3]-F_8[3]$

F_9[4]=F_7[4]-F_8[4]
F_9[5]=F_7[5]-F_8[5]
F_9[6]=F_7[6]-F_8[6]
F_9[7]=F_7[7]-F_8[7]
F_9[8]=F_7[8]-F_8[8]
F_9[9]=F_7[9]-F_8[9]
F_9[10]=F_7[10]-F_8[10]
F_9[11]=F_7[11]-F_8[11]
F_9[12]=F_7[12]-F_8[12]
F_9[13]=F_7[13]-F_8[13]
F_9[14]=F_7[14]-F_8[14]
F_9[15]=F_7[15]-F_8[15]

"RC etanol"

F_11[1]=F_8[1]*R_et
F_11[2]=F_8[2]*R_et
F_11[3]=F_8[3]*R_et
F_11[4]=F_8[4]*R_et
F_11[5]=F_8[5]*R_et
F_11[6]=F_8[6]*R_et
F_11[7]=F_8[7]*R_et
F_11[8]=F_8[8]*R_et
F_11[9]=F_8[9]*R_et
F_11[10]=F_8[10]*R_et
F_11[11]=F_8[11]*R_et
F_11[12]=F_8[12]*R_et
F_11[13]=F_8[13]*R_et
F_11[14]=F_8[14]*R_et
F_11[15]=F_8[15]*R_et

F_10[1]=F_8[1]-F_11[1]
F_10[2]=F_8[2]-F_11[2]
F_10[3]=F_8[3]-F_11[3]
F_10[4]=F_8[4]-F_11[4]
F_10[5]=F_8[5]-F_11[5]
F_10[6]=F_8[6]-F_11[6]
F_10[7]=F_8[7]-F_11[7]
F_10[8]=F_8[8]-F_11[8]
F_10[9]=F_8[9]-F_11[9]
F_10[10]=F_8[10]-F_11[10]

F_10[11]=F_8[11]-F_11[11]
F_10[12]=F_8[12]-F_11[12]
F_10[13]=F_8[13]-F_11[13]
F_10[14]=F_8[14]-F_11[14]
F_10[15]=F_8[15]-F_11[15]

"Ligeros"

F_12[1]=F_4[1]+F_6[1]
F_12[2]=F_4[2]+F_6[2]
F_12[3]=F_4[3]+F_6[3]
F_12[4]=F_4[4]+F_6[4]
F_12[5]=F_4[5]+F_6[5]
F_12[6]=F_4[6]+F_6[6]
F_12[7]=F_4[7]+F_6[7]
F_12[8]=F_4[8]+F_6[8]
F_12[9]=F_4[9]+F_6[9]
F_12[10]=F_4[10]+F_6[10]
F_12[11]=F_4[11]+F_6[11]
F_12[12]=F_4[12]+F_6[12]
F_12[13]=F_4[13]+F_6[13]
F_12[14]=F_4[14]+F_6[14]
F_12[15]=F_4[15]+F_6[15]

"C3"

F_13[1]=F_12[1]*0
F_13[2]=F_12[2]*0
F_13[3]=F_12[3]*1
F_13[4]=F_12[4]*1
F_13[5]=F_12[5]*1
F_13[6]=F_12[6]*1
F_13[7]=F_12[7]*0,1
F_13[8]=F_12[8]*1
F_13[9]=F_12[9]*1
F_13[10]=F_12[10]*0
F_13[11]=F_12[11]*0
F_13[12]=F_12[12]*0
F_13[13]=F_12[13]*0,4
F_13[14]=F_12[14]*0
F_13[15]=F_12[15]*0
F_13=sum(F_13[i];i=1;15)

F_14[1]=F_12[1]-F_13[1]
F_14[2]=F_12[2]-F_13[2]
F_14[3]=F_12[3]-F_13[3]
F_14[4]=F_12[4]-F_13[4]
F_14[5]=F_12[5]-F_13[5]
F_14[6]=F_12[6]-F_13[6]
F_14[7]=F_12[7]-F_13[7]
F_14[8]=F_12[8]-F_13[8]
F_14[9]=F_12[9]-F_13[9]
F_14[10]=F_12[10]-F_13[10]
F_14[11]=F_12[11]-F_13[11]
F_14[12]=F_12[12]-F_13[12]
F_14[13]=F_12[13]-F_13[13]
F_14[14]=F_12[14]-F_13[14]
F_14[15]=F_12[15]-F_13[15]

F_16[1]=F_14[1]*R_ac
F_16[2]=F_14[2]*R_ac
F_16[3]=F_14[3]*R_ac
F_16[4]=F_14[4]*R_ac
F_16[5]=F_14[5]*R_ac
F_16[6]=F_14[6]*R_ac
F_16[7]=F_14[7]*R_ac
F_16[8]=F_14[8]*R_ac
F_16[9]=F_14[9]*R_ac
F_16[10]=F_14[10]*R_ac
F_16[11]=F_14[11]*R_ac
F_16[12]=F_14[12]*R_ac
F_16[13]=F_14[13]*R_ac
F_16[14]=F_14[14]*R_ac
F_16[15]=F_14[15]*R_ac

F_15[1]=F_14[1]-F_16[1]
F_15[2]=F_14[2]-F_16[2]
F_15[3]=F_14[3]-F_16[3]
F_15[4]=F_14[4]-F_16[4]
F_15[5]=F_14[5]-F_16[5]
F_15[6]=F_14[6]-F_16[6]
F_15[7]=F_14[7]-F_16[7]

$$F_{15}[8]=F_{14}[8]-F_{16}[8]$$

$$F_{15}[9]=F_{14}[9]-F_{16}[9]$$

$$F_{15}[10]=F_{14}[10]-F_{16}[10]$$

$$F_{15}[11]=F_{14}[11]-F_{16}[11]$$

$$F_{15}[12]=F_{14}[12]-F_{16}[12]$$

$$F_{15}[13]=F_{14}[13]-F_{16}[13]$$

$$F_{15}[14]=F_{14}[14]-F_{16}[14]$$

$$F_{15}[15]=F_{14}[15]-F_{16}[15]$$

BALANCE DE MATERIA PRELIMINAR DE LA PLANTA CON CATALIZADOR DE Ta₂O₃ (2º PASO)

	F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8
Etanol	45,04	114,7	70,4	0,2612	70,14	0	70,14	69,44
Agua	5,613	19,4	91,12	0,2096	90,91	0	90,91	13,64
1,3-BD	0	0	33,64	24,15	9,487	9,487	0	0
Butenos	0	0,005516	0,8486	0,297	0,5516	0,5461	0,005516	0,005516
Etileno	0	0	3,794	3,76	0,03415	0,03415	0	0
Propileno	0	0	1,012	0,9986	0,01315	0,01315	0	0
Acetaldeh.	53,42	76,44	36,38	9,824	26,56	26,3	0,2656	0,2656
Hidrógeno	0,001794	0,001794	4,914	4,914	0	0	0	0
Butanona	0,07352	0,08093	0,08093	0,006879	0,07405	0	0,07405	0,007405
Acetona	0,1333	4,661	4,773	0,8191	3,954	0	3,954	3,954
Acet. Etilo	0,1967	0,4513	0,915	0,1431	0,7719	0	0,7719	0,1544
Crotonal	0	0	0,4216	0	0,4216	0	0,4216	0
DEE	0	1,221	2,907	2,099	0,8082	0,8082	0	0
Pesados	0,05138	0,05138	4,773	0	4,773	0	4,773	0
Butanol	0	0	0	0	0	0	0	0

	F9	F10	F11	F12	F13	F14	F15	F16
Etanol	0,7014	0	69,44	0,2612	0	0,2612	0,0784	0,1828
Agua	77,27	0	13,64	0,2096	0	0,2096	0,0629	0,1467
1,3-Butadieno	0	0	0	33,64	33,64	0	0	0
Butenos	0	0	0,005516	0,8431	0,8431	0	0	0
Etileno	0	0	0	3,794	3,794	0	0	0
Propileno	0	0	0	1,012	1,012	0	0	0
Acetaldehído	0	0	0,2656	36,12	3,612	32,51	9,75	22,76
Hidrógeno	0	0	0	4,914	4,914	0	0	0
Butanona	0,06664	0	0,007405	0,006879	0,006879	0	0	0
Acetona	0	0	3,954	0,8191	0	0,8191	0,2418	0,5734
Acet. De Etilo	0,6175	0	0,1544	0,1431	0	0,1431	0,0429	0,1002
Crotonaldehy.	0,4216	0	0	0	0	0	0	0
DEE	0	0	0	2,907	1,163	1,744	0,523	1,221
Pesados	4,773	0	0	0	0	0	0	0
Butanol	0	0	0	0	0	0	0	0

PLANTA DE BUTADIENO CON CATALIZADOR DE ZrO_2

· Código

{PLANTA DE ZrO_2 }

$$R_{ac}=0,7$$

$$R_{et}=0,99$$

$$F_{2[1]}/F_{2[7]}=3,5$$

$$F_{1[1]}=Fa_{14[1]}$$

$$F_{1[2]}=Fa_{14[2]}$$

$$F_{1[3]}=Fa_{14[3]}$$

$$F_{1[4]}=Fa_{14[4]}$$

$$F_{1[5]}=Fa_{14[5]}$$

$$F_{1[6]}=Fa_{14[6]}$$

$$F_{1[7]}=Fa_{14[7]}$$

$$F_{1[8]}=Fa_{14[8]}$$

$$F_{1[9]}=Fa_{14[9]}$$

$$F_{1[10]}=Fa_{14[10]}$$

$$F_{1[11]}=Fa_{14[11]}$$

$$F_{1[12]}=Fa_{14[12]}$$

$$F_{1[13]}=Fa_{14[13]}$$

$$F_{1[14]}=Fa_{14[14]}$$

$$F_{1[15]}=Fa_{14[15]}$$

$$F_1=\text{sum}(F_{1[i]};i=1;15)$$

$$F_{2[1]}=F_{1[1]}+F_{12[1]}+F_{15[1]}$$

$$F_{2[2]}=F_{1[2]}+F_{12[2]}+F_{15[2]}$$

$$F_{2[3]}=F_{1[3]}+F_{12[3]}+F_{15[3]}$$

$$F_{2[4]}=F_{1[4]}+F_{12[4]}+F_{15[4]}$$

$$F_{2[5]}=F_{1[5]}+F_{12[5]}+F_{15[5]}$$

$$F_{2[6]}=F_{1[6]}+F_{12[6]}+F_{15[6]}$$

$$F_{2[7]}=F_{1[7]}+F_{12[7]}+F_{15[7]}$$

$$F_{2[8]}=F_{1[8]}+F_{12[8]}+F_{15[8]}$$

$$F_{2[9]}=F_{1[9]}+F_{12[9]}+F_{15[9]}$$

$$F_{2[10]}=F_{1[10]}+F_{12[10]}+F_{15[10]}$$

$$F_{2[11]}=F_{1[11]}+F_{12[11]}+F_{15[11]}$$

$$F_{2[12]}=F_{1[12]}+F_{12[12]}+F_{15[12]}$$

$$F_{2[13]}=F_{1[13]}+F_{12[13]}+F_{15[13]}$$

$$F_{2[14]}=F_{1[14]}+F_{12[14]}+F_{15[14]}$$

$$F_2[15]=F_1[15]+F_2[15]+F_3[15]$$

$$F_2=\text{sum}(F_2[i];i=1;15)$$

{Balance Atómico}

$$x_{\text{acet}}=0,524$$

$$F_3[1]=F_2[1]*(1-x_{\text{et}})$$

$$F_3[1]=F_2[1]-(F_2[7]-F_3[7])$$

$$F_3[2]*1=(F_2[2]*1+(F_2[1]-F_3[1])*1+(F_2[3]-F_3[3])*0+(F_2[4]-F_3[4])*0+(F_2[5]-F_3[5])*0+(F_2[6]-F_3[6])*0+(F_2[7]-F_3[7])*1+(F_2[9]-F_3[9])*1+(F_2[10]-F_3[10])*1+(F_2[11]-F_3[11])*2+(F_2[12]-F_3[12])*1+(F_2[13]-F_3[13])*1+(F_2[14]-F_3[14])*2+(F_2[15]-F_3[15])*1)$$

$$F_3[3]=F_2[3]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,92/4$$

$$F_3[4]=F_2[4]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0/4$$

$$F_3[5]=F_2[5]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,023/2$$

$$F_3[6]=F_2[6]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,005/3$$

$$F_3[7]=F_2[7]*(1-x_{\text{acet}})$$

$$H2.\text{real}=(F_2[8]^2+(F_2[1]-F_3[1])*6+(F_2[3]-F_3[3])*6+(F_2[4]-F_3[4])*8+(F_2[5]-F_3[5])*4+(F_2[6]-F_3[6])*6+(F_2[7]-F_3[7])*4+(F_2[9]-F_3[9])*8+(F_2[10]-F_3[10])*6+(F_2[11]-F_3[11])*8+(F_2[12]-F_3[12])*6+(F_2[13]-F_3[13])*10+(F_2[14]-F_3[14])*4+(F_2[15]-F_3[15])*10+(F_2[2]-F_3[2])^2)/2$$

$$F_3[8]^2=\text{step}(F_2[8]^2+(F_2[1]-F_3[1])*6+(F_2[3]-F_3[3])*6+(F_2[4]-F_3[4])*8+(F_2[5]-F_3[5])*4+(F_2[6]-F_3[6])*6+(F_2[7]-F_3[7])*4+(F_2[9]-F_3[9])*8+(F_2[10]-F_3[10])*6+(F_2[11]-F_3[11])*8+(F_2[12]-F_3[12])*6+(F_2[13]-F_3[13])*10+(F_2[14]-F_3[14])*4+(F_2[15]-F_3[15])*10+(F_2[2]-F_3[2])^2)$$

$$F_3[9]=F_2[9]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^4*0/4$$

$$F_3[10]=F_2[10]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0/3$$

$$F_3[11]=F_2[11]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,005/4$$

$$F_3[12]=F_2[12]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0/4$$

$$F_3[13]=F_2[13]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,02/4$$

$$F_3[14]=F_2[14]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^2*0,02/2$$

$$F_3[15]=F_2[15]+(F_2[1]*x_{\text{et}}+F_2[7]*x_{\text{acet}})^4*0,007/4$$

$$F_3=\text{sum}(F_3[i];i=1;15)$$

$$C_2=F_2[1]^2+F_2[2]^0+F_2[3]^4+F_2[4]^4+F_2[5]^2+F_2[6]^3+F_2[7]^2+F_2[8]^0+F_2[9]^4+F_2[10]^3+F_2[11]^4+F_2[12]^4+F_2[13]^4+F_2[14]^2+F_2[15]^4$$

$$C_3 = F_{3[1]}^2 + F_{3[2]}^0 + F_{3[3]}^4 + F_{3[4]}^4 + F_{3[5]}^2 + F_{3[6]}^3 + F_{3[7]}^2 + F_{3[8]}^0 + F_{3[9]}^4 + F_{3[10]}^3 + F_{3[11]}^4 + F_{3[12]}^4 + F_{3[13]}^4 + F_{3[14]}^2 + F_{3[15]}^4$$

$$H_2 = F_{2[1]}^6 + F_{2[2]}^2 + F_{2[3]}^6 + F_{2[4]}^8 + F_{2[5]}^4 + F_{2[6]}^6 + F_{2[7]}^4 + F_{2[8]}^2 + F_{2[9]}^8 + F_{2[10]}^6 + F_{2[11]}^8 + F_{2[12]}^6 + F_{2[13]}^{10} + F_{2[14]}^4 + F_{2[15]}^{10}$$

$$H_3 = F_{3[1]}^6 + F_{3[2]}^2 + F_{3[3]}^6 + F_{3[4]}^8 + F_{3[5]}^4 + F_{3[6]}^6 + F_{3[7]}^4 + F_{3[8]}^2 + F_{3[9]}^8 + F_{3[10]}^6 + F_{3[11]}^8 + F_{3[12]}^6 + F_{3[13]}^{10} + F_{3[14]}^4 + F_{3[15]}^{10}$$

$$O_2 = F_{2[1]}^1 + F_{2[2]}^1 + F_{2[3]}^0 + F_{2[4]}^0 + F_{2[5]}^0 + F_{2[6]}^0 + F_{2[7]}^1 + F_{2[8]}^0 + F_{2[9]}^1 + F_{2[10]}^1 + F_{2[11]}^2 + F_{2[12]}^1 + F_{2[13]}^1 + F_{2[14]}^2 + F_{2[15]}^1$$

$$O_3 = F_{3[1]}^1 + F_{3[2]}^1 + F_{3[3]}^0 + F_{3[4]}^0 + F_{3[5]}^0 + F_{3[6]}^0 + F_{3[7]}^1 + F_{3[8]}^0 + F_{3[9]}^1 + F_{3[10]}^1 + F_{3[11]}^2 + F_{3[12]}^1 + F_{3[13]}^1 + F_{3[14]}^2 + F_{3[15]}^1$$

{ya}

{BM en Flash}

$$F_{5[1]} = F_{3[1]} \cdot 0,002$$

$$F_{5[2]} = F_{3[2]} \cdot 0,002$$

$$F_{5[3]} = F_{3[3]} \cdot 0,078$$

$$F_{5[4]} = F_{3[4]} \cdot 0,778$$

$$F_{5[5]} = F_{3[5]} \cdot 0,778$$

$$F_{5[6]} = F_{3[6]} \cdot 0,697$$

$$F_{5[7]} = F_{3[7]} \cdot 0,0178$$

$$F_{5[8]} = F_{3[8]} \cdot 0,8$$

$$F_{5[9]} = F_{3[9]} \cdot 0,0053$$

$$F_{5[10]} = F_{3[10]} \cdot 0,0116$$

$$F_{5[11]} = F_{3[11]} \cdot 0,00854$$

$$F_{5[12]} = F_{3[12]} \cdot 0$$

$$F_{5[13]} = F_{3[13]} \cdot 0,0841$$

$$F_{5[14]} = F_{3[14]} \cdot 0,00042$$

$$F_{5[15]} = F_{3[15]} \cdot 0,0003$$

$$F_{4[1]} = F_{3[1]} - F_{5[1]}$$

$$F_{4[2]} = F_{3[2]} - F_{5[2]}$$

$$F_{4[3]} = F_{3[3]} - F_{5[3]}$$

$$F_{4[4]} = F_{3[4]} - F_{5[4]}$$

$$F_{4[5]} = F_{3[5]} - F_{5[5]}$$

$$F_{4[6]} = F_{3[6]} - F_{5[6]}$$

$$F_{4[7]} = F_{3[7]} - F_{5[7]}$$

$$F_{4[8]} = F_{3[8]} - F_{5[8]}$$

$$F_{4[9]} = F_{3[9]} - F_{5[9]}$$

$$F_{4[10]} = F_{3[10]} - F_{5[10]}$$

$F_4[11]=F_3[11]-F_5[11]$
 $F_4[12]=F_3[12]-F_5[12]$
 $F_4[13]=F_3[13]-F_5[13]$
 $F_4[14]=F_3[14]-F_5[14]$
 $F_4[15]=F_3[15]-F_5[15]$
 $F_4=\text{sum}(F_4[i];i=1;15)$

{BM en TORRE DE DESTILACIÓN 1}

$F_7[1]=F_4[1]*0,01$
 $F_7[2]=F_4[2]*0,001$
 $F_7[3]=F_4[3]*0,999$
 $F_7[4]=F_4[4]*1$
 $F_7[5]=F_4[5]*1$
 $F_7[6]=F_4[6]*1$
 $F_7[7]=F_4[7]*0,99$
 $F_7[8]=F_4[8]*1$
 $F_7[9]=F_4[9]*0,01$
 $F_7[10]=F_4[10]*0,1$
 $F_7[11]=F_4[11]*0,01$
 $F_7[12]=F_4[12]*0$
 $F_7[13]=F_4[13]*0,7$
 $F_7[14]=F_4[14]*0$
 $F_7[15]=F_4[15]*0$
 $F_7=\text{sum}(F_7[i];i=1;15)$

$F_6[1]=F_4[1]-F_7[1]$
 $F_6[2]=F_4[2]-F_7[2]$
 $F_6[3]=F_4[3]-F_7[3]$
 $F_6[4]=F_4[4]-F_7[4]$
 $F_6[5]=F_4[5]-F_7[5]$
 $F_6[6]=F_4[6]-F_7[6]$
 $F_6[7]=F_4[7]-F_7[7]$
 $F_6[8]=F_4[8]-F_7[8]$
 $F_6[9]=F_4[9]-F_7[9]$
 $F_6[10]=F_4[10]-F_7[10]$
 $F_6[11]=F_4[11]-F_7[11]$
 $F_6[12]=F_4[12]-F_7[12]$
 $F_6[13]=F_4[13]-F_7[13]$

$F_6[14]=F_4[14]-F_7[14]$
 $F_6[15]=F_4[15]-F_7[15]$
 $F_6=\text{sum}(F_6[i];i=1;15)$

{BM en TORRE DE DESTILACIÓN 3}

$F_{11}[1]=F_7[1]*0$
 $F_{11}[2]=F_7[2]*0$
 $F_{11}[3]=F_7[3]*0,99$
 $F_{11}[4]=F_7[4]*1$
 $F_{11}[5]=F_7[5]*1$
 $F_{11}[6]=F_7[6]*1$
 $F_{11}[7]=F_7[7]*0,01$
 $F_{11}[8]=F_7[8]*1$
 $F_{11}[9]=F_7[9]*0$
 $F_{11}[10]=F_7[10]*0$
 $F_{11}[11]=F_7[11]*0$
 $F_{11}[12]=F_7[12]*0$
 $F_{11}[13]=F_7[13]*0,1$
 $F_{11}[14]=F_7[14]*0$
 $F_{11}[15]=F_7[15]*0$
 $F_{11}=\text{sum}(F_{11}[i];i=1;15)$

$F_{10}[1]=F_7[1]-F_{11}[1]$
 $F_{10}[2]=F_7[2]-F_{11}[2]$
 $F_{10}[3]=F_7[3]-F_{11}[3]$
 $F_{10}[4]=F_7[4]-F_{11}[4]$
 $F_{10}[5]=F_7[5]-F_{11}[5]$
 $F_{10}[6]=F_7[6]-F_{11}[6]$
 $F_{10}[7]=F_7[7]-F_{11}[7]$
 $F_{10}[8]=F_7[8]-F_{11}[8]$
 $F_{10}[9]=F_7[9]-F_{11}[9]$
 $F_{10}[10]=F_7[10]-F_{11}[10]$
 $F_{10}[11]=F_7[11]-F_{11}[11]$
 $F_{10}[12]=F_7[12]-F_{11}[12]$
 $F_{10}[13]=F_7[13]-F_{11}[13]$
 $F_{10}[14]=F_7[14]-F_{11}[14]$
 $F_{10}[15]=F_7[15]-F_{11}[15]$
 $F_{10}=\text{sum}(F_{10}[i];i=1;15)$

{Spliter Acetaldehido}

$F_{10}[1]=F_{14}[1]+F_{15}[1]$
 $F_{10}[2]=F_{14}[2]+F_{15}[2]$
 $F_{10}[3]=F_{14}[3]+F_{15}[3]$
 $F_{10}[4]=F_{14}[4]+F_{15}[4]$
 $F_{10}[5]=F_{14}[5]+F_{15}[5]$
 $F_{10}[6]=F_{14}[6]+F_{15}[6]$
 $F_{10}[7]=F_{14}[7]+F_{15}[7]$
 $F_{10}[8]=F_{14}[8]+F_{15}[8]$
 $F_{10}[9]=F_{14}[9]+F_{15}[9]$
 $F_{10}[10]=F_{14}[10]+F_{15}[10]$
 $F_{10}[11]=F_{14}[11]+F_{15}[11]$
 $F_{10}[12]=F_{14}[12]+F_{15}[12]$
 $F_{10}[13]=F_{14}[13]+F_{15}[13]$
 $F_{10}[14]=F_{14}[14]+F_{15}[14]$
 $F_{10}[15]=F_{14}[15]+F_{15}[15]$
 $F_{14}=\text{sum}(F_{14}[i];i=1;15)$

{BM Torre 2}

$F_9[1]=F_6[1]*0,99$
 $F_9[2]=F_6[2]*0,34$
 $F_9[3]=F_6[3]*1$
 $F_9[4]=F_6[4]*1$
 $F_9[5]=F_6[5]*1$
 $F_9[6]=F_6[6]*1$
 $F_9[7]=F_6[7]*1$
 $F_9[8]=F_6[8]*1$
 $F_9[9]=F_6[9]*1$
 $F_9[10]=F_6[10]*1$
 $F_9[11]=F_6[11]*1$
 $F_9[12]=F_6[12]*0$
 $F_9[13]=F_6[13]*1$
 $F_9[14]=F_6[14]*0$
 $F_9[15]=F_6[15]*0$
 $F_9=\text{sum}(F_9[i];i=1;15)$

$F_8[1]=F_6[1]-F_9[1]$
 $F_8[2]=F_6[2]-F_9[2]$
 $F_8[3]=F_6[3]-F_9[3]$

$F_8[4]=F_6[4]-F_9[4]$
 $F_8[5]=F_6[5]-F_9[5]$
 $F_8[6]=F_6[6]-F_9[6]$
 $F_8[7]=F_6[7]-F_9[7]$
 $F_8[8]=F_6[8]-F_9[8]$
 $F_8[9]=F_6[9]-F_9[9]$
 $F_8[10]=F_6[10]-F_9[10]$
 $F_8[11]=F_6[11]-F_9[11]$
 $F_8[12]=F_6[12]-F_9[12]$
 $F_8[13]=F_6[13]-F_9[13]$
 $F_8[14]=F_6[14]-F_9[14]$
 $F_8[15]=F_6[15]-F_9[15]$
 $F_8=\text{sum}(F_8[i],i=1;15)$

{Spliter de Etanol}

$F_9[1]=F_{12}[1]+F_{13}[1]$
 $F_9[2]=F_{12}[2]+F_{13}[2]$
 $F_9[3]=F_{12}[3]+F_{13}[3]$
 $F_9[4]=F_{12}[4]+F_{13}[4]$
 $F_9[5]=F_{12}[5]+F_{13}[5]$
 $F_9[6]=F_{12}[6]+F_{13}[6]$
 $F_9[7]=F_{12}[7]+F_{13}[7]$
 $F_9[8]=F_{12}[8]+F_{13}[8]$
 $F_9[9]=F_{12}[9]+F_{13}[9]$
 $F_9[10]=F_{12}[10]+F_{13}[10]$
 $F_9[11]=F_{12}[11]+F_{13}[11]$
 $F_9[12]=F_{12}[12]+F_{13}[12]$
 $F_9[13]=F_{12}[13]+F_{13}[13]$
 $F_9[14]=F_{12}[14]+F_{13}[14]$
 $F_9[15]=F_{12}[15]+F_{13}[15]$

{Recirculación}

$F_{15}[1]=F_{10}[1]*R_{ac}$
 $F_{15}[2]=F_{10}[2]*R_{ac}$
 $F_{15}[3]=F_{10}[3]*R_{ac}$
 $F_{15}[4]=F_{10}[4]*R_{ac}$
 $F_{15}[5]=F_{10}[5]*R_{ac}$
 $F_{15}[6]=F_{10}[6]*R_{ac}$
 $F_{15}[7]=F_{10}[7]*R_{ac}$
 $F_{15}[8]=F_{10}[8]*R_{ac}$

$F_{15[9]}=F_{10[9]}*R_{ac}$
 $F_{15[10]}=F_{10[10]}*R_{ac}$
 $F_{15[11]}=F_{10[11]}*R_{ac}$
 $F_{15[12]}=F_{10[12]}*R_{ac}$
 $F_{15[13]}=F_{10[13]}*R_{ac}$
 $F_{15[14]}=F_{10[14]}*R_{ac}$
 $F_{15[15]}=F_{10[15]}*R_{ac}$
 $F_{15}=\text{sum}(F_{15[i]};i=1;15)$

$F_{12[1]}=F_{9[1]}*R_{et}$
 $F_{12[2]}=F_{9[2]}*R_{et}$
 $F_{12[3]}=F_{9[3]}*R_{et}$
 $F_{12[4]}=F_{9[4]}*R_{et}$
 $F_{12[5]}=F_{9[5]}*R_{et}$
 $F_{12[6]}=F_{9[6]}*R_{et}$
 $F_{12[7]}=F_{9[7]}*R_{et}$
 $F_{12[8]}=F_{9[8]}*R_{et}$
 $F_{12[9]}=F_{9[9]}*R_{et}$
 $F_{12[10]}=F_{9[10]}*R_{et}$
 $F_{12[11]}=F_{9[11]}*R_{et}$
 $F_{12[12]}=F_{9[12]}*R_{et}$
 $F_{12[13]}=F_{9[13]}*R_{et}$
 $F_{12[14]}=F_{9[14]}*R_{et}$
 $F_{12[15]}=F_{9[15]}*R_{et}$
 $F_{12}=\text{sum}(F_{12[i]};i=1;15)$

·BALANCE DE MATERIA PRELIMINAR DE LA PLANTA CON CATALIZADOR ZrO2 (2º Paso)

	F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8
Etanol	46,32	271,4	230,8	230,3	0,4616	228	2,303	2,28
Agua	5,771	47,32	123,5	123,3	0,2471	123,2	0,1233	81,3
1,3-Butadieno	0	0,2772	37,66	34,72	2,937	0,03472	34,69	0
Butenos	0	0	0	0	0	0	0	0
Etileno	0	0	1,869	0,415	1,454	0	0,415	0
Propileno	0	0	0,2709	0,08208	0,1888	0	0,08208	0
Acetaldehído	52,31	77,55	36,91	36,25	0,657	0,3625	35,89	0
Hidrógeno	0,00176	0,00176	0	0	0	0	0	0
Butanona	0,072	3,971	3,971	3,95	0,02105	3,911	0,0395	0
Acetona	0,1306	2,603	2,603	2,573	0,0302	2,316	0,2573	0
Acet. De Etilo	0,1927	18,35	18,56	18,4	0,1585	18,22	0,184	0
Crotonaldehy.	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	0	1,695	2,508	2,297	0,2109	0,6891	1,608	0
Pesados	0,05031	0,05031	1,676	1,675	0,0007	1,675	0	1,675
Butanol	0	0	0,5689	0,5687	0,00017	0,5687	0	0,5687

	F9	F10	F11	F12	F13	F14	F15
Etanol	225,7	2,303	0	223,5	2,257	0,6909	1,612
Agua	41,88	0,1233	0	41,46	0,4188	0,03699	0,08631
1,3-Butadieno	0,03472	0,3469	34,34	0,03438	0,00035	0,1041	0,2428
Butenos	0	0	0	0	0	0	0
Etileno	0	0	0,415	0	0	0	0
Propileno	0	0	0,08208	0	0	0	0
Acetaldehído	0,3625	35,53	0,3589	0,3589	0,00363	10,66	24,87
Hidrógeno	0	0	0	0	0	0	0
Butanona	3,911	0,0395	0	3,871	0,03911	0,01185	0,02765
Acetona	2,316	0,2573	0	2,293	0,02316	0,0772	0,1801
Acet. De Etilo	18,22	0,184	0	18,03	0,1822	0,0552	0,1288
Crotonaldehy.	0	0	0	0	0	0	0
DEE	0,6891	1,447	0,1608	0,6822	0,00689	0,4341	1,013
Pesados	0	0	0	0	0	0	0
Butanol	0	0	0	0	0	0	0

PLANTA DE BUTADIENO CON CATALIZADOR DE Hf:Zn

· Código

{1:Etanol 2:Agua 3:BD 4:B= 5:Et= 6:Pr= 7:Acetaldh 8:H2 9:Butanal 10:Acetona
11: DEE 12: Pesados 13: Butanol }

Rsep=0,76

F_1[1]=107,2

F_1[2]=F_1[1]*(0,11/0,89)

F_1[3]=0

F_1[4]=0

F_1[5]=0

F_1[6]=0

F_1[7]=0

F_1[8]=0

F_1[9]=0

F_1[10]=0

F_1[11]=0

F_1[12]=0

F_1[13]=0

F_2[1]=F_1[1]+F_7[1]

F_2[2]=F_1[2]+F_7[2]

F_2[3]=F_1[3]+F_7[3]

F_2[4]=F_1[4]+F_7[4]

F_2[5]=F_1[5]+F_7[5]

F_2[6]=F_1[6]+F_7[6]

F_2[7]=F_1[7]+F_7[7]

F_2[8]=F_1[8]+F_7[8]

F_2[9]=F_1[9]+F_7[9]

F_2[10]=F_1[10]+F_7[10]

F_2[11]=F_1[11]+F_7[11]

F_2[12]=F_1[12]+F_7[12]

F_2[13]=F_1[13]+F_7[13]

F_2=sum(F_2[i];i=1;13)

F_3[1]=F_12[1]*(-0,1801*F_2+136,27)

F_3[2]=F_12[2]*(-0,004*F_2+2,9023)

$$\begin{aligned}
F_{3[3]} &= F_{12[3]} * (2,348 * \exp(-0,007 * F_2)) \\
F_{3[4]} &= F_{12[4]} * (453,64 * \exp(-4,4135 * F_2)) \\
F_{3[5]} &= F_{12[5]} * (-5 * 10^{(-5)} * F_2 + 0,9993) \\
F_{3[6]} &= F_{12[6]} * (-8 * 10^{(-5)} * F_2 + 0,9902) \\
F_{3[7]} &= 0 * F_{12[7]} \\
F_{3[8]} &= F_{12[8]} * (-2 * 10^{(-6)} * F_2 + 1) \\
F_{3[9]} &= 0 * F_{12[9]} \\
F_{3[10]} &= 0 * F_{12[10]} \\
F_{3[11]} &= F_{12[11]} * (-8,10^{(-7)} * F_2 + 0,0002 * F_2 + 0,2851) \\
F_{3[12]} &= 0 * F_{12[12]} \\
F_{3[13]} &= 0 * F_{12[13]}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_{4[1]} &= F_2[1] + F_{12[1]} - F_{3[1]} \\
F_{4[2]} &= F_2[2] + F_{12[2]} - F_{3[2]} \\
F_{4[3]} &= F_2[3] + F_{12[3]} - F_{3[3]} \\
F_{4[4]} &= F_2[4] + F_{12[4]} - F_{3[4]} \\
F_{4[5]} &= F_2[5] + F_{12[5]} - F_{3[5]} \\
F_{4[6]} &= F_2[6] + F_{12[6]} - F_{3[6]} \\
F_{4[7]} &= F_2[7] + F_{12[7]} - F_{3[7]} \\
F_{4[8]} &= F_2[8] + F_{12[8]} - F_{3[8]} \\
F_{4[9]} &= F_2[9] + F_{12[9]} - F_{3[9]} \\
F_{4[10]} &= F_2[10] + F_{12[10]} - F_{3[10]} \\
F_{4[11]} &= F_2[11] + F_{12[11]} - F_{3[11]} \\
F_{4[12]} &= F_2[12] + F_{12[12]} - F_{3[12]} \\
F_{4[13]} &= F_2[13] + F_{12[13]} - F_{3[13]}
\end{aligned}$$

"Columna 1: desorbedor"

$$\begin{aligned}
F_{5[1]} &= F_{4[1]} * 0,001 \\
F_{5[2]} &= F_{4[2]} * 0 \\
F_{5[3]} &= F_{4[3]} * 0,999 \\
F_{5[4]} &= F_{4[4]} * 0,94 \\
F_{5[5]} &= F_{4[5]} * 1 \\
F_{5[6]} &= F_{4[6]} * 1 \\
F_{5[7]} &= F_{4[7]} * 0,35 \\
F_{5[8]} &= F_{4[8]} * 1 \\
F_{5[9]} &= F_{4[9]} * 0 \\
F_{5[10]} &= F_{4[10]} * 0,99 \\
F_{5[11]} &= F_{4[11]} * 0,9 \\
F_{5[12]} &= F_{4[12]} * 0 \\
F_{5[13]} &= F_{4[13]} * 0
\end{aligned}$$

$F_6[1]=F_4[1]-F_5[1]$
 $F_6[2]=F_4[2]-F_5[2]$
 $F_6[3]=F_4[3]-F_5[3]$
 $F_6[4]=F_4[4]-F_5[4]$
 $F_6[5]=F_4[5]-F_5[5]$
 $F_6[6]=F_4[6]-F_5[6]$
 $F_6[7]=F_4[7]-F_5[7]$
 $F_6[8]=F_4[8]-F_5[8]$
 $F_6[9]=F_4[9]-F_5[9]$
 $F_6[10]=F_4[10]-F_5[10]$
 $F_6[11]=F_4[11]-F_5[11]$
 $F_6[12]=F_4[12]-F_5[12]$
 $F_6[13]=F_4[13]-F_5[13]$

"Columna 2"

$F_{18}[1]=F_6[1]*0,001$
 $F_{18}[2]=F_6[2]*0,002$
 $F_{18}[3]=F_6[3]*1$
 $F_{18}[4]=F_6[4]*1$
 $F_{18}[5]=F_6[5]*1$
 $F_{18}[6]=F_6[6]*1$
 $F_{18}[7]=F_6[7]*0,999$
 $F_{18}[8]=F_6[8]*1$
 $F_{18}[9]=F_6[9]*0,13$
 $F_{18}[10]=F_6[10]*0$
 $F_{18}[11]=F_6[11]*0$
 $F_{18}[12]=F_6[12]*0$
 $F_{18}[13]=F_6[13]*0$

$F_{16}[1]=F_6[1]-F_{18}[1]$
 $F_{16}[2]=F_6[2]-F_{18}[2]$
 $F_{16}[3]=F_6[3]-F_{18}[3]$
 $F_{16}[4]=F_6[4]-F_{18}[4]$
 $F_{16}[5]=F_6[5]-F_{18}[5]$
 $F_{16}[6]=F_6[6]-F_{18}[6]$
 $F_{16}[7]=F_6[7]-F_{18}[7]$
 $F_{16}[8]=F_6[8]-F_{18}[8]$
 $F_{16}[9]=F_6[9]-F_{18}[9]$
 $F_{16}[10]=F_6[10]-F_{18}[10]$

$F_{16}[11]=F_6[11]-F_{18}[11]$
 $F_{16}[12]=F_6[12]-F_{18}[12]$
 $F_{16}[13]=F_6[13]-F_{18}[13]$

"Splitter"

$F_7[1]=F_{16}[1]*R_{sep}$
 $F_7[2]=F_{16}[2]*R_{sep}$
 $F_7[3]=F_{16}[3]*R_{sep}$
 $F_7[4]=F_{16}[4]*R_{sep}$
 $F_7[5]=F_{16}[5]*R_{sep}$
 $F_7[6]=F_{16}[6]*R_{sep}$
 $F_7[7]=F_{16}[7]*R_{sep}$
 $F_7[8]=F_{16}[8]*R_{sep}$
 $F_7[9]=F_{16}[9]*R_{sep}$
 $F_7[10]=F_{16}[10]*R_{sep}$
 $F_7[11]=F_{16}[11]*R_{sep}$
 $F_7[12]=F_{16}[12]*R_{sep}$
 $F_7[13]=F_{16}[13]*R_{sep}$

$F_{17}[1]=F_{16}[1]-F_7[1]$
 $F_{17}[2]=F_{16}[2]-F_7[2]$
 $F_{17}[3]=F_{16}[3]-F_7[3]$
 $F_{17}[4]=F_{16}[4]-F_7[4]$
 $F_{17}[5]=F_{16}[5]-F_7[5]$
 $F_{17}[6]=F_{16}[6]-F_7[6]$
 $F_{17}[7]=F_{16}[7]-F_7[7]$
 $F_{17}[8]=F_{16}[8]-F_7[8]$
 $F_{17}[9]=F_{16}[9]-F_7[9]$
 $F_{17}[10]=F_{16}[10]-F_7[10]$
 $F_{17}[11]=F_{16}[11]-F_7[11]$
 $F_{17}[12]=F_{16}[12]-F_7[12]$
 $F_{17}[13]=F_{16}[13]-F_7[13]$

"Flash 3"

$F_{14}[1]=F_3[1]*0,001$
 $F_{14}[2]=F_3[2]*0$
 $F_{14}[3]=F_3[3]*1$
 $F_{14}[4]=F_3[4]*1$
 $F_{14}[5]=F_3[5]*1$
 $F_{14}[6]=F_3[6]*1$

$F_{14[7]}=F_{3[7]}*0$
 $F_{14[8]}=F_{3[8]}*1$
 $F_{14[9]}=F_{3[9]}*0$
 $F_{14[10]}=F_{3[10]}*0$
 $F_{14[11]}=F_{3[11]}*0$
 $F_{14[12]}=F_{3[12]}*0$
 $F_{14[13]}=F_{3[13]}*0$

$F_{15[1]}=F_{3[1]}-F_{14[1]}$
 $F_{15[2]}=F_{3[2]}-F_{14[2]}$
 $F_{15[3]}=F_{3[3]}-F_{14[3]}$
 $F_{15[4]}=F_{3[4]}-F_{14[4]}$
 $F_{15[5]}=F_{3[5]}-F_{14[5]}$
 $F_{15[6]}=F_{3[6]}-F_{14[6]}$
 $F_{15[7]}=F_{3[7]}-F_{14[7]}$
 $F_{15[8]}=F_{3[8]}-F_{14[8]}$
 $F_{15[9]}=F_{3[9]}-F_{14[9]}$
 $F_{15[10]}=F_{3[10]}-F_{14[10]}$
 $F_{15[11]}=F_{3[11]}-F_{14[11]}$
 $F_{15[12]}=F_{3[12]}-F_{14[12]}$
 $F_{15[13]}=F_{3[13]}-F_{14[13]}$

$F_{8[1]}=F_{17[1]}+F_{15[1]}$
 $F_{8[2]}=F_{17[2]}+F_{15[2]}$
 $F_{8[3]}=F_{17[3]}+F_{15[3]}$
 $F_{8[4]}=F_{17[4]}+F_{15[4]}$
 $F_{8[5]}=F_{17[5]}+F_{15[5]}$
 $F_{8[6]}=F_{17[6]}+F_{15[6]}$
 $F_{8[7]}=F_{17[7]}+F_{15[7]}$
 $F_{8[8]}=F_{17[8]}+F_{15[8]}$
 $F_{8[9]}=F_{17[9]}+F_{15[9]}$
 $F_{8[10]}=F_{17[10]}+F_{15[10]}$
 $F_{8[11]}=F_{17[11]}+F_{15[11]}$
 $F_{8[12]}=F_{17[12]}+F_{15[12]}$
 $F_{8[13]}=F_{17[13]}+F_{15[13]}$

{Balance Atómico}

$x_{et}=0,992$

$$F_9[1]=F_8[1]*(1-x_{et})$$

$$F_9[2]*1=(F_8[2]*1+(F_8[1]-F_9[1])*1+(F_8[3]-F_9[3])*0+(F_8[4]-F_9[4])*0+(F_8[5]-F_9[5])*0+(F_8[6]-F_9[6])*0+(F_8[7]-F_9[7])*1+(F_8[9]-F_9[9])*1+(F_8[10]-F_9[10])*1+(F_8[11]-F_9[11])*1+(F_8[12]-F_9[12])*2+(F_8[13]-F_9[13])*1)$$

$$F_9[3]=F_8[3]+(F_8[1]*x_{et})^2*0,71/4$$

$$F_9[4]=F_8[4]+(F_8[1]*x_{et})^2*0,038/4$$

$$F_9[5]=F_8[5]+(F_8[1]*x_{et})^2*0,058/2$$

$$F_9[6]=F_8[6]+(F_8[1]*x_{et})^2*0,036/3$$

$$F_9[7]=F_8[7]+(F_8[1]*x_{et})^2*0,04/2$$

$$F_9[8]*2=(F_8[8]*2+(F_8[1]-F_9[1])*6+(F_8[3]-F_9[3])*6+(F_8[4]-F_9[4])*8+(F_8[5]-F_9[5])*4+(F_8[6]-F_9[6])*6+(F_8[7]-F_9[7])*4+(F_8[9]-F_9[9])*8+(F_8[10]-F_9[10])*6+(F_8[11]-F_9[11])*10+(F_8[12]-F_9[12])*4+(F_8[13]-F_9[13])*10+(F_8[2]-F_9[2])*2)$$

$$F_9[9]=F_8[9]+(F_8[1]*x_{et})^2*0,027/4$$

$$F_9[10]=F_8[10]+(F_8[1]*x_{et})^2*0/3$$

$$F_9[11]=F_8[11]+(F_8[1]*x_{et})^2*0,007/4$$

$$F_9[12]=F_8[12]+(F_8[1]*x_{et})^2*0,08/2$$

$$F_9[13]=F_8[13]+(F_8[1]*x_{et})^2*0,004/4$$

$$F_9=\text{sum}(F_9[i];i=1;13)$$

$$F_8=\text{sum}(F_8[i];i=1;13)$$

{ya}

{Comprobación}

$$C_8=F_8[1]*2+F_8[2]*0+F_8[3]*4+F_8[4]*4+F_8[5]*2+F_8[6]*3+F_8[7]*2+F_8[8]*0+F_8[9]*4+F_8[10]*3+F_8[11]*4+F_8[12]*2+F_8[13]*4$$

$$C_9=F_9[1]*2+F_9[2]*0+F_9[3]*4+F_9[4]*4+F_9[5]*2+F_9[6]*3+F_9[7]*2+F_9[8]*0+F_9[9]*4+F_9[10]*3+F_9[11]*4+F_9[12]*2+F_9[13]*4$$

$$H_8=F_8[1]*6+F_8[2]*2+F_8[3]*6+F_8[4]*8+F_8[5]*4+F_8[6]*6+F_8[7]*4+F_8[8]*2+F_8[9]*8+F_8[10]*6+F_8[11]*10+F_8[12]*4+F_8[13]*10$$

$$H_9=F_9[1]*6+F_9[2]*2+F_9[3]*6+F_9[4]*8+F_9[5]*4+F_9[6]*6+F_9[7]*4+F_9[8]*2+F_9[9]*8+F_9[10]*6+F_9[11]*10+F_9[12]*4+F_9[13]*10$$

$$O_8=F_8[1]*1+F_8[2]*1+F_8[3]*0+F_8[4]*0+F_8[5]*0+F_8[6]*0+F_8[7]*1+F_8[8]*0+F_8[9]*1+F_8[10]*1+F_8[11]*1+F_8[12]*2+F_8[13]*1$$

$$O_9=F_9[1]*1+F_9[2]*1+F_9[3]*0+F_9[4]*0+F_9[5]*0+F_9[6]*0+F_9[7]*1+F_9[8]*0+F_9[9]*1+F_9[10]*1+F_9[11]*1+F_9[12]*2+F_9[13]*1$$

{ya}

$$\text{Yield}[1]=F_9[1]/F_8$$

$$\text{Yield}[2]=F_9[2]/F_8$$

$$\text{Yield}[3]=F_9[3]/F_8$$

$$\text{Yield}[4]=F_9[4]/F_8$$

$$\text{Yield}[5]=F_9[5]/F_8$$

$$\text{Yield}[6]=F_9[6]/F_8$$

$$\text{Yield}[7]=F_9[7]/F_8$$

$$\text{Yield}[8]=F_9[8]/F_8$$

$$\text{Yield}[9]=F_9[9]/F_8$$

$$\text{Yield}[10]=F_9[10]/F_8$$

$$\text{Yield}[11]=F_9[11]/F_8$$

$$\text{Yield}[12]=F_9[12]/F_8$$

$$\text{Yield}[13]=F_9[13]/F_8$$

{Flash 1}

$$F_10[1]=F_9[1]*0,9$$

$$F_10[2]=F_9[2]*0,4$$

$$F_10[3]=F_9[3]*1$$

$$F_10[4]=F_9[4]*1$$

$$F_10[5]=F_9[5]*1$$

$$F_10[6]=F_9[6]*1$$

$$F_10[7]=F_9[7]*1$$

$$F_10[8]=F_9[8]*1$$

$$F_10[9]=F_9[9]*0,9$$

$$F_10[10]=F_9[10]*0,95$$

$$F_10[11]=F_9[11]*0,99$$

$$F_10[12]=F_9[12]*0,1$$

$$F_10[13]=F_9[13]*0,1$$

$$F_11[1]=F_9[1]-F_10[1]$$

$$F_11[2]=F_9[2]-F_10[2]$$

$$F_11[3]=F_9[3]-F_10[3]$$

$$F_11[4]=F_9[4]-F_10[4]$$

$$F_11[5]=F_9[5]-F_10[5]$$

$$F_11[6]=F_9[6]-F_10[6]$$

$$F_11[7]=F_9[7]-F_10[7]$$

$$F_11[8]=F_9[8]-F_10[8]$$

$F_{11}[9]=F_9[9]-F_{10}[9]$
 $F_{11}[10]=F_9[10]-F_{10}[10]$
 $F_{11}[11]=F_9[11]-F_{10}[11]$
 $F_{11}[12]=F_9[12]-F_{10}[12]$
 $F_{11}[13]=F_9[13]-F_{10}[13]$

{Flash 2}

$F_{12}[1]=F_{10}[1]*0,7$
 $F_{12}[2]=F_{10}[2]*0,3$
 $F_{12}[3]=F_{10}[3]*1$
 $F_{12}[4]=F_{10}[4]*1$
 $F_{12}[5]=F_{10}[5]*1$
 $F_{12}[6]=F_{10}[6]*1$
 $F_{12}[7]=F_{10}[7]*1$
 $F_{12}[8]=F_{10}[8]*1$
 $F_{12}[9]=F_{10}[9]*0,8$
 $F_{12}[10]=F_{10}[10]*0,7$
 $F_{12}[11]=F_{10}[11]*0,85$
 $F_{12}[12]=F_{10}[12]*0$
 $F_{12}[13]=F_{10}[13]*0$

$F_{13}[1]=F_{10}[1]-F_{12}[1]$
 $F_{13}[2]=F_{10}[2]-F_{12}[2]$
 $F_{13}[3]=F_{10}[3]-F_{12}[3]$
 $F_{13}[4]=F_{10}[4]-F_{12}[4]$
 $F_{13}[5]=F_{10}[5]-F_{12}[5]$
 $F_{13}[6]=F_{10}[6]-F_{12}[6]$
 $F_{13}[7]=F_{10}[7]-F_{12}[7]$
 $F_{13}[8]=F_{10}[8]-F_{12}[8]$
 $F_{13}[9]=F_{10}[9]-F_{12}[9]$
 $F_{13}[10]=F_{10}[10]-F_{12}[10]$
 $F_{13}[11]=F_{10}[11]-F_{12}[11]$
 $F_{13}[12]=F_{10}[12]-F_{12}[12]$
 $F_{13}[13]=F_{10}[13]-F_{12}[13]$

· BALANCE DE MATERIA PRELIMINAR PLANTA DE CATALIDOR DE Hf:Zn

	F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9
Etanol	107,2	326,7	37,85	289,4	0,2894	289,1	219,5	107,1	0,857
Agua	13,25	37,03	18,79	31,35	0	31,35	23,78	26,3	109,3
1,3-Butadieno	0	0	6,769	30,96	30,92	0,03096	0	0	37,72
Butenos	0	0	0	2,019	1,898	0,1211	0	0	2,019
Etileno	0	0	6,046	0,1175	0,1175	0	0	0	6,163
Propileno	0	0	2,45	0,09995	0,09995	0	0	0	2,55
Acetaldehído	0	0,0021	0	4,253	1,489	2,765	0,0021	0,00066	4,251
Hidrógeno	0	0	60,37	0,04439	0,04439	0	0	0	60,41
Butanal	0	3,624	0	5,481	0	5,481	3,624	1,144	2,579
Acetona	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	0	0,02413	0,1639	0,3175	0,2858	0,03175	0,02413	0,1715	0,5435
Pesados	0	0	0	0	0	0	0	0	8,501
Butanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0,2125

	F10	F11	F12	F13	F14	F15	F16	F17	F18
Etanol	0,7713	0,0857	0,5399	0,2314	0,03785	37,81	288,8	69,31	0,2891
Agua	43,72	65,58	13,12	30,6	0	18,79	31,29	7,51	0,06271
1,3-Butadieno	37,72	0	37,72	0	6,769	0	0	0	0,03096
Butenos	2,019	0	2,019	0	0	0	0	0	0,1211
Etileno	6,163	0	6,163	0	6,046	0	0	0	0
Propileno	2,55	0	2,55	0	2,45	0	0	0	0
Acetaldehído	4,251	0	4,251	0	0	0	0,00277	0,00066	2,762
Hidrógeno	60,41	0	60,41	0	60,37	0	0	0	0
Butanal	2,321	0,2579	1,857	0,4642	0	0	4,768	1,144	0,7125
Acetona	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	0,538	0,0054	0,4573	0,0807	0	0,1639	0,03175	0,00762	0
Pesados	0,8501	7,651	0	0,8501	0	0	0	0	0
Butanol	0,02125	0,1913	0	0,02125	0	0	0	0	0

PLANTA DE BUTADIENO CON CATALIZADOR DE Y:Zn

Debido a la sencillez de esta planta, no se presenta balance de materia preliminar

· Código:

{ 1: Etanol 2: Agua 3: -Butadieno 4: Etileno 5: Propileno 6: Hidrógeno}

$$F_{2[1]}=107,2$$

$$F_{2[2]}=F_{2[1]}*(1-0,89)/0,89$$

$$F_{2[3]}=0$$

$$F_{2[4]}=0$$

$$F_{2[5]}=0$$

$$F_{2[6]}=0$$

$$F_2=\sum(F_{2[i]};i=1;6)$$

{Balance Atómico}

$$x_{et}=1$$

$$F_{3[1]}=F_{2[1]}*(1-x_{et})$$

$$F_{3[2]}*1=F_{2[2]}*1+(F_{2[1]}-F_{3[1]})*1+(F_{2[3]}-F_{3[3]})*0+(F_{2[4]}-F_{3[4]})*0+(F_{2[5]}-F_{3[5]})*0+(F_{2[6]}-F_{3[6]})*0$$

$$F_{3[3]}=F_{2[3]}+(F_{2[1]}*x_{et})^2*0,75/4$$

$$F_{3[4]}=F_{2[4]}+(F_{2[1]}*x_{et})^2*0,17/4$$

$$F_{3[5]}=F_{2[5]}+(F_{2[1]}*x_{et})^2*0,08/2$$

$$F_{3[6]}*2=F_{2[6]}*2+(F_{2[1]}-F_{3[1]})*6+(F_{2[3]}-F_{3[3]})*6+(F_{2[4]}-F_{3[4]})*4+(F_{2[5]}-F_{3[5]})*6+(F_{2[2]}-F_{3[2]})*2$$

$$F_3=\sum(F_{3[i]};i=1;6)$$

$$C_2=F_{2[1]}*2+F_{2[2]}*0+F_{2[3]}*4+F_{2[4]}*2+F_{2[5]}*3+F_{2[6]}*0$$

$$C_3=F_{3[1]}*2+F_{3[2]}*0+F_{3[3]}*4+F_{3[4]}*4+F_{3[5]}*2+F_{3[6]}*0$$

$$H_2=F_{2[1]}*6+F_{2[2]}*2+F_{2[3]}*6+F_{2[4]}*4+F_{2[5]}*6+F_{2[6]}*2$$

$$H_3=F_{3[1]}*6+F_{3[2]}*2+F_{3[3]}*6+F_{3[4]}*4+F_{3[5]}*6+F_{3[6]}*2$$

$$O_2=F_{2[1]}*1+F_{2[2]}*1+F_{2[3]}*0+F_{2[4]}*0+F_{2[5]}*0+F_{2[6]}*0$$

$$O_3=F_{3[1]}*1+F_{3[2]}*1+F_{3[3]}*0+F_{3[4]}*0+F_{3[5]}*0+F_{3[6]}*0$$

{ya}

$$\text{Yield}_{[1]} = F_{3[1]} / F_2$$

$$\text{Yield}_{[2]} = F_{3[2]} / F_2$$

$$\text{Yield}_{[3]} = F_{3[3]} / F_2$$

$$\text{Yield}_{[4]} = F_{3[4]} / F_2$$

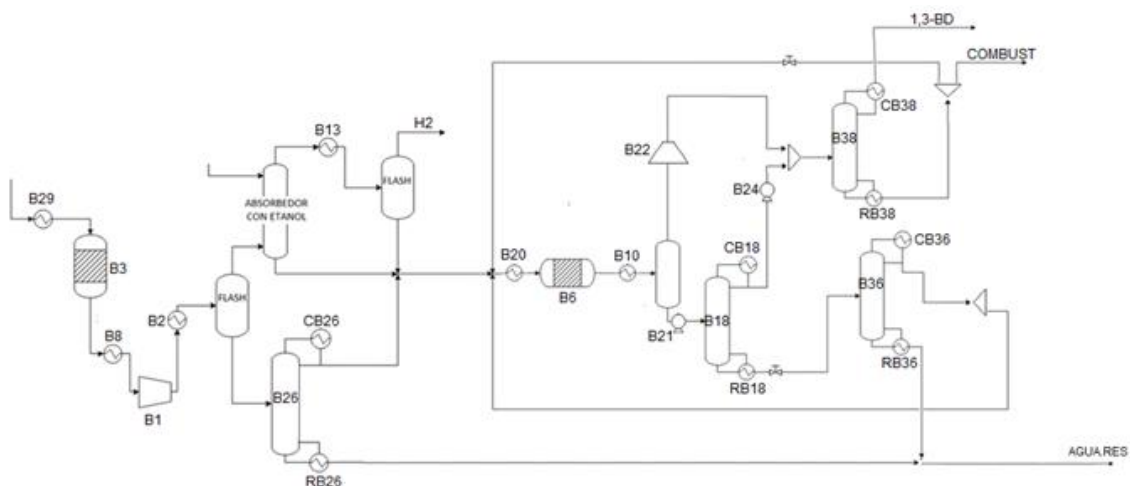
$$\text{Yield}_{[5]} = F_{3[5]} / F_2$$

$$\text{Yield}_{[6]} = F_{3[6]} / F_2$$

ANEXO VI : Resultados de la búsqueda del punto nominal y optimización de los procesos

1) ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PARA LA BÚSQUEDA DEL PUNTO NOMINAL DE OPERACIÓN

PLANTA DE CATALIZADOR DE Ta2O3



· Resultado del Analisis.

RC Acetaldeh.	RC Etanol.	Venta Producto		Coste Catalizador		Combustible
		F13BD (kmol/h)	FH2 (kmol/h)	FETB3 (kg/h)	FETB6 (kg/h)	FCOMB (kmol/h)
0,4	1	31,1177271	64,177196	3514,31446	4922,78986	26,1313165
0,43142857	1	31,5204397	63,6432217	3485,09137	4988,02364	25,2344609
0,46285714	1	31,9087374	63,4300215	3473,42307	5037,8272	24,2984649
0,49428571	1	32,3248069	62,9426989	3446,75278	5102,26889	23,4370655
0,52571429	1	32,7499361	62,4748792	3421,15005	5167,01779	22,4467042
0,55714286	1	33,1790424	62,0322081	3396,92287	5230,5112	21,4259523
0,58857143	1	33,6526335	61,1892325	3350,78922	5316,77098	20,3638805
0,62	1	34,1119872	60,6667192	3322,1937	5387,46543	19,2909496
0,65142857	1	34,5751979	60,2140097	3297,41797	5455,36582	18,1842318
0,68285714	1	35,0569039	59,7049487	3269,55807	5527,97943	17,0857894
0,71428571	1	35,5539402	59,0810419	3235,4136	5606,75787	15,9101834
0,74571429	1	36,0323835	58,8851756	3224,69402	5664,97269	14,6933101
0,77714286	1	36,5985009	57,7275453	3161,34002	5774,89671	13,4674238
0,80857143	1	37,1039474	57,4820644	3147,90552	5837,83331	12,1729664
0,84	1	37,6489943	56,9905805	3121,00835	5916,62742	10,8547737
0,86	1	38,006424	56,5307641	3095,84362	5973,45611	9,97767111

RC Acetaldeh.	RC Etanol.	Gases de Combustión			
		QB29 (kW)	QB3 (kW)	QB20 (kW)	QB6 (kW)
0,4	1	1467,27309	1140,84219	3492,68963	344,012599
0,43142857	1	1455,07206	1131,35558	3538,70951	349,358352
0,46285714	1	1450,20039	1127,56773	3583,43673	350,403547
0,49428571	1	1439,06519	1118,90983	3633,30612	354,965325
0,52571429	1	1428,37571	1110,59849	3684,55754	359,295597
0,55714286	1	1418,26054	1102,73368	3737,63658	363,095639
0,58857143	1	1398,99912	1087,75744	3797,28558	372,278918
0,62	1	1387,06012	1078,47456	3857,8239	377,186457
0,65142857	1	1376,71592	1070,43168	3921,76571	381,092091
0,68285714	1	1365,08404	1061,3876	3989,99599	385,770546
0,71428571	1	1350,82827	1050,30337	4067,01048	391,791581
0,74571429	1	1346,3527	1046,82351	4150,23252	392,2142
0,77714286	1	1319,90156	1026,25707	4253,63796	405,242139
0,80857143	1	1314,29248	1021,89587	4367,70751	406,037367
0,84	1	1303,06255	1013,16431	4514,38224	410,428268
0,86	1	1292,55594	1004,99516	4732,60539	424,820232

RC Acetaldeh.	RC Etanol.	Agua de Refrigeración						
		QB8 (kW)	QB2 (kW)	QB10 (kW)	QCB26 (kW)	QCB18 (kW)	QCB36 (kW)	QCB38 (kW)
0,4	1	-451,84	-479,48	-3600,92	383,26	512,08	1783,64	932,04
0,43142857	1	-448,09	-475,49	-3653,34	380,07	520,20	1797,39	949,24
0,46285714	1	-446,59	-473,90	-3704,77	378,80	528,47	1809,36	968,68
0,49428571	1	-443,16	-470,26	-3760,22	375,89	537,38	1822,76	986,18
0,52571429	1	-439,86	-466,77	-3818,32	373,10	546,77	1834,97	1016,50
0,55714286	1	-436,75	-463,47	-3878,39	370,46	556,66	1846,18	1051,55
0,58857143	1	-430,82	-457,17	-3945,45	365,43	567,57	1858,97	1103,43
0,62	1	-427,14	-453,27	-4013,22	362,31	579,11	1869,07	1152,75
0,65142857	1	-423,96	-449,89	-4084,44	359,61	591,66	1877,32	1214,13
0,68285714	1	-420,37	-446,09	-4162,19	356,57	605,69	1883,86	1233,88
0,71428571	1	-415,98	-441,43	-4246,40	352,84	621,55	1889,22	1377,43

0,74571429	1	-414,61	-439,97	-4338,41	351,67	639,82	1886,99	1557,82
0,77714286	1	-406,46	-431,32	-4449,08	344,77	662,29	1888,14	1874,92
0,80857143	1	-404,73	-429,49	-4570,12	343,30	691,06	1878,82	2303,37
0,84	1	-401,27	-425,82	-4724,75	340,37	731,03	1862,89	2910,09
0,86	1	-398,04	-422,39	-4847,80	357,62	786,85	1859,50	3316,32

RC Acetaldeh.	RCç Etanol.	LPS				Refrigerante (-13 °C)
		QRB26 KW	QRB18 KW	QRB36 KW	QRB38 KW	QB13 KW
0,4	1	396,43	830,09	1695,97	853,41	-466,35
0,43142857	1	393,13	842,51	1708,52	868,08	-461,60
0,46285714	1	391,81	854,95	1719,32	885,01	-459,59
0,49428571	1	388,80	868,30	1731,47	896,02	-455,11
0,52571429	1	385,92	882,33	1742,38	923,89	-450,77
0,55714286	1	383,18	896,95	1752,25	956,32	-446,50
0,58857143	1	377,98	913,13	1763,57	1004,99	-438,46
0,62	1	374,75	929,87	1772,19	1051,41	-433,40
0,65142857	1	371,96	947,76	1778,91	1109,75	-428,91
0,68285714	1	368,82	967,52	1783,80	1128,62	-423,77
0,71428571	1	364,97	989,41	1787,39	1266,19	-417,49
0,74571429	1	363,76	1014,05	1783,26	1442,98	-415,45
0,77714286	1	356,61	1044,04	1782,17	1753,87	-403,45
0,80857143	1	355,09	1080,39	1770,42	2179,07	-400,88
0,84	1	352,06	1129,67	1751,42	2781,42	-395,65
0,86	1	349,22	1172,53	1735,55	3088,19	-390,77

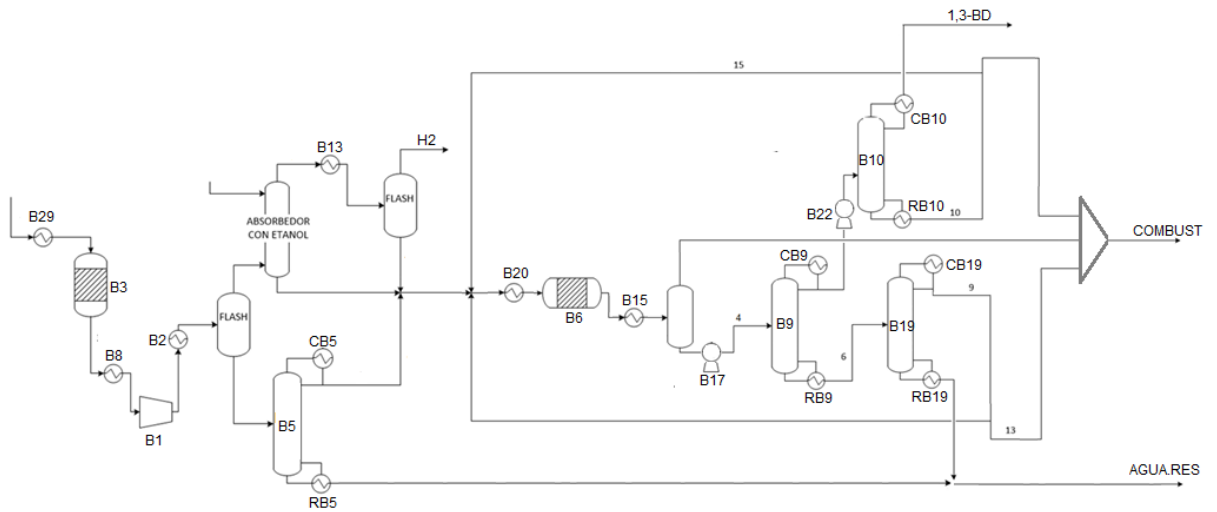
RC Acetaldeh.	RC Etanol.	Electricidad				Agua Residual
		EB1 (kW)	EB22 (kW)	EB21 (kW)	EB24 (kW)	FAGUARES (kg/s)
0,4	1	106,963	77,949	0,768	0,502	0,49794086
0,43142857	1	106,073	79,167	0,775	0,511	0,50333823
0,46285714	1	105,718	80,370	0,782	0,520	0,50863531
0,49428571	1	104,906	81,688	0,789	0,530	0,51410357
0,52571429	1	104,127	83,062	0,797	0,541	0,51982879

0,55714286	1	103,390	84,492	0,806	0,552	0,52560672
0,58857143	1	101,985	86,104	0,815	0,565	0,5318412
0,62	1	101,115	87,740	0,824	0,579	0,53799786
0,65142857	1	100,361	89,470	0,834	0,594	0,54420395
0,68285714	1	99,513	91,361	0,845	0,612	0,55071832
0,71428571	1	98,474	93,430	0,858	0,632	0,5572212
0,74571429	1	98,148	95,602	0,872	0,656	0,56418733
0,77714286	1	96,219	98,299	0,889	0,686	0,57147089
0,80857143	1	95,810	101,071	0,909	0,725	0,57797043
0,84	1	94,992	104,339	0,936	0,780	0,58485884
0,86	1	94,226	106,657	0,959	0,828	0,58865102

· Ingresos vs Gastos.

RC Acetaldeh.	INGRESOS (\$/h)			COSTES DE SERVICIOS (\$/h)					
	Venta 13BD	Venta H2	Quema Comb.	Gases Comb.	Agua Refrig.	LPS	Refrig. -13 °C	Electric.	Agua Resid.
0,4	3096,21	302,92	374,14	406,02	52,77	114,73	5,759	21,06	22,40
0,4314	3136,28	300,40	361,30	407,89	53,29	115,83	5,700	21,10	22,51
0,4629	3174,92	299,39	347,90	410,23	53,85	117,01	5,675	21,20	22,62
0,4943	3216,32	297,09	335,56	412,41	54,41	118,03	5,620	21,26	22,72
0,5257	3258,62	294,88	321,38	414,72	55,06	119,55	5,566	21,32	22,84
0,5571	3301,31	292,79	306,77	417,17	55,75	121,19	5,513	21,41	22,95
0,5886	3348,44	288,81	291,56	419,35	56,56	123,35	5,414	21,43	23,07
0,62	3394,14	286,35	276,20	422,13	57,39	125,43	5,352	21,52	23,19
0,6514	3440,23	284,21	260,36	425,25	58,33	127,87	5,296	21,63	23,31
0,6829	3488,16	281,81	244,63	428,54	59,02	129,09	5,233	21,76	23,43
0,7143	3537,62	278,86	227,80	432,18	60,55	133,93	5,155	21,88	23,56
0,7457	3585,22	277,94	210,37	436,94	62,40	139,89	5,130	22,09	23,69
0,7771	3641,55	272,47	192,82	441,32	65,17	150,00	4,982	22,18	23,83
0,8086	3691,84	271,32	174,29	447,93	68,82	163,62	4,950	22,45	23,95
0,84	3746,07	269,00	155,42	456,19	73,85	182,75	4,885	22,74	24,08
0,86	3781,64	266,83	142,86	469,66	77,69	192,80	4,825	22,92	24,15

PLANTA DE CATALIZADOR DE ZrO2



· Resultado del Analisis.

RC Acetaldeh.	RC Etanol	Venta Producto		Coste Catalizador		Combustible
		F13BD (kmol/h)	FH2 (kmol/h)	FETB3 (kg/h)	FETB6 (kg/h)	FCOMB (kmol/h)
0,5	0,99	31,112	64,833	3544,895	11455,136	28,087
0,5459	0,99	31,783	63,905	3494,201	11697,719	26,934
0,5688	0,99	32,077	63,783	3487,532	11789,487	26,297
0,6147	0,99	32,800	62,668	3426,582	12058,376	25,092
0,6376	0,99	33,129	62,348	3409,119	12171,115	24,442
0,6606	0,99	33,489	61,943	3386,961	12293,898	23,769
0,6835	0,99	33,829	61,674	3372,270	12407,322	23,083
0,7065	0,99	34,249	60,916	3330,872	12567,364	22,424
0,7294	0,99	34,591	60,752	3321,884	12674,334	21,693
0,7753	0,99	35,422	59,553	3256,378	12971,629	20,240
0,7982	0,99	35,805	59,310	3243,081	13091,184	19,452
0,8212	0,99	36,234	58,815	3216,034	13235,263	18,659
0,8441	0,99	36,672	58,381	3192,309	13376,350	17,833
0,8671	0,99	37,148	57,850	3163,290	13531,526	16,985

RC Acetaldeh.	RC Etanol	Gases de Combustión			
		QB29 (kW)	QB3 (kW)	QB20 (kW)	QB6 (kW)
0,5	0,99	1482,2623	1152,49668	5993,82487	360,585729
0,54588235	0,99	1461,06519	1136,01539	6118,99711	369,818897
0,56882353	0,99	1458,27634	1133,84699	6173,17239	369,859894
0,61470588	0,99	1432,79071	1114,03126	6311,61219	381,470606
0,63764706	0,99	1425,4887	1108,35376	6375,1323	383,947688
0,66058824	0,99	1416,22369	1101,14998	6442,99528	387,582611
0,68352941	0,99	1410,08075	1096,37369	6509,48136	389,443512
0,70647059	0,99	1392,77072	1082,9147	6591,97092	397,809283
0,72941177	0,99	1389,01254	1079,99262	6659,78016	398,231113
0,77529412	0,99	1361,62183	1058,69564	6827,15427	410,476139
0,79823529	0,99	1356,06175	1054,37254	6906,6121	411,813509
0,82117647	0,99	1344,75239	1045,57922	6997,17313	416,495244
0,84411765	0,99	1334,83204	1037,8659	7092,07049	420,339639
0,86705882	0,99	1322,69807	1028,43143	7198,66026	425,628427

RC Acetald	RC Etanol	Agua de Refrigeración						
		QB8 (kW)	QB2 (kW)	QCB5 (kW)	QB15 (kW)	QCB9 (kW)	QCB19 (kW)	QCB10 (kW)
0,5	0,99	-456,46	-484,43	343,37	-6728,49	1186,43	7710,15	605,14
0,54588235	0,99	-449,93	-477,50	338,45	-6876,30	1214,60	7464,87	629,54
0,56882353	0,99	-449,07	-476,59	337,81	-6941,40	1226,42	7252,00	641,79
0,61470588	0,99	-441,22	-468,26	331,91	-7104,47	1258,57	6912,27	670,59
0,63764706	0,99	-438,98	-465,88	330,21	-7180,07	1273,27	6667,56	685,55
0,66058824	0,99	-436,12	-462,85	328,07	-7260,55	1289,76	6449,04	701,84
0,68352941	0,99	-434,23	-460,84	326,64	-7339,72	1306,14	6226,57	718,79
0,70647059	0,99	-428,90	-455,18	322,64	-7436,47	1327,44	6092,89	738,32
0,72941177	0,99	-427,74	-453,95	321,76	-7517,41	1345,39	5906,06	757,82
0,77529412	0,99	-419,31	-445,00	315,42	-7714,48	1393,66	5689,34	804,38
0,79823529	0,99	-417,60	-443,19	314,13	-7808,67	1419,29	5570,77	830,32
0,82117647	0,99	-414,11	-439,49	311,51	-7915,24	1450,90	5481,44	859,97
0,84411765	0,99	-411,06	-436,25	309,21	-8026,79	1488,20	5395,83	893,47
0,86705882	0,99	-407,32	-432,28	306,40	-8151,49	1535,32	5320,52	932,45

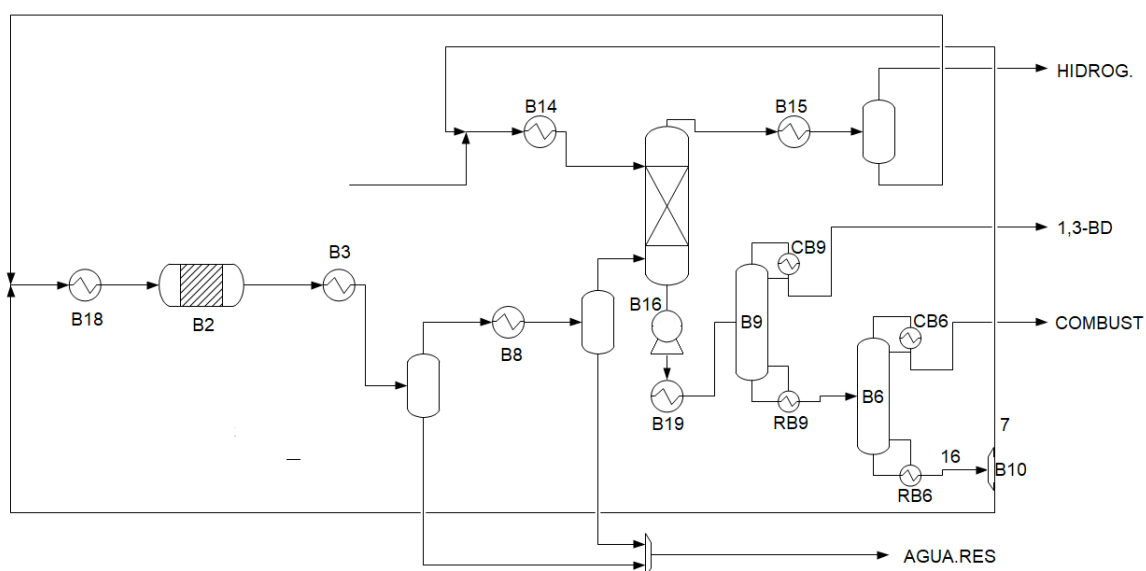
RC Acetaldeh.	RC Etanol	LPS				Refrig. (0 °C)
		QRB5 (kW)	QRB9 (kW)	QRB19 (kW)	QRB10 (kW)	QB13 (kW)
0,5	0,99	354,12	2046,69	7351,31	674,83	-389,67
0,54588235	0,99	349,06	2093,51	7098,33	701,05	-383,86
0,56882353	0,99	348,39	2113,48	6882,07	714,17	-383,10
0,61470588	0,99	342,30	2165,77	6533,90	745,03	-375,80
0,63764706	0,99	340,56	2189,61	6285,29	761,03	-373,65
0,66058824	0,99	338,35	2216,18	6062,64	778,43	-370,94
0,68352941	0,99	336,88	2242,06	5836,14	796,54	-369,06
0,70647059	0,99	332,74	2275,09	5697,54	817,41	-363,75
0,72941177	0,99	331,84	2302,63	5506,63	838,22	-362,59
0,77529412	0,99	325,30	2374,18	5280,10	887,94	-353,86
0,79823529	0,99	323,97	2410,53	5156,95	915,69	-352,09
0,82117647	0,99	321,27	2454,17	5062,53	947,40	-348,35
0,84411765	0,99	318,90	2503,68	4971,72	983,32	-345,05
0,86705882	0,99	316,00	2563,90	4890,76	1025,27	-340,96

RC Acetaldeh.	RC Etanol	Electricidad			Agua Residual
		EB1 (kW)	EB17 (kW)	EB22 (kW)	FAGUARES (kg/s)
0,5	0,99	108,076	2,366	0,916	0,48847525
0,54588235	0,99	106,530	2,406	0,927	0,49689709
0,56882353	0,99	106,327	2,424	0,933	0,50059537
0,61470588	0,99	104,469	2,468	0,946	0,50974184
0,63764706	0,99	103,936	2,489	0,952	0,51392494
0,66058824	0,99	103,261	2,512	0,959	0,51832288
0,68352941	0,99	102,813	2,534	0,966	0,52263403
0,70647059	0,99	101,551	2,560	0,975	0,52785794
0,72941177	0,99	101,277	2,583	0,983	0,53211966
0,77529412	0,99	99,280	2,639	1,002	0,54230628
0,79823529	0,99	98,874	2,666	1,013	0,54693159
0,82117647	0,99	98,050	2,698	1,026	0,55205425
0,84411765	0,99	97,326	2,731	1,040	0,55717896
0,86705882	0,99	96,442	2,769	1,058	0,56267969

· Ingresos vs Gastos.

RC Acetaldeh.	INGRESOS (\$/h)			COSTES DE SERVICIOS (\$/h)					
	Venta 13BD	Venta H2	Quema Combust.	Gases Combust.	Agua Refrig.	LPS	Refrig. 0 °C	Electric.	Agua Resid.
0,5	3095,59	306,01	460,94	566,32	113,49	316,81	3,65	12,60	22,21
0,546	3162,42	301,63	442,02	572,41	113,08	311,19	3,59	12,43	22,38
0,569	3191,69	301,06	431,56	575,51	112,27	305,61	3,59	12,41	22,46
0,615	3263,61	295,79	411,78	582,11	111,37	297,37	3,52	12,20	22,64
0,638	3296,38	294,28	401,11	585,45	110,43	290,97	3,50	12,15	22,72
0,661	3332,20	292,37	390,07	588,92	109,69	285,48	3,47	12,07	22,81
0,684	3366,03	291,10	378,81	592,54	108,95	279,89	3,45	12,03	22,89
0,706	3407,73	287,53	368,00	596,32	108,88	277,19	3,40	11,89	22,99
0,729	3441,77	286,75	356,00	600,20	108,41	272,83	3,39	11,86	23,08
0,775	3524,45	281,09	332,16	608,45	108,74	269,43	3,31	11,64	23,27
0,798	3562,60	279,94	319,22	612,92	108,89	267,60	3,30	11,60	23,36
0,821	3605,32	277,61	306,21	617,65	109,33	266,93	3,26	11,51	23,46
0,844	3648,87	275,56	292,65	622,76	109,91	266,70	3,23	11,44	23,56
0,867	3696,24	273,05	278,73	628,45	110,72	267,26	3,19	11,34	23,66

PLANTA DE CATALIZADOR DE Hf:Zn



· Resultado del Análisis.

T B14 (°C)	RC B10	Tref. B14 (°C)	PRODUCTO	
			13BD	HIDROGENO
20	0,77	17	35,7	59,39
10	0,71	7	35,724	59,5
5	0,678	2	35,7511	59,54
0	0,646	-3	35,79	59,58
-5	0,612	-8	35,82	59,68
-10	0,5785	-13	35,92	59,84
-20	0,508	-23	36,04	60,05

T B14 (°C)	RC B10	CW		
		QB3	QCB9	QCB6
20	0,77	5088,1	826,71	54,85
10	0,71	5088,1	759,98	52,911
5	0,678	5088,4	732,38	52,04
0	0,646	5088,6	709,84	51,29
-5	0,612	5094,13	689,01	51,61
-10	0,5785	5105,41	672,01	50,07
-20	0,508	5119,43	642,51	48,99

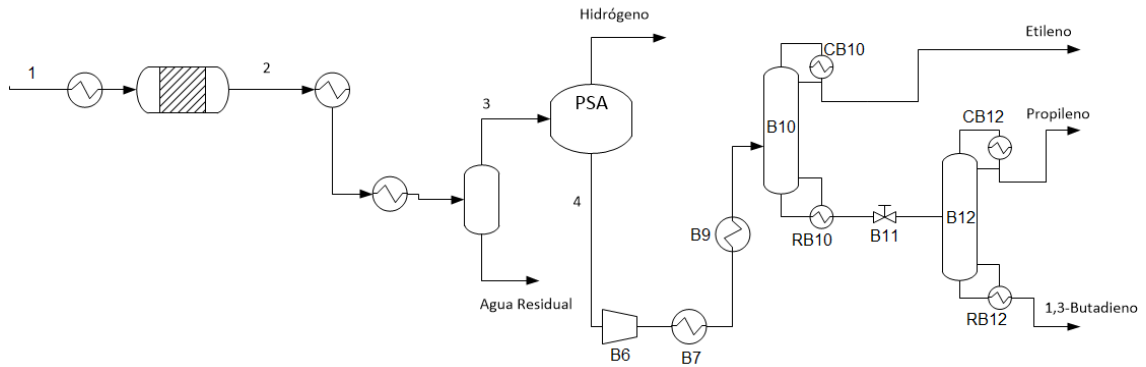
T B14 (°C)	RC B10	LPS		
		QRB9	QRB6	QB19
20	0,77	529,4	57,38	777,3
10	0,71	437,16	56,3	650,14
5	0,678	401,49	55,84	597,3
0	0,646	372,28	55,49	552,3
-5	0,612	347,28	55,21	511,09
-10	0,5785	326,22	55,06	475,61
-20	0,508	292,89	54,75	414,63

T B14 (°C)	RC B10	REFRIGERANTE			ELECTRIC
		QB8 (0°c)	QB15 (0°c)	QB14	EB16
20	0,77	138,3	58,95	793,34	1,5
10	0,71	138,8	24,98	721,8	1,293
5	0,678	139	13,58	687,5	1,21
0	0,646	139,24	4,15	658,2	1,14
-5	0,612	139,62	0	658,52	1,08
-10	0,5785	140,13	0	603	1,025
-20	0,508	140,85	0	555,9	0,936

T B14 (°C)	RC B10	GASES DE COMBUSTION		COMBUSTIBLE	AGUA.RESID
		QB18	QB2		
20	0,77	2479,51	3892,85	3,427	2418,96
10	0,71	2473,1	3898,99	3,29	2425,29
5	0,678	2470,88	3901,44	3,233	2428,07
0	0,646	2469,12	3903,54	3,186	2430,54
-5	0,612	2471,15	3910,1	3,145	2435,77
-10	0,5785	2476,45	3920,53	3,1138	2443,35
-20	0,508	2483,17	3934,08	3,057	2453,71

T _{B14} (°C)	RC B10	T _{ref.B14} (°C)	INGRESOS (\$/h)			COSTES DE SERVICIOS (\$/h)						
			Venta 13BD	Venta H2	COMB.	CW	LPS	REF. 0°C	REF. B14	GASES. COMB.	ELECTRIC.	AGUA RESID.
20	0,77	17	3552,15	280,32	70,10	38,68	41,45	1,95	5,52	401,46	0,17	70,10
10	0,71	7	3554,54	280,84	67,29	38,24	34,75	1,62	5,97	401,44	0,15	67,29
5	0,678	2	3557,23	281,03	66,13	38,06	32,04	1,51	6,22	401,46	0,14	66,13
0	0,646	-3	3561,11	281,22	65,17	37,91	29,78	1,42	6,52	401,48	0,13	65,17
-5	0,612	-8	3564,09	281,69	64,33	37,81	27,76	1,38	7,15	402,02	0,12	64,33
-10	0,579	-13	3574,04	282,44	63,69	37,76	26,04	1,39	7,20	403,01	0,12	63,69
-20	0,508	-23	3585,98	283,44	62,53	37,65	23,16	1,40	8,06	404,29	0,11	62,53

PLANTA DE CATALIZADOR DE Zn:Y



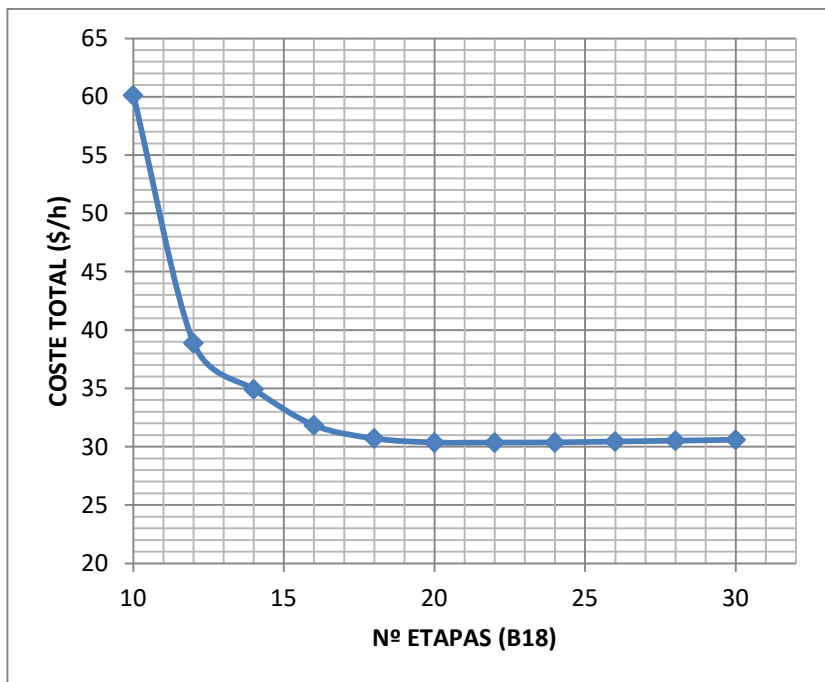
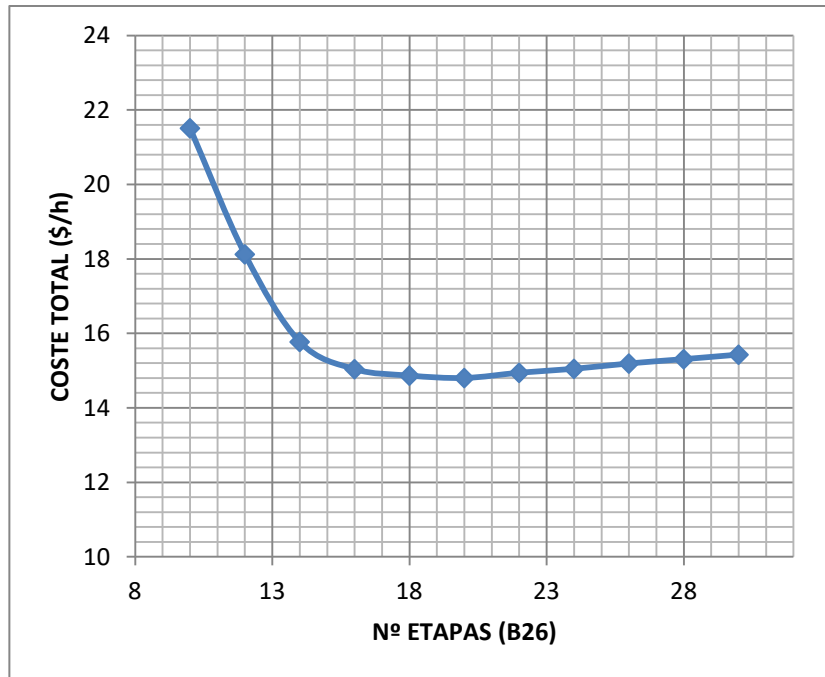
2) RESULTADOS DEL DISEÑO DE EQUIPOS

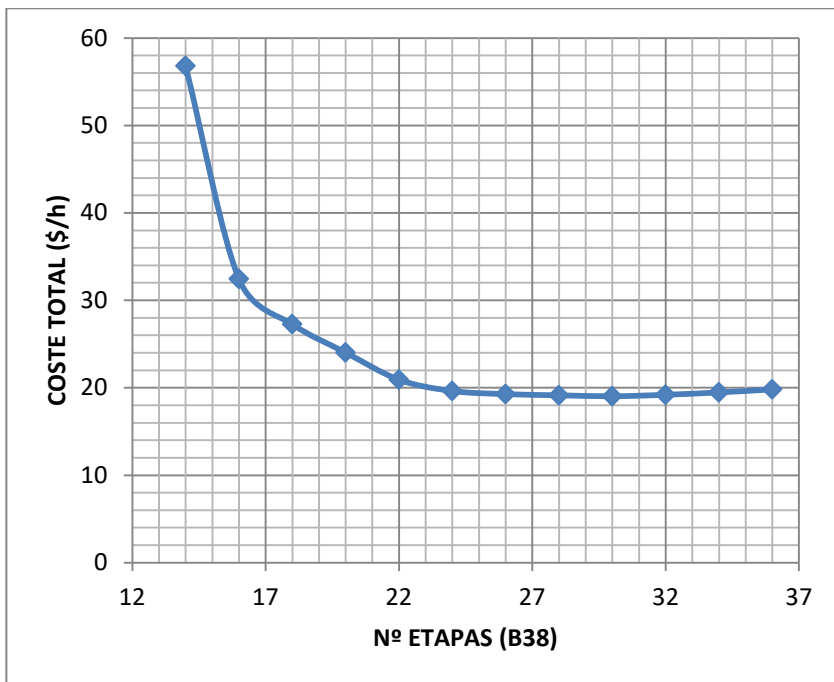
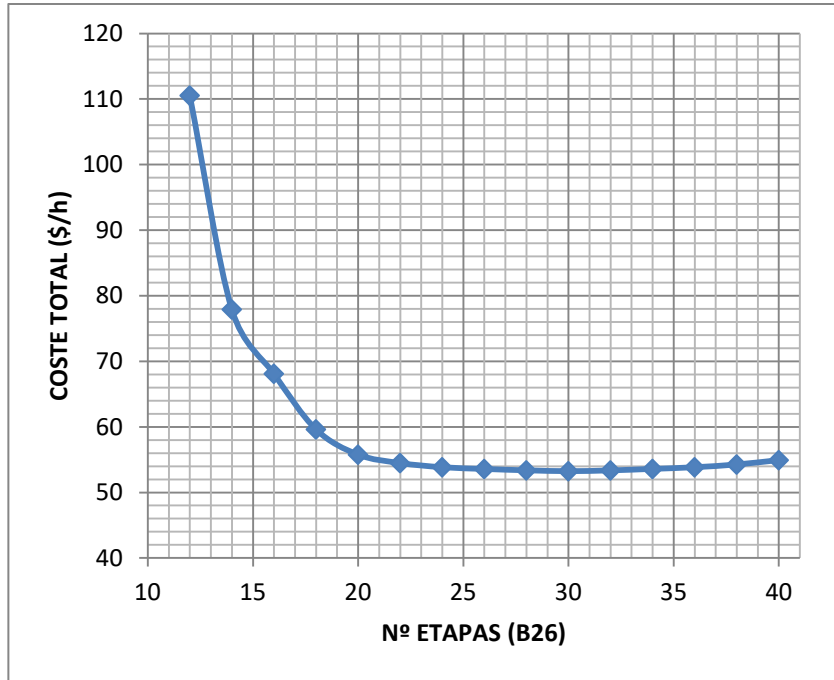
PLANTA DE CATALIZADOR DE Ta2O3

Nº COLUMNA	N	R	R _{MIN}	N _{MIN}	N _{RECTIFIC}	QC (kW)	QR (kW)	CAPEX (\$)
B26	10	1,217	0,333	7	6	536,47	548,29	165000
	12	0,824	0,333	7	7	441,97	453,79	176700
	14	0,548	0,333	7	8	375,77	387,59	187400
	16	0,459	0,333	7	10	354,38	366,20	194100
	18	0,428	0,333	7	11	346,56	358,38	207800
	20	0,410	0,333	7	12	342,06	353,88	220000
	22	0,398	0,333	7	13	339,03	350,85	250200
	24	0,390	0,333	7	14	336,81	348,63	272800
	26	0,383	0,333	7	16	335,10	346,92	297500
	28	0,378	0,333	7	17	333,74	345,56	317500
	30	0,374	0,333	7	18	332,62	344,44	337000
B18	10	2,512	0,232	8	4	1296,13	1649,78	192400
	12	0,965	0,232	8	5	722,31	1075,96	182500
	14	0,678	0,232	8	5	615,32	968,96	179900
	16	0,449	0,232	8	6	530,32	883,97	186400
	18	0,359	0,232	8	7	496,64	850,29	199500
	20	0,328	0,232	8	8	484,59	838,25	211300
	22	0,310	0,232	8	8	477,68	831,34	241100
	24	0,298	0,232	8	9	473,02	826,67	263200
	26	0,290	0,232	8	10	469,60	823,24	287600
	28	0,283	0,232	8	11	466,95	820,60	307200
	30	0,278	0,232	8	11	464,83	818,48	326600

B36	12	1,751	0,256	10	7	3011,18	2929,13	245000
	14	0,947	0,256	10	8	2130,21	2048,17	226600
	16	0,704	0,256	10	9	1863,12	1781,08	231800
	18	0,494	0,256	10	10	1633,10	1551,06	230600
	20	0,396	0,256	10	12	1525,62	1443,57	243900
	22	0,361	0,256	10	13	1487,90	1405,86	256400
	24	0,342	0,256	10	14	1466,76	1384,71	273600
	26	0,330	0,256	10	15	1452,68	1370,63	304200
	28	0,320	0,256	10	16	1442,40	1360,35	324400
	30	0,313	0,256	10	17	1434,50	1352,45	344100
	32	0,308	0,256	10	19	1428,19	1346,15	386200
	34	0,303	0,256	10	20	1423,02	1340,98	436200
	36	0,299	0,256	10	21	1418,70	1336,65	486000
	38	0,296	0,256	10	22	1415,02	1332,98	552600
40	0,293	0,256	10	23	1411,84	1329,80	646500	
B38	14	4,987	1,203	12	7	1614,15	1464,82	221500
	16	2,691	1,203	12	8	954,11	804,78	218100
	18	2,206	1,203	12	9	814,49	665,16	215100
	20	1,890	1,203	12	10	723,53	574,20	227900
	22	1,588	1,203	12	10	636,63	487,30	239700
	24	1,453	1,203	12	11	597,74	448,41	256300
	26	1,398	1,203	12	12	581,69	432,37	284900
	28	1,366	1,203	12	13	572,18	422,85	310900
	30	1,343	1,203	12	14	565,65	416,33	326600
	32	1,327	1,203	12	15	560,79	411,46	368100
	34	1,314	1,203	12	16	556,99	407,66	417600
	36	1,304	1,203	12	17	553,92	404,60	472000

Que gráficamente resulta:



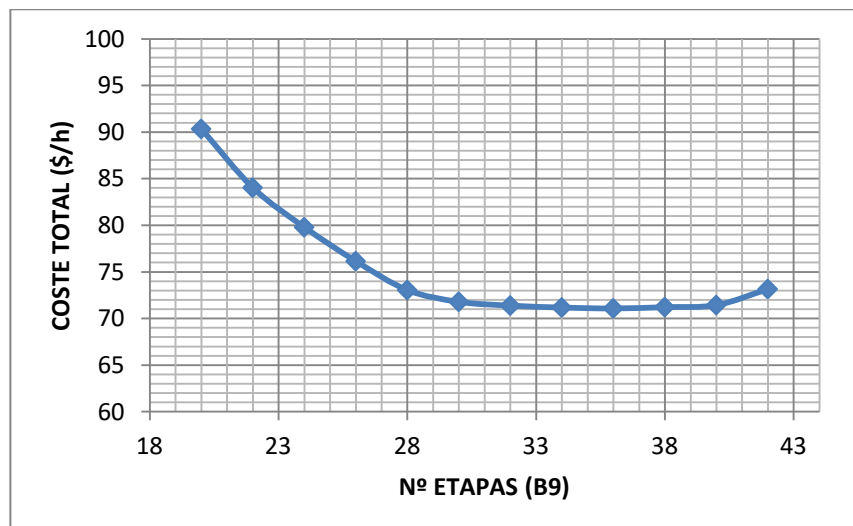
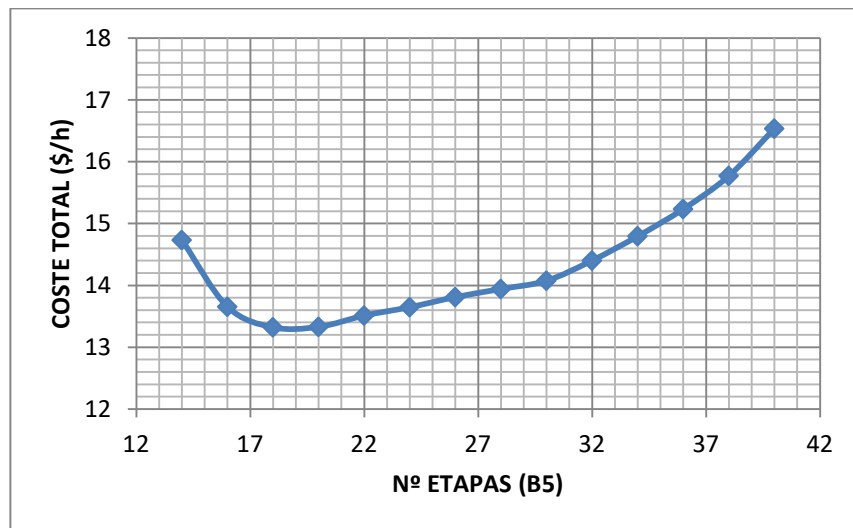


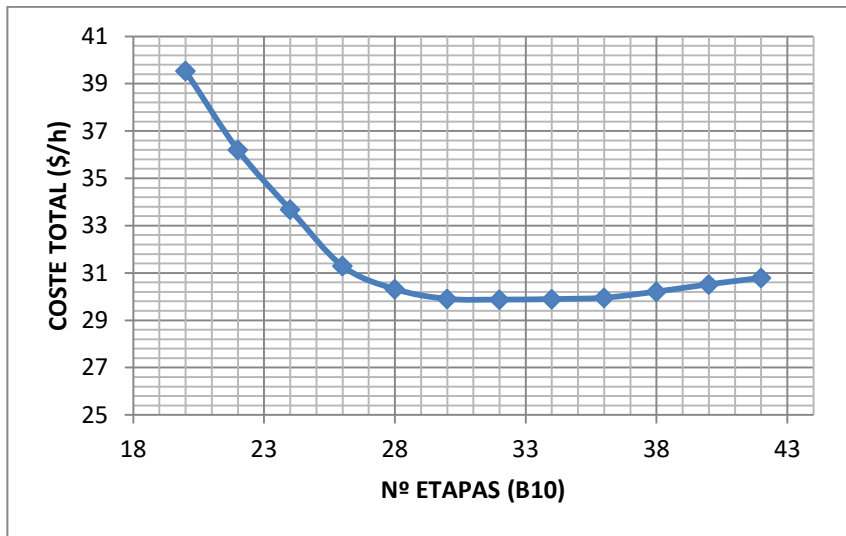
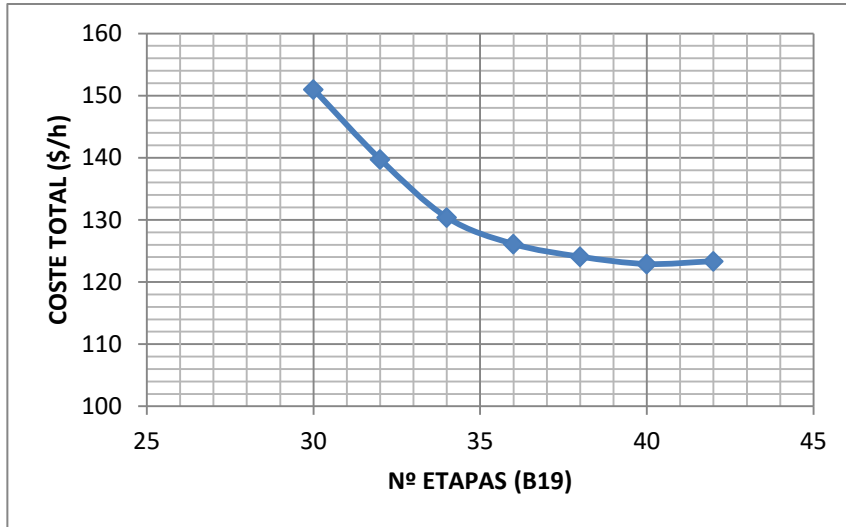
PLANTA DE CATALIZADOR DE ZrO2

Nº COLUMNA	N	R	R_{MIN}	N_{MIN}	N_{RECTIFIC}	QC (kW)	QR (kW)	CAPEX (\$)
B5	14	0,2412	0,1458	6	5	317,25	326,83	329700
	16	0,2174	0,1458	6	5	310,90	320,48	228400
	18	0,2037	0,1458	6	6	307,16	316,74	205000
	20	0,1946	0,1458	6	6	304,63	314,21	217100
	22	0,1880	0,1458	6	7	302,77	312,35	247200
	24	0,1829	0,1458	6	8	301,35	310,93	269800
	26	0,1789	0,1458	6	8	300,21	309,79	294400
	28	0,1757	0,1458	6	9	299,29	308,87	314200
	30	0,1730	0,1458	6	10	298,51	308,09	333700
	32	0,1707	0,1458	6	10	297,86	307,44	375700
	34	0,1688	0,1458	6	11	297,30	306,88	425400
	36	0,1671	0,1458	6	12	296,81	306,39	480300
	38	0,1657	0,1458	6	12	296,38	305,96	546500
	40	0,1644	0,1458	6	13	296,01	305,59	639900
B9	20	1,4929	0,4921	15	7	1542,42	2572,63	261300
	22	1,2151	0,4921	15	8	1369,03	2399,26	272000
	24	1,0326	0,4921	15	9	1255,08	2285,31	267100
	26	0,8633	0,4921	15	10	1149,63	2179,86	296300
	28	0,7185	0,4921	15	10	1059,62	2089,85	322800
	30	0,6584	0,4921	15	11	1021,96	2052,19	338500
	32	0,6279	0,4921	15	12	1002,65	2032,88	375000
	34	0,6083	0,4921	15	12	990,18	2020,41	405400
	36	0,5943	0,4921	15	13	981,17	2011,40	433500
	38	0,5836	0,4921	15	14	974,26	2004,49	481200
	40	0,5751	0,4921	15	15	968,72	1998,94	531700
	42	0,5681	0,4921	15	15	964,16	1994,39	757800
B19	30	0,3508	0,0164	18	16	4371,07	3940,61	352500
	32	0,2544	0,0164	18	17	4058,86	3628,40	383400
	34	0,1739	0,0164	18	18	3798,26	3367,80	414300
	36	0,1363	0,0164	18	19	3676,53	3246,07	439400
	38	0,1160	0,0164	18	20	3610,56	3180,10	487100
	40	0,1026	0,0164	18	21	3567,24	3136,78	537700
	42	0,0929	0,0164	18	22	3535,76	3105,30	730000

B10	20	3,3665	1,8140	14	9	937,73	1030,96	256200
	22	2,9554	1,8141	14	10	848,72	941,94	249900
	24	2,6209	1,8141	14	11	776,42	869,64	267100
	26	2,2956	1,8141	14	12	706,24	799,46	291100
	28	2,1454	1,8141	14	13	673,72	766,96	317600
	30	2,0779	1,8142	14	14	658,96	752,20	333300
	32	2,0367	1,8140	14	15	649,90	743,12	369800
	34	2,0082	1,8141	14	16	643,59	736,81	400100
	36	1,9868	1,8141	14	17	638,83	732,05	428200
	38	1,9700	1,8141	14	18	635,06	728,28	475800
	40	1,9563	1,8141	14	19	631,99	725,22	526200
	42	1,9450	1,8142	14	20	629,44	722,67	570300

Que gráficamente resulta:

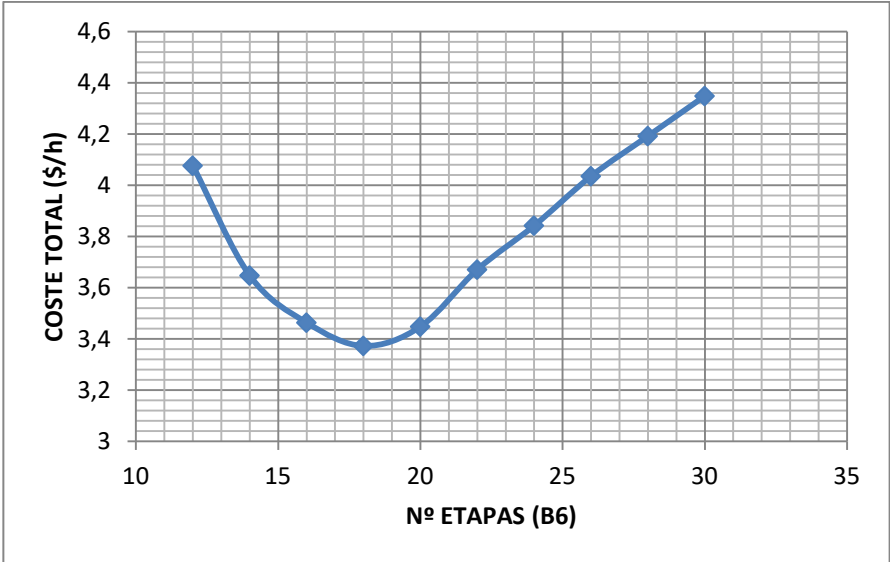
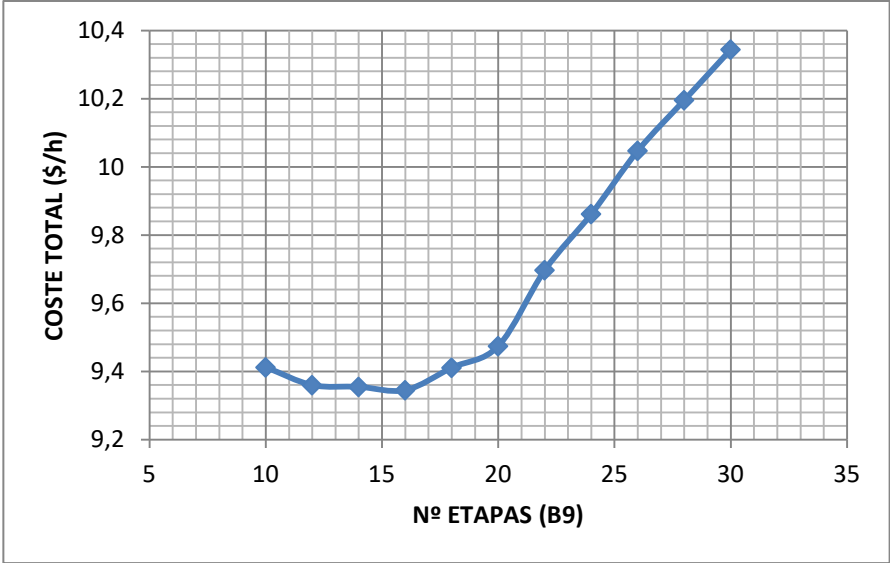




PLANTA DE CATALIZADOR DE Hf:Zn

Nº COLUMNA	N	R	R _{MIN}	N _{MIN}	N _{RECTIFIC}	QC (kW)	QR (kW)	CAPEX (\$)
B9	10	0,2648	0,2090	3	4	634,368	129,883	162600
	12	0,2516	0,2090	3	4	640,594	123,657	174200
	14	0,2434	0,2090	3	5	644,503	119,748	184800
	16	0,2378	0,2090	3	6	647,208	117,044	191400
	18	0,2337	0,2090	3	7	649,197	115,055	205000
	20	0,2306	0,2090	3	7	650,725	113,526	217000
	22	0,2281	0,2090	3	8	651,938	112,313	247200
	24	0,2261	0,2090	3	9	652,924	111,327	269800
	26	0,2244	0,2090	3	10	653,742	110,509	294400
	28	0,2230	0,2090	3	10	654,432	109,819	314200
30	0,2218	0,2090	3	11	655,022	109,229	333700	
B6	10	5,4482	0,4434	9	4	158,076	163,831	162600
	12	1,7175	0,4434	9	5	66,447	72,202	174200
	14	1,1479	0,4434	9	6	52,426	58,181	184800
	16	0,8849	0,4434	9	7	45,947	51,702	191400
	18	0,6594	0,4434	9	8	40,410	46,164	205000
	20	0,5858	0,4434	9	9	38,586	44,341	222100
	22	0,5544	0,4434	9	10	37,798	43,553	252300
	24	0,5355	0,4434	9	11	37,320	43,075	275000
	26	0,5226	0,4434	9	11	36,989	42,744	299600
	28	0,5130	0,4434	9	12	36,742	42,497	319500
30	0,5056	0,4434	9	13	36,549	42,304	339100	

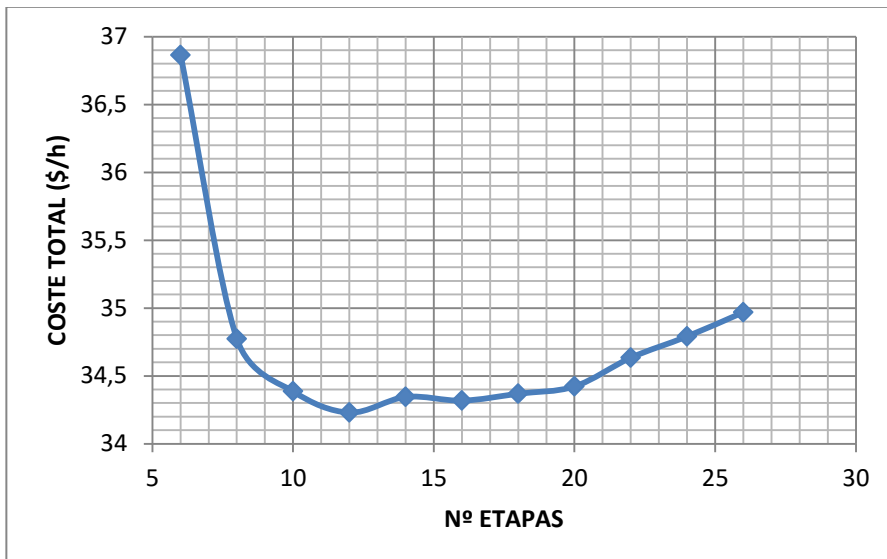
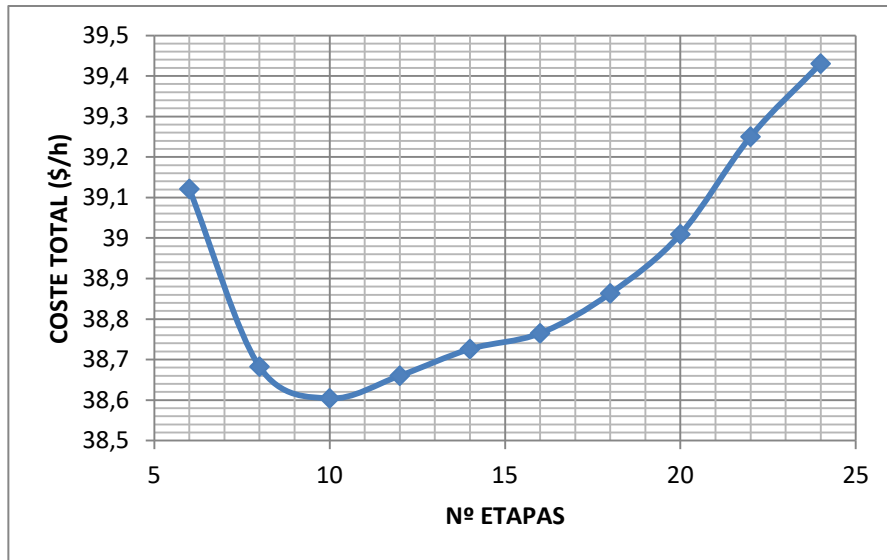
Que gráficamente resulta:



PLANTA DE CATALIZADOR DE Zn:Y

N° COLUMNA	N	R	R_{MIN}	N_{MIN}	N_{RECTIFIC}	QC (kW)	QR (kW)	CAPEX (\$)
B10	6	0,7334	0,1145	4	3	51,77	1239,06	136600
	8	0,3077	0,1145	4	4	38,29	1225,58	143600
	10	0,2031	0,1145	4	6	34,83	1222,13	149500
	12	0,1764	0,1145	4	7	33,82	1221,11	160700
	14	0,1626	0,1145	4	8	33,25	1220,54	171100
	16	0,1539	0,1145	4	9	32,88	1220,17	177400
	18	0,1478	0,1145	4	10	32,62	1219,91	190400
	20	0,1434	0,1145	4	11	32,41	1219,70	208800
	22	0,1399	0,1145	4	12	32,26	1219,55	238400
	24	0,1371	0,1145	4	13	32,13	1219,42	260600
B12	6	0,3382	0,1046	3	4	151,37	1143,68	136000
	8	0,1876	0,1046	3	5	92,94	1085,25	143600
	10	0,1599	0,1046	3	7	82,15	1074,46	145000
	12	0,1465	0,1046	3	8	76,89	1069,20	149500
	14	0,1383	0,1046	3	9	73,69	1065,99	177500
	16	0,1327	0,1046	3	10	71,50	1063,81	183900
	18	0,1287	0,1046	3	12	69,92	1062,22	197000
	20	0,1256	0,1046	3	13	68,71	1061,01	208800
	22	0,1232	0,1046	3	14	67,75	1060,06	238400
	24	0,1212	0,1046	3	16	66,98	1059,28	260600
	26	0,1196	0,1046	3	17	66,34	1058,64	284800

Que gráficamente resulta:



ANEXO VII : Balances de materia y energía completo de los procesos

En este caso, la numeración de las corrientes corresponden con las figuras 15, 17, 19 y 22 de los PFDs completos y definitivos de los 4 procesos.

Planta de catalizador de Ta₂O₃

Nº CORRIENTE	Units	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
De:		Exterior	E-101	E-102	H-101	R-101	E-102	E-103	C-101	E-101	F-101
Hasta:		E-101	E-102	H-101	R-101	E-102	E-103	C-101	E-101	F-101	T-101
Fase		L	L+V	L+V	V	V	V	V	V	L+V	L
Temperature	C	20	78,15	78,15	260	260	88,15	46,76	97,16	35	35
Pressure	bar	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	2,026	2,026	2,026
Fracción Vapor molar		0	0,3246	0,7225	1	1	1	1	1	0,7412	0
Fracción Líquido molar		1	0,6754	0,2775	0	0	0	0	0	0,2588	1
Densidad	kg/cum	812,3511	4,5755	2,06	0,9827	0,5678	0,8379	0,9463	1,6352	2,6474	796,7738
Entalpia de la corriente	Gcal/hr	-5,2202	-4,8432	-4,5498	-4,0667	-3,1698	-3,4632	-3,5250	-3,4493	-3,8263	-2,0692
Peso Molecular medio	kg/kmol	42,99	42,99	42,99	42,99	24,85	24,85	24,85	24,85	24,85	40,52
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/hr	78,3402	78,3402	78,3402	78,3402	135,5497	135,5497	135,5497	135,5497	135,5497	35,0770
ETANOL	kmol/hr	69,7463	69,7463	69,7463	69,7463	11,8802	11,8802	11,8802	11,8802	11,8802	10,1325
AGUA	kmol/hr	8,5939	8,5939	8,5939	8,5939	7,9055	7,9055	7,9055	7,9055	7,9055	6,8710
ACETALDE	kmol/hr	0	0	0	0	55,1611	55,1611	55,1611	55,1611	55,1611	16,5376
H2	kmol/hr	0	0	0	0	58,7062	58,7062	58,7062	58,7062	58,7062	0,0093
BUTANONA	kmol/hr	0	0	0	0	0,2030	0,2030	0,2030	0,2030	0,2030	0,1328
PESADOS	kmol/hr	0	0	0	0	1,0441	1,0441	1,0441	1,0441	1,0441	0,9929
ACETONA	kmol/hr	0	0	0	0	0,1566	0,1566	0,1566	0,1566	0,1566	0,0780
ACETATO	kmol/hr	0	0	0	0	0,4930	0,4930	0,4930	0,4930	0,4930	0,3231

13-BD	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1-BUTENO	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-BUTENO	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CROTONAL	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kmol/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR											
ETANOL		0,8903	0,8903	0,8903	0,8903	0,0876	0,0876	0,0876	0,0876	0,0876	0,2889
AGUA		0,1097	0,1097	0,1097	0,1097	0,0583	0,0583	0,0583	0,0583	0,0583	0,1959
ACETALDE		0	0	0	0	0,4069	0,4069	0,4069	0,4069	0,4069	0,4715
H2		0	0	0	0	0,4331	0,4331	0,4331	0,4331	0,4331	0,0003
BUTANONA		0	0	0	0	0,0015	0,0015	0,0015	0,0015	0,0015	0,0038
PESADOS		0	0	0	0	0,0077	0,0077	0,0077	0,0077	0,0077	0,0283
ACETONA		0	0	0	0	0,0012	0,0012	0,0012	0,0012	0,0012	0,0022
ACETATO		0	0	0	0	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,0092
13-BD		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1-BUTENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-BUTENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CROTONAL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

DEE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSIICO TOTAL	kg/hr	3367,965	3367,9651	3367,9651	3367,9651	3367,9651	3367,9651	3367,9651	3367,9651	3367,9651	1421,323
ETANOL	kg/hr	3213,143	3213,1432	3213,1432	3213,1432	547,3084	547,3084	547,3084	547,3084	547,3084	466,7939
AGUA	kg/hr	154,8218	154,8218	154,8218	154,8218	142,4201	142,4201	142,4201	142,4201	142,4201	123,7822
ACETALDE	kg/hr	0	0	0	0	2430,0229	2430,0229	2430,0229	2430,0229	2430,0229	728,5326
H2	kg/hr	0	0	0	0	118,3447	118,3447	118,3447	118,3447	118,3447	0,0187
BUTANONA	kg/hr	0	0	0	0	14,6368	14,6368	14,6368	14,6368	14,6368	9,5754
PESADOS	kg/hr	0	0	0	0	62,6984	62,6984	62,6984	62,6984	62,6984	59,6258
ACETONA	kg/hr	0	0	0	0	9,0952	9,0952	9,0952	9,0952	9,0952	4,5288
ACETATO	kg/hr	0	0	0	0	43,4387	43,4387	43,4387	43,4387	43,4387	28,4659
13-BD	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1-BUTENO	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-BUTENO	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CROTONAL	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MÁSIICA											
ETANOL		0,95403	0,9540	0,9540	0,9540	0,1625	0,1625	0,1625	0,1625	0,1625	0,3284
AGUA		0,04597	0,0460	0,0460	0,0460	0,0423	0,0423	0,0423	0,0423	0,0423	0,0871

ACETALDE		0	0	0	0	0,7215	0,7215	0,7215	0,7215	0,7215	0,5126
H2		0	0	0	0	0,0351	0,0351	0,0351	0,0351	0,0351	0
BUTANONA		0	0	0	0	0,0043	0,0043	0,0043	0,0043	0,0043	0,0067
PESADOS		0	0	0	0	0,0186	0,0186	0,0186	0,0186	0,0186	0,0420
ACETONA		0	0	0	0	0,0027	0,0027	0,0027	0,0027	0,0027	0,0032
ACETATO		0	0	0	0	0,0129	0,0129	0,0129	0,0129	0,0129	0,0200
13-BD		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1-BUTENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-BUTENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CROTONAL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow	m3/hr	4,1459	736,0901	1632,8386	3427,2407	5931,5180	4019,6144	3559,1090	2059,6935	1272,1953	1,7838

N° CORRIENTE	Unidades	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
De:		T-101	T-101	F-101	T-102	Exterior	T-102	E-106	F-103	F-103	MIX1
Hasta:		MIX1	Exterior	T-102	MIX1	T-102	E-106	F-103	MIX1	Exterior	V-101
Fase		L	V	V	L	L	V	L+V	L	V	L
Temperature	°C	35,88	35,88	35	39,19	20	54,92	0	0	0	28,21
Pressure	bar	2,027	2,027	2,026	2,027	2,027	2,027	2,027	2,027	2,027	2,027
Fracción Vapor mol	-	0	1	1	0	0	1	0,7137	0	1	0

Fracción Líquido mol	-	1	0	0	1	1	0	0,2863	1	0	1
Densidad	kg/m3	774,8857	1,8582	1,5323	776,7520	812,3511	1,1916	2,0016	821,9846	0,4454	788,3470
Entalpia de corriente	Gcal/hr	-1,5556	0	-1,7571	-3,1546	-2,8032	-1,4057	-1,7044	-1,5065	-0,1979	-6,2167
Peso Molec. medio	kg/kmol	44,69	23,56	19,37	43,22	42,99	16,04	16,04	43,58	4,99	43,68
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	28,0333	0,0042	100,4727	54,0520	42,0687	88,4893	88,4893	25,3349	63,1544	107,4202
ETANOL	kmol/h	10,1314	0	1,7477	26,8249	37,4537	12,3765	12,3765	12,1902	0,1863	49,1465
AGUA	kmol/h	0,8245	0	1,0346	4,2259	4,6149	1,4236	1,4236	1,3935	0,0301	6,4439
ACETALDE	kmol/h	16,5355	0,0020	38,6236	22,6180	0	16,0056	16,0056	11,7418	4,2638	50,8953
H2	kmol/h	0,0072	0,0021	58,6969	0,0153	0	58,6816	58,6816	0,0078	58,6738	0,0303
BUTANONA	kmol/h	0,1328	0	0,0702	0,0702	0	0	0	0	0	0,2030
PESADOS	kmol/h	0,0008	0	0,0512	0,0512	0	0	0	0	0	0,0520
ACETONA	kmol/h	0,0780	0	0,0786	0,0765	0	0,0021	0,0021	0,0016	0,0005	0,1561
ACETATO	kmol/h	0,3231	0	0,1699	0,1699	0	0	0	0	0	0,4930
13-BD	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CROTONAL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR	-										
ETANOL	-	0,3614	0,0221	0,0174	0,4963	0,8903	0,1399	0,1399	0,4812	0,0029	0,4575

AGUA	-	0,0294	0,0021	0,0103	0,0782	0,1097	0,0161	0,0161	0,0550	0,0005	0,0600
ACETALDE	-	0,5899	0,4826	0,3844	0,4184	0,0000	0,1809	0,1809	0,4635	0,0675	0,4738
H2	-	0,0003	0,4899	0,5842	0,0003	0,0000	0,6631	0,6631	0,0003	0,9291	0,0003
BUTANONA	-	0,0047	0,0009	0,0007	0,0013	0	0	0	0	0	0,0019
PESADOS	-	0	0	0,0005	0,0009	0	0	0	0	0	0,0005
ACETONA	-	0,0028	0,0009	0,0008	0,0014	0	0	0	0	0	0,0015
ACETATO	-	0,0115	0,0017	0,0017	0,0031	0	0	0	0	0	0,0046
13-BD	-	0	0	0	0,0000	0	0	0	0	0	0
ETILENO	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1-BUTENO	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-BUTENO	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CROTONAL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSICO TOTAL	kg/h	1252,6728	0,0991	1946,6419	2335,9062	1808,5972	1419,3328	1419,3328	1104,068	315,2648	4692,647
ETANOL	kg/h	466,7429	0,0043	80,5145	1235,7990	1725,4578	570,1733	570,1733	561,5915	8,5819	2264,1334
AGUA	kg/h	14,8537	0,0002	18,6379	76,1316	83,1393	25,6457	25,6457	25,1038	0,5419	116,0891
ACETALDE	kg/h	728,4432	0,0894	1701,4903	996,3943	0	705,0961	705,0961	517,2632	187,8328109	2242,1007
H2	kg/h	0,0145	0,0042	118,3260	0,0309	0	118,2951	118,2951	0,0157	118,2793475	0,0612
BUTANONA	kg/h	9,5751	0,0003	5,0614	5,0612	0	0,0002	0,0002	0,0001	0	14,6365
PESADOS	kg/h	0,0496	0	3,0726	3,0726	0	0	0	0	0	3,1221
ACETONA	kg/h	4,5285	0,0002	4,5664	4,4440	0	0,1224	0,1224	0,0935	0,0289	9,0660

ACETATO	kg/h	28,4653	0,0006	14,9727	14,9726	0	0,0002	0,0002	0,0002	0	43,4380
13-BD	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1-BUTENO	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-BUTENO	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
CROTONAL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MÁSCA	-										
ETANOL	-	0,3726	0,0431	0,0414	0,5290	0,9540	0,4017	0,4017	0,5087	0,0272	0,4825
AGUA	-	0,0119	0,0016	0,0096	0,0326	0,0460	0,0181	0,0181	0,0227	0,0017	0,0247
ACETALDE	-	0,5815	0,9023	0,8741	0,4266	0	0,4968	0,4968	0,4685	0,5958	0,4778
H2	-	0	0,0419	0,0608	0	0	0,0833	0,0833	0	0,3752	0
BUTANONA	-	0,0076	0,0026	0,0026	0,0022	0	0	0	0	0	0,0031
PESADOS	-	0	0	0,0016	0,0013	0	0	0	0	0	0,0007
ACETONA	-	0,0036	0,0022	0,0023	0,0019	0	0,0001	0,0001	0	0	0,0019
ACETATO	-	0,0227	0,0062	0,0077	0,0064	0	0	0	0	0	0,0093
13-BD	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1-BUTENO	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-BUTENO	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

CROTONAL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow	m3/h	1,6166	0,0533	1270,4114	3,0073	2,2264	1191,0692	709,1027	1,3432	707,7595	5,9525

N° CORRIENTE	Unidades	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
De:		V-101	MIX2	E-201	H-201	R-201	E-201	E-202	F-201	P-201	V-201
Hasta:		MIX2	E-201	H-201	R-201	E-201	E-202	F-201	P-201	T-201	T-202
Fase		L+V	L+V	V	V	V	L+V	L+V	L	L	L+V
Temperature	°C	28,18	47,07	267,12	350	350	57,07	35	35,00	35,08	82,92
Pressure	bar	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	2,027	1,115
Fracción Vapor mol	-	0,0005	0,0166	1	1	1	0,4252	0,2054	0	0	0,0531
Fracción Líquido mol	-	0,9995	0,9834	0	0	0	0,5748	0,7946	1	1	0,9469
Densidad	kg/m3	648,0350	90,5953	1,0084	0,8742	0,7510	3,3267	7,3438	817,5460	817,4483	22,0219
Entalpia de corriente	Gcal/h	-6,2167	-15,4364	-12,2623	-11,7719	-11,4309	-14,6050	-15,2857	-14,7510	-14,7504	-12,4828
Peso Molec. medio	kg/kmol	43,68	44,70	44,70	44,70	38,40	38,40	38,40	36,20	36,20	31,88
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	107,4202	256,4919	256,4919	256,4914	298,5731	298,5731	298,5731	237,2421	237,2421	187,5915
ETANOL	kmol/h	49,1465	123,6743	123,6743	123,6743	75,9295	75,9295	75,9295	73,0917	73,0917	72,3607
AGUA	kmol/h	6,4439	28,7518	28,7518	28,7518	106,103	106,1034	106,1034	103,6274	103,6274	103,4036
ACETALDE	kmol/h	50,8953	82,4207	82,4207	82,4206	39,2426	39,2426	39,2426	28,6245	28,6245	0,2862
H2	kmol/h	0,0303	0,0303	0,0303	0,0303	5,3293	5,3293	5,3293	0,0034	0,0034	0
BUTANONA	kmol/h	0,2030	6,8081	6,8081	6,8077	6,8077	6,8077	6,8077	6,2389	6,2389	5,7430

PESADOS	kmol/h	0,0520	0,0782	0,0782	0,0782	5,1711	5,1711	5,1711	5,1387	5,1387	5,1387
ACETONA	kmol/h	0,1561	1,4102	1,4102	1,4102	1,5314	1,5314	1,5314	1,2613	1,2613	0,0718
ACETATO	kmol/h	0,4930	4,8607	4,8607	4,8607	5,3609	5,3609	5,3609	4,5507	4,5507	0,1336
13-BD	kmol/h	0	0,2962	0,2962	0,2962	36,5709	36,5709	36,5709	10,5503	10,5503	0
ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	4,0912	4,0912	4,0912	0,0371	0,0371	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	1,0911	1,0911	1,0911	0,0144	0,0144	0
1-BUTENO	kmol/h	0	0,0058	0,0058	0,0058	0,4605	0,4605	0,4605	0,2752	0,2752	0
2-BUTENO	kmol/h	0	0,3980	0,3980	0,3980	0,8526	0,8526	0,8526	0,5760	0,5760	0,0001
CROTONAL	kmol/h	0	0,0043	0,0043	0,0043	0,4590	0,4590	0,4590	0,4538	0,4538	0,4538
DEE	kmol/h	0	7,7533	7,7533	7,7533	9,5720	9,5720	9,5720	2,7987	2,7987	0
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR	-										
ETANOL	-	0,4575	0,4822	0,4822	0,4822	0,2543	0,2543	0,2543	0,3081	0,3081	0,3857
AGUA	-	0,0600	0,1121	0,1121	0,1121	0,3554	0,3554	0,3554	0,4368	0,4368	0,5512
ACETALDE	-	0,4738	0,3213	0,3213	0,3213	0,1314	0,1314	0,1314	0,1207	0,1207	0,0015
H2	-	0,0003	0,0001	0,0001	0,0001	0,0178	0,0178	0,0178	0	0	0
BUTANONA	-	0,0019	0,0265	0,0265	0,0265	0,0228	0,0228	0,0228	0,0263	0,0263	0,0306
PESADOS	-	0,0005	0,0003	0,0003	0,0003	0,0173	0,0173	0,0173	0,0217	0,0217	0,0274
ACETONA	-	0,0015	0,0055	0,0055	0,0055	0,0051	0,0051	0,0051	0,0053	0,0053	0,0004
ACETATO	-	0,0046	0,0190	0,0190	0,0190	0,0180	0,0180	0,0180	0,0192	0,0192	0,0007
13-BD	-	0	0,0012	0,0012	0,0012	0,1225	0,1225	0,1225	0,0445	0,0445	0
ETILENO	-	0	0	0	0	0,0137	0,0137	0,0137	0,0002	0,0002	0
PROPILEN	-	0	0	0	0	0,0037	0,0037	0,0037	0,0001	0,0001	0

1-BUTENO	-	0	0	0	0	0,0015	0,0015	0,0015	0,0012	0,0012	0
2-BUTENO	-	0	0,0016	0,0016	0,0016	0,0029	0,0029	0,0029	0,0024	0,0024	0
CROTONAL	-	0	0	0	0	0,0015	0,0015	0,0015	0,0019	0,0019	0,0024
DEE	-	0	0,0302	0,0302	0,0302	0,0321	0,0321	0,0321	0,0118	0,0118	0
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSIICO TOT.	kg/h	4692,647	11465,93	11465,93	11465,9	11465,9	11465,9	11465,9	8587,1529	8587,1529	5979,4967
ETANOL	kg/h	2264,1334	5697,5578	5697,5578	5697,5568	3497,998	3497,9978	3497,9978	3367,2628	3367,2628	3333,5902
AGUA	kg/h	116,0891	517,9710	517,9710	517,9714	1911,482	1911,4821	1911,4821	1866,8769	1866,8769	1862,8440
ACETALDE	kg/h	2242,1007	3630,8915	3630,8915	3630,8891	1728,76	1728,7602	1728,7602	1260,9990	1260,9990	12,6100
H2	kg/h	0,0612	0,0612	0,0612	0,0612	10,7433	10,7433	10,7433	0,0069	0,0069	0
BUTANONA	kg/h	14,6365	490,9136	490,9136	490,8811	490,8811	490,8811	490,8811	449,8663	449,8663	414,1130
PESADOS	kg/h	3,1221	4,6951	4,6951	4,6951	310,5357	310,5357	310,5357	308,5939	308,5939	308,5939
ACETONA	kg/h	9,0660	81,9033	81,9033	81,9021	88,9444	88,9444	88,9444	73,2571	73,2571	4,1702
ACETATO	kg/h	43,4380	428,2598	428,2598	428,2557	472,328	472,3282	472,3282	400,9453	400,9453	11,7680
13-BD	kg/h	0	16,0233	16,0233	16,0232	1978,18	1978,1794	1978,1794	570,6806	570,6806	0
ETILENO	kg/h	0	0	0	0	114,774	114,7737	114,7737	1,0411	1,0411	0
PROPILEN	kg/h	0	0	0	0	45,9153	45,9153	45,9153	0,6067	0,6067	0
1-BUTENO	kg/h	0	0,3252	0,3252	0,3252	25,8356	25,8356	25,8356	15,4416	15,4416	0,0002
2-BUTENO	kg/h	0	22,3293	22,3293	22,3296	47,8400	47,8400	47,8400	32,3202	32,3202	0,0031
CROTONAL	kg/h	0	0,3023	0,3023	0,3023	32,1706	32,1706	32,1706	31,8042	31,8042	31,8042
DEE	kg/h	0	574,6972	574,6972	574,6971	709,503	709,5027	709,5027	207,4502	207,4502	0
BUTANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

FRACCIÓN MÁSCA	-										
ETANOL	-	0,4825	0,4969	0,4969	0,4969	0,3051	0,3051	0,3051	0,3921	0,3921	0,5575
AGUA	-	0,0247	0,0452	0,0452	0,0452	0,1667	0,1667	0,1667	0,2174	0,2174	0,3115
ACETALDE	-	0,4778	0,3167	0,3167	0,3167	0,1508	0,1508	0,1508	0,1468	0,1468	0,0021
H2	-	0	0	0	0	0,0009	0,0009	0,0009	0	0	0
BUTANONA	-	0,0031	0,0428	0,0428	0,0428	0,0428	0,0428	0,0428	0,0524	0,0524	0,0693
PESADOS	-	0,0007	0,0004	0,0004	0,0004	0,0271	0,0271	0,0271	0,0359	0,0359	0,0516
ACETONA	-	0,0019	0,0071	0,0071	0,0071	0,0078	0,0078	0,0078	0,0085	0,0085	0,0007
ACETATO	-	0,0093	0,0374	0,0374	0,0374	0,0412	0,0412	0,0412	0,0467	0,0467	0,0020
13-BD	-	0	0,0014	0,0014	0,0014	0,1725	0,1725	0,1725	0,0665	0,0665	0
ETILENO	-	0	0	0	0	0,0100	0,0100	0,0100	0,0001	0,0001	0
PROPILEN	-	0	0	0	0	0,0040	0,0040	0,0040	0,0001	0,0001	0
1-BUTENO	-	0	0	0	0	0,0023	0,0023	0,0023	0,0018	0,0018	0
2-BUTENO	-	0	0,0019	0,0019	0,0019	0,0042	0,0042	0,0042	0,0038	0,0038	0
CROTONAL	-	0	0	0	0	0,0028	0,0028	0,0028	0,0037	0,0037	0,0053
DEE	-	0	0,0501	0,0501	0,0501	0,0619	0,0619	0,0619	0,0242	0,0242	0
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow	m3/h	7,2413	126,5620	11370,944	13115,216	15267	3446,6441	1561,2930	10,5036	10,5048	271,5248

N° CORRIENTE	Unidades	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
De:		T-202	MIXRW	T-101	XX9	T-201	P-202	F-201	C-201	MIX21	T-203
Hasta:		MIXRW	Exterior	MIXRW	MIX2	P-202	MIX21	C-201	MIX21	T-203	SEPAC
Fase		L	L+V	L	L	L	L	V	V	L+V	L

Temperature	°C	98,71	99,00	122,79	77,15	33,35	33,66	35,00	105,10	56,29	68,33
Pressure	bar	1,013	1,013	2,027	1,013	2,128	4,053	1,013	4,053	4,053	4,053
Fracción Vapor mol	-	0	0,0031	0	0	0	0	1	1	0,6047	0
Fracción Líquido mol	-	1	0,9969	1	1	1	1	0	0	0,3953	1
Densidad	kg/m3	898,2814	178,5193	871,8952	752,0021	737,1122	736,6828	1,8563	6,0491	12,0082	723,7078
Entalpia de corriente	Gcal/hr	-6,1482	-6,6562	-0,5081	-6,4115	-1,9585	-1,9579	-0,5347	-0,4544	-2,4123	-3,4669
Peso Molec. medio	kg/kmol	20,93	21,16	23,94	41,76	52,52	52,52	46,94	46,94	49,44	52,61
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	89,0391	96,0786	7,0395	98,5524	49,6506	49,6506	61,3310	61,3310	110,9816	62,3695
ETANOL	kmol/h	0,7236	0,7246	0,0010	71,6371	0,7309	0,7309	2,8378	2,8378	3,5687	3,5687
AGUA	kmol/h	82,7228	88,7693	6,0464	20,6807	0,2239	0,2239	2,4760	2,4760	2,6998	2,0088
ACETALDE	kmol/h	0	0	0	0,2862	28,3382	28,3382	10,6181	10,6181	38,9563	38,5668
H2	kmol/h	0	0	0	0	0,0034	0,0034	5,3259	5,3259	5,3293	0
BUTANONA	kmol/h	0,0003	0,0003	0	5,7428	0,4958	0,4958	0,5688	0,5688	1,0646	1,0646
PESADOS	kmol/h	5,1387	6,1308	0,9921	0	0	0	0,0323	0,0323	0,0323	0,0323
ACETONA	kmol/h	0	0	0	0,0718	1,1895	1,1895	0,2701	0,2701	1,4596	1,4596
ACETATO	kmol/h	0	0	0	0,1336	4,4171	4,4171	0,8102	0,8102	5,2273	5,2273
13-BD	kmol/h	0	0	0	0	10,5503	10,5503	26,0206	26,0206	36,5709	0,3657
ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	0,0371	0,0371	4,0541	4,0541	4,0912	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	0,0144	0,0144	1,0767	1,0767	1,0911	0
1-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0	0,2752	0,2752	0,1853	0,1853	0,4605	0,0072
2-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0,0001	0,5760	0,5760	0,2766	0,2766	0,8526	0,4913
CROTONAL	kmol/h	0,4537	0,4537	0	0,0001	0	0	0,0052	0,0052	0,0052	0,0052
DEE	kmol/h	0	0	0	0	2,7987	2,7987	6,7733	6,7733	9,5720	9,5720
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

DMF	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR	-										
ETANOL	-	0,0081	0,0075	0,0001	0,7269	0,0147	0,0147	0,0463	0,0463	0,0322	0,0572
AGUA	-	0,9291	0,9239	0,8589	0,2098	0,0045	0,0045	0,0404	0,0404	0,0243	0,0322
ACETALDE	-	0	0	0	0,0029	0,5708	0,5708	0,1731	0,1731	0,3510	0,6184
H2	-	0	0	0	0	0,0001	0,0001	0,0868	0,0868	0,0480	0
BUTANONA	-	0	0	0	0,0583	0,0100	0,0100	0,0093	0,0093	0,0096	0,0171
PESADOS	-	0,0577	0,0638	0,1409	0	0	0	0,0005	0,0005	0,0003	0,0005
ACETONA	-	0	0	0	0,0007	0,0240	0,0240	0,0044	0,0044	0,0132	0,0234
ACETATO	-	0	0	0	0,0014	0,0890	0,0890	0,0132	0,0132	0,0471	0,0838
13-BD	-	0	0	0	0	0,2125	0,2125	0,4243	0,4243	0,3295	0,0059
ETILENO	-	0	0	0	0	0,0007	0,0007	0,0661	0,0661	0,0369	0
PROPILEN	-	0	0	0	0	0,0003	0,0003	0,0176	0,0176	0,0098	0
1-BUTENO	-	0	0	0	0	0,0055	0,0055	0,0030	0,0030	0,0041	0,0001
2-BUTENO	-	0	0	0	0	0,0116	0,0116	0,0045	0,0045	0,0077	0,0079
CROTONAL	-	0,0051	0,0047	0	0	0	0	0,0001	0,0001	0	0,0001
DEE	-	0	0	0	0	0,0564	0,0564	0,1104	0,1104	0,0862	0,1535
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSICO TOT.	kg/h	1864,0216	2032,5729	168,5513	4115,4751	2607,6561	2607,6561	2878,7369	2878,7369	5486,3931	3281,2448
ETANOL	kg/h	33,3359	33,3826	0,0467	3300,2543	33,6726	33,6726	130,7349	130,7349	164,4076	164,4076
AGUA	kg/h	1490,2752	1599,2035	108,9283	372,5688	4,0329	4,0329	44,6052	44,6052	48,6381	36,1890
ACETALDE	kg/h	0	0	0	12,6100	1248,3890	1248,3890	467,7612	467,7612	1716,1502	1698,9887
H2	kg/h	0	0	0	0	0,0069	0,0069	10,7364	10,7364	10,7433	0

BUTANONA	kg/h	0,0181	0,0181	0	414,0949	35,7534	35,7534	41,0148	41,0148	76,7681	76,7681
PESADOS	kg/h	308,5937	368,1700	59,5762	0,0001	0	0	1,9418	1,9418	1,9418	1,9418
ACETONA	kg/h	0	0	0	4,1702	69,0869	69,0869	15,6873	15,6873	84,7742	84,7742
ACETATO	kg/h	0	0	0	11,7680	389,1773	389,1773	71,3829	71,3829	460,5602	460,5602
13-BD	kg/h	0	0	0	0	570,6806	570,6806	1407,4987	1407,4987	1978,1794	19,7818
ETILENO	kg/h	0	0	0	0	1,0411	1,0411	113,7326	113,7326	114,7737	0
PROPILEN	kg/h	0	0	0	0	0,6067	0,6067	45,3085	45,3085	45,9153	0
1-BUTENO	kg/h	0	0	0	0,0002	15,4414	15,4414	10,3940	10,3940	25,8354	0,4013
2-BUTENO	kg/h	0	0	0	0,0031	32,3171	32,3171	15,5198	15,5198	47,8368	27,5632
CROTONAL	kg/h	31,7987	31,7987	0	0,0055	0	0	0,3663	0,3663	0,3663	0,3663
DEE	kg/h	0	0	0	0	207,4502	207,4502	502,0525	502,0525	709,5027	709,5027
BUTANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MÁSCICA	-										
ETANOL	-	0,0179	0,0164	0,0003	0,8019	0,0129	0,0129	0,0454	0,0454	0,0300	0,0501
AGUA	-	0,7995	0,7868	0,6463	0,0905	0,0015	0,0015	0,0155	0,0155	0,0089	0,0110
ACETALDE	-	0	0	0	0,0031	0,4787	0,4787	0,1625	0,1625	0,3128	0,5178
H2	-	0	0	0	0	0	0	0,0037	0,0037	0,0020	0
BUTANONA	-	0	0	0	0,1006	0,0137	0,0137	0,0142	0,0142	0,0140	0,0234
PESADOS	-	0,1656	0,1811	0,3535	0	0	0	0,0007	0,0007	0,0004	0,0006
ACETONA	-	0	0	0	0,0010	0,0265	0,0265	0,0054	0,0054	0,0155	0,0258
ACETATO	-	0	0	0	0,0029	0,1492	0,1492	0,0248	0,0248	0,0839	0,1404
13-BD	-	0	0	0	0	0,2188	0,2188	0,4889	0,4889	0,3606	0,0060
ETILENO	-	0	0	0	0	0,0004	0,0004	0,0395	0,0395	0,0209	0

PROPILEN	-	0	0	0	0	0,0002	0,0002	0,0157	0,0157	0,0084	0
1-BUTENO	-	0	0	0	0	0,0059	0,0059	0,0036	0,0036	0,0047	0,0001
2-BUTENO	-	0	0	0	0	0,0124	0,0124	0,0054	0,0054	0,0087	0,0084
CROTONAL	-	0,0171	0,0156	0	0	0	0	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
DEE	-	0	0	0	0	0,0796	0,0796	0,1744	0,1744	0,1293	0,2162
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Volume Flow	m3/h	2,0751	11,3857	0,1933	5,4727	3,5377	3,5397	1550,789837	475,8967	456,8859	4,5339

N° CORRIENTE	Unidades	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
De:		SEPAC	SEPAC	V-202	T-203	T-301	V-301	E-302	T-302	T-302	Exterior
Hasta:		Exterior	V-202	MIX2	T-301	V-301	E-302	T-302	Exterior	MIX3	MIX3
Fase		L	L	L+V	V	L	L+V	L	V	L	L
Temperature	°C	68,33	68,33	27,34	35,93	189,19	149,30	123,45	140,70	151,76	20
Pressure	bar	4,053	4,053	1,013	4,053	4,053	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013
Fracción Vapor molar	-	0	0	0,2650	1	0	0,2096	0	1	0	0
Fracción Líquidomolar	-	1	1	0,7350	0	1	0,7904	1	0	1	1
Densidad	kg/m3	723,7078	723,7078	7,9910	7,1544	762,8098	9,9048	839,0323	1,9315	812,6698	950,052
Entalpia de corriente	Gcal/hr	-0,6587	-2,8082	-2,8082	0,9537	-11,0087	-11,0087	-11,6852	-0,3986	-10,9114	-0,5378
Peso Molecular medio	kg/kmol	52,61	52,61	52,61	45,36	72,65	72,65	72,65	65,59	73,09	73,09
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	11,8502	50,5193	50,5193	48,6121	223,0219	223,0219	223,0219	13,0219	210,0000	9,4098
ETANOL	kmol/h	0,6781	2,8907	2,8907	0	0	0	0	0	0	0

AGUA	kmol/h	0,3817	1,6271	1,6271	0,6910	0,7028	0,7028	0,7028	0,6908	0,0120	0
ACETALDE	kmol/h	7,3277	31,2391	31,2391	0,3896	0,3896	0,3896	0,3896	0,3896	0	0
H2	kmol/h	0	0	0	5,3293	0	0	0	0	0	0
BUTANONA	kmol/h	0,2023	0,8624	0,8624	0	0	0	0	0	0	0
PESADOS	kmol/h	0,0061	0,0262	0,0262	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	kmol/h	0,2773	1,1823	1,1823	0	0	0	0	0	0	0
ACETATO	kmol/h	0,9932	4,2341	4,2341	0	0	0	0	0	0	0
13-BD	kmol/h	0,0695	0,2962	0,2962	36,2052	1,9879	1,9879	1,9879	1,9879	0	0
ETILENO	kmol/h	0	0	0	4,0912	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	1,0911	0,0895	0,0895	0,0895	0,0895	0	0
1-BUTENO	kmol/h	0,0014	0,0058	0,0058	0,4533	0,4513	0,4513	0,4513	0,4513	0	0
2-BUTENO	kmol/h	0,0933	0,3979	0,3979	0,3613	0,0066	0,0066	0,0066	0,0066	0	0
CROTONAL	kmol/h	0,0010	0,0042	0,0042	0	0	0	0	0	0	0
DEE	kmol/h	1,8187	7,7533	7,7533	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kmol/h	0	0	0	0	219,3942	219,3942	219,3942	9,4062	209,9880	9,4098
FRACCIÓN MOLAR	-										
ETANOL	-	0,0572	0,0572	0,0572	0	0	0	0	0	0	0
AGUA	-	0,0322	0,0322	0,0322	0,0142	0,0032	0,0032	0,0032	0,0530	0,0001	0
ACETALDE	-	0,6184	0,6184	0,6184	0,0080	0,0017	0,0017	0,0017	0,0299	0	0
H2	-	0	0	0	0,1096	0	0	0	0	0	0
BUTANONA	-	0,0171	0,0171	0,0171	0	0	0	0	0	0	0
PESADOS	-	0,0005	0,0005	0,0005	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	-	0,0234	0,0234	0,0234	0	0	0	0	0	0	0

ACETATO	-	0,0838	0,0838	0,0838	0	0	0	0	0	0	0
13-BD	-	0,0059	0,0059	0,0059	0,7448	0,0089	0,0089	0,0089	0,1527	0	0
ETILENO	-	0	0	0	0,0842	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	-	0	0	0	0,0224	0,0004	0,0004	0,0004	0,0069	0	0
1-BUTENO	-	0,0001	0,0001	0,0001	0,0093	0,0020	0,0020	0,0020	0,0347	0	0
2-BUTENO	-	0,0079	0,0079	0,0079	0,0074	0	0	0	0,0005	0	0
CROTONAL	-	0,0001	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0
DEE	-	0,1535	0,1535	0,1535	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	0	0	0	0	0,9837	0,9837	0,9837	0,7223	0,9999	1
FLUJO MÁSIICO TOTAL	kg/h	623,436	2657,808	2657,8083	2205,1482	16203,3663	16203,366	16203,366	854,138	15349,229	687,810
ETANOL	kg/h	31,2374	133,1701	133,1701	0	0	0	0	0	0	0
AGUA	kg/h	6,8759	29,3131	29,3131	12,4491	12,6611	12,6611	12,6611	12,4444	0,2167	0
ACETALDE	kg/h	322,808	1376,1808	1376,1808	17,1615	17,1615	17,1615	17,1615	17,1615	0	0
H2	kg/h	0	0	0	10,7433	0	0	0	0	0	0
BUTANONA	kg/h	14,5859	62,1822	62,1822	0	0	0	0	0	0	0
PESADOS	kg/h	0,3689	1,5728	1,5728	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	kg/h	16,1071	68,6671	68,6671	0	0	0	0	0	0	0
ACETATO	kg/h	87,5064	373,0537	373,0537	0	0	0	0	0	0	0
13-BD	kg/h	3,7585	16,0233	16,0233	1958,3976	107,5269	107,5269	107,5269	107,5269	0	0
ETILENO	kg/h	0	0	0	114,7737	0,0034	0,0034	0,0034	0,0034	0	0
PROPILEN	kg/h	0	0	0	45,9153	3,7657	3,7657	3,7657	3,7657	0	0
1-BUTENO	kg/h	0,0762	0,3250	0,3250	25,4342	25,3198	25,3198	25,3198	25,3198	0	0
2-BUTENO	kg/h	5,2370	22,3262	22,3262	20,2737	0,3715	0,3715	0,3715	0,3715	0	0

CROTONAL	kg/h	0,0696	0,2967	0,2967	0	0	0	0	0	0	0
DEE	kg/h	134,806	574,6972	574,6972	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kg/h	0	0	0	0	16036,5563	16036,5563	16036,5563	687,5445	15349,0118	687,8100
FRACCIÓN MÁSCICA	-										
ETANOL	-	0,0501	0,0501	0,0501	0	0	0	0	0	0	0
AGUA	-	0,0110	0,0110	0,0110	0,0056	0,0008	0,0008	0,0008	0,0146	0	0
ACETALDE	-	0,5178	0,5178	0,5178	0,0078	0,0011	0,0011	0,0011	0,0201	0	0
H2	-	0	0	0	0,0049	0	0	0	0	0	0
BUTANONA	-	0,0234	0,0234	0,0234	0	0	0	0	0	0	0
PESADOS	-	0,0006	0,0006	0,0006	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	-	0,0258	0,0258	0,0258	0	0	0	0	0	0	0
ACETATO	-	0,1404	0,1404	0,1404	0	0	0	0	0	0	0
13-BD	-	0,0060	0,0060	0,0060	0,8881	0,0066	0,0066	0,0066	0,1259	0	0
ETILENO	-	0	0	0	0,0520	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	-	0	0	0	0,0208	0,0002	0,0002	0,0002	0,0044	0	0
1-BUTENO	-	0,0001	0,0001	0,0001	0,0115	0,0016	0,0016	0,0016	0,0296	0	0
2-BUTENO	-	0,0084	0,0084	0,0084	0,0092	0	0	0	0,0004	0	0
CROTONAL	-	0,0001	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0	0	0
DEE	-	0,2162	0,2162	0,2162	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	0	0	0	0	0,9897	0,9897	0,9897	0,8050	1	1
Volume Flow	m3/h	0,8614	3,6725	332,5997	308,2246	21,2417	1635,9157	19,3120	442,2154	18,8874	0,7240

Nº CORRIENTE	Unidades	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
De:		MIX3	P-301	E-301	T-301	E-303	F-301	T-303	T-303	F-301	T-201
Hasta:		P-301	E-301	T-301	E-303	F-301	T-303	Exterior	Exterior	Exterior	V-201
Fase		L	L	L	V	L+V	L	L	V	V	L
Temperature	°C	146,83	147,11	45,50	28,87	-15	-15	37,54	-12,40	-15	100,76
Pressure	bar	1,013	4,053	4,053	4,053	4,053	4,053	4,053	4,053	4,053	2,128
Fracción Vapor molar	-	0	0	0	1	0,2561	0	0	1	1	0
Fracción Líquido molar	-	1	1	1	0	0,7439	1	1	0	0	1
Densidad	kg/m3	818,2982	817,9808	925,1702	7,3128	31,9888	660,9062	599,2105	6,7971	3,9850	770,4816
Entalpia de la corriente	Gcal/hr	-11,4492	-11,4465	-12,3453	0,9510	0,7390	0,6472	0,6923	0,0110	0,0918	-12,4828
Peso Molecular medio	kg/kmol	73,09	73,09	73,09	45,31	45,31	53,64	54,11	36,36	21,10	31,88
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	219,4098	219,4098	219,4098	45,0000	45,0000	33,4777	32,5777	0,9000	11,5223	187,5915
ETANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	72,3607
AGUA	kmol/h	0,0120	0,0120	0,0120	0,0003	0,0003	0,0002	0,0001	0,0002	0,0000	103,4036
ACETALDE	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,2862
H2	kmol/h	0	0	0	5,3293	5,3293	0,0092	0	0,0092	5,3202	0
BUTANONA	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	5,7430
PESADOS	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	5,1387
ACETONA	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0718
ACETATO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,1336
13-BD	kmol/h	0	0	0	34,2173	34,2173	32,3947	32,2313	0,1634	1,8226	0
ETILENO	kmol/h	0	0	0	4,0911	4,0911	0,4811	0	0,4811	3,6100	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	1,0016	1,0016	0,2458	0	0,2458	0,7558	0

1-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0,0020	0,0020	0,0019	0,0019	0	0,0001	0
2-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0,3547	0,3547	0,3411	0,3408	0,0004	0,0136	0,0001
CROTONAL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,4538
DEE	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kmol/h	219,3978	219,3978	219,3978	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR	-										
ETANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,3857
AGUA	-	0,0001	0,0001	0,0001	0	0	0	0	0,0002	0	0,5512
ACETALDE	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0015
H2	-	0	0	0	0,1184	0,1184	0,0003	0	0,0102	0,4617	0
BUTANONA	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0306
PESADOS	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0274
ACETONA	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0004
ACETATO	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0007
13-BD	-	0	0	0	0,7604	0,7604	0,9677	0,9894	0,1816	0,1582	0
ETILENO	-	0	0	0	0,0909	0,0909	0,0144	0	0,5345	0,3133	0
PROPILEN	-	0	0	0	0,0223	0,0223	0,0073	0	0,2731	0,0656	0
1-BUTENO	-	0	0	0	0	0	0,0001	0,0001	0	0	0
2-BUTENO	-	0	0	0	0,0079	0,0079	0,0102	0,0105	0,0004	0,0012	0
CROTONAL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0024
DEE	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	0,9999	0,9999	0,9999	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0	0	0

FLUJO MÁSIICO TOTAL	kg/h	16037,04	16037,04	16037,04	2038,82	2038,82	1795,6603	1762,9389	32,7214	243,1601	5979,4967
ETANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3333,5902
AGUA	kg/h	0,2167	0,2167	0,2168	0,0047	0,0047	0,0044	0,0011	0,0032	0,0003	1862,8440
ACETALDE	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12,6100
H2	kg/h	0	0	0	10,7433	10,7433	0,0185	0	0,0185	10,7248	0
BUTANONA	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	414,1130
PESADOS	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	308,5939
ACETONA	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4,1702
ACETATO	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	11,7680
13-BD	kg/h	0	0	0	1850,871	1850,871	1752,2842	1743,4452	8,8390	98,5864	0
ETILENO	kg/h	0	0	0	114,7703	114,7703	13,4957	0	13,4957	101,2747	0
PROPILEN	kg/h	0	0	0	42,1496	42,1496	10,3445	0	10,3445	31,8051	0
1-BUTENO	kg/h	0	0	0	0,1143	0,1143	0,1077	0,1069	0,0008	0,0067	0,0002
2-BUTENO	kg/h	0	0	0	19,9021	19,9021	19,1400	19,1203	0,0197	0,7621	0,0031
CROTONAL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	31,8042
DEE	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	kg/h	16036,822	16036,822	16036,822	0,2654	0,2654	0,2654	0,2654	0	0,0001	0
FRACCIÓN MÁSIICA	-										
ETANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,5575
AGUA	-	0	0	0	0	0	0	0	0,0001	0	0,3115
ACETALDE	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0021
H2	-	0	0	0	0,0053	0,0053	0	0	0,0006	0,0441	0
BUTANONA	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0693

PESADOS	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0516
ACETONA	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0007
ACETATO	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0020
13-BD	-	0	0	0	0,9078	0,9078	0,9758	0,9889	0,2701	0,4054	0
ETILENO	-	0	0	0	0,0563	0,0563	0,0075	0	0,4124	0,4165	0
PROPILEN	-	0	0	0	0,0207	0,0207	0,0058	0	0,3161	0,1308	0
1-BUTENO	-	0	0	0	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0	0	0
2-BUTENO	-	0	0	0	0,0098	0,0098	0,0107	0,0108	0,0006	0,0031	0
CROTONAL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0053
DEE	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	-	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DMF	-	1,0000	1,0000	1,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0	0	0
Volume Flow	m3/h	19,5980	19,6056	17,3341	278,8016	63,7355	2,7170	2,9421	4,8140	61,0185	7,7607

Planta de catalizador de ZrO2

Stream Name	Unidades	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
De:		Exterior	E-101	E-102	H-101	R-101	E-102E	E-103	C-101	E-101E	F-101
Hasta:		E-101	E-102	H-101	R-101	E-102E	E-103	C-101	E-101E	F-101	T-101
Fase		L	L+V	L+V	V	V	V	V	V	L+V	L
Temperatura	°C	20	78,15	78,15	260	260	88,15	46,76	97,17	35	35
Presión	bar	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	2,027	2,027	2,027
Fracción Vapor mol		0	0,3246	0,7225	1	1	1	1	1	0,7412	0
Fracción Líquido mol		1	0,6754	0,2775	0	0	0	0	0	0,2588	1
Densidad	kg/m3	812,351	4,575	2,062	0,983	0,568	0,838	0,946	1,635	2,648	796,771
Entalpia de corriente	Gcal/h	-5,0493	-4,6846	-4,4008	-3,9335	-3,0660	-3,3499	-3,4096	-3,3364	-3,7010	-2,0016
Peso Molec. medio	kg/kmol	42,99	42,99	42,99	42,99	24,85	24,85	24,85	24,85	24,85	40,52
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	75,7753	75,7753	75,7753	75,7753	131,1118	131,1118	131,1118	131,1118	131,1118	33,9322
ETANOL	kmol/h	67,4628	67,4628	67,4628	67,4628	11,4912	11,4912	11,4912	11,4912	11,4912	9,8012
AGUA	kmol/h	8,3126	8,3126	8,3126	8,3126	7,6467	7,6467	7,6467	7,6467	7,6467	6,6462
ACETALDE	kmol/h	0	0	0	0	53,3552	53,3552	53,3552	53,3552	53,3552	15,9990
H2	kmol/h	0	0	0	0	56,7842	56,7842	56,7842	56,7842	56,7842	0,0090
BUTANONA	kmol/h	0	0	0	0	0,1963	0,1963	0,1963	0,1963	0,1963	0,1285
PESADOS	kmol/h	0	0	0	0	1,0099	1,0099	1,0099	1,0099	1,0099	0,9604
ACETONA	kmol/h	0	0	0	0	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,1515	0,0754
ACETATO	kmol/h	0	0	0	0	0,4769	0,4769	0,4769	0,4769	0,4769	0,3125
13-BD	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

DEE	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR											
ETANOL		0,8903	0,8903	0,8903	0,8903	0,0876	0,0876	0,0876	0,0876	0,0876	0,2888
AGUA		0,1097	0,1097	0,1097	0,1097	0,0583	0,0583	0,0583	0,0583	0,0583	0,1959
ACETALDE		0	0	0	0	0,4069	0,4069	0,4069	0,4069	0,4069	0,4715
H2		0	0	0	0	0,4331	0,4331	0,4331	0,4331	0,4331	0,0003
BUTANONA		0	0	0	0	0,0015	0,0015	0,0015	0,0015	0,0015	0,0038
PESADOS		0	0	0	0	0,0077	0,0077	0,0077	0,0077	0,0077	0,0283
ACETONA		0	0	0	0	0,0012	0,0012	0,0012	0,0012	0,0012	0,0022
ACETATO		0	0	0	0	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,0036	0,0092
13-BD		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSIICO TOTAL	kg/h	3257,6979	3257,6979	3257,6979	3257,6979	3257,6979	3257,6979	3257,6979	3257,6979	3257,6979	1374,9434
ETANOL	kg/h	3107,9450	3107,9450	3107,9450	3107,9450	529,3895	529,3895	529,3895	529,3895	529,3895	451,5303
AGUA	kg/h	149,7530	149,7530	149,7530	149,7530	137,7573	137,7573	137,7573	137,7573	137,7573	119,7335
ACETALDE	kg/h	0	0	0	0	2350,4640	2350,4640	2350,4640	2350,4640	2350,4640	704,8063
H2	kg/h	0	0	0	0	114,4701	114,4701	114,4701	114,4701	114,4701	0,0181
BUTANONA	kg/h	0	0	0	0	14,1576	14,1576	14,1576	14,1576	14,1576	9,2628
PESADOS	kg/h	0	0	0	0	60,6456	60,6456	60,6456	60,6456	60,6456	57,6744
ACETONA	kg/h	0	0	0	0	8,7974	8,7974	8,7974	8,7974	8,7974	4,3811

ACETATO	kg/h	0	0	0	0	42,0165	42,0165	42,0165	42,0165	42,0165	27,5370
13-BD	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MÁSCA											
ETANOL		0,9540	0,9540	0,9540	0,9540	0,1625	0,1625	0,1625	0,1625	0,1625	0,3284
AGUA		0,0460	0,0460	0,0460	0,0460	0,0423	0,0423	0,0423	0,0423	0,0423	0,0871
ACETALDE		0	0	0	0	0,7215	0,7215	0,7215	0,7215	0,7215	0,5126
H2		0	0	0	0	0,0351	0,0351	0,0351	0,0351	0,0351	0
BUTANONA		0	0	0	0	0,0043	0,0043	0,0043	0,0043	0,0043	0,0067
PESADOS		0	0	0	0	0,0186	0,0186	0,0186	0,0186	0,0186	0,0419
ACETONA		0	0	0	0	0,0027	0,0027	0,0027	0,0027	0,0027	0,0032
ACETATO		0	0	0	0	0,0129	0,0129	0,0129	0,0129	0,0129	0,0200
13-BD		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO VOLUMÉTRICO	m3/h	4,0102	712,1064	1579,4953	3315,0329	5737,3201	3888,0123	3442,5838	1992,0634	1230,3471	1,7256

Stream Name	Unidades	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
De:		T-101	T-101	F-101	Exterior	T-102	E-104	F-102	F-102	T-102	MIX1
Hasta:		MIX22	MIX1	T-102	T-102	E-104	F-102	MIX1	Exterior	MIX1	V-101
Fase		L	L+V	V	L	V	L+V	L	V	L	L
Temperatura	°C	122,45	37,94	35	20	55,54	-10	-10	-10	39,9	25,51
Presión	bar	2,027	2,027	2,027	2,027	2,027	2,027	2,027	2,027	2,027	2,027
Fracción de Vapor molar		0	0,0002	1	0	1	0,6953	0	1	0	0
Fracción de Líquido molar		1	0,9998	0	1	0	0,3047	1	0	1	1
Densidad	kg/m3	871,746	739,631	1,532	812,351	1,168	2,094	833,815	0,330	776,129	791,948
Entalpia de la corriente	Gcal/h	-0,4920	-1,5015	-1,6994	-2,9741	-1,3317	-1,6577	-1,5533	-0,1044	-3,3419	-6,3967
Peso Molecular medio	kg/kmol	23,97	44,68	19,37	42,99	15,75	15,75	43,58	3,56	43,22	43,66
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	6,8173	27,1148	97,1796	44,6335	84,7311	84,7311	25,8143	58,9167	57,0821	110,0113
ETANOL	kmol/h	0,0098	9,7914	1,6901	39,7372	12,3926	12,3926	12,3135	0,0791	29,0347	51,1395
AGUA	kmol/h	5,8487	0,7975	1,0005	4,8963	1,4263	1,4263	1,4154	0,0109	4,4705	6,6834
ACETALDE	kmol/h	0	15,9990	37,3562	0	14,1519	14,1519	12,0771	2,0748	23,2042	51,2804
H2	kmol/h	0	0,0090	56,7752	0	56,7590	56,7590	0,0072	56,7517	0,0162	0,0324
BUTANONA	kmol/h	0	0,1285	0,0679	0	0	0	0	0	0,0679	0,1963
PESADOS	kmol/h	0,9588	0,0016	0,0495	0	0	0	0	0	0,0495	0,0510
ACETONA	kmol/h	0	0,0754	0,0760	0	0,0012	0,0012	0,0010	0,0002	0,0748	0,1513
ACETATO	kmol/h	0	0,3125	0,1643	0	0	0	0	0	0,1643	0,4769
13-BD	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR											
ETANOL		0,0014	0,3611	0,0174	0,8903	0,1463	0,1463	0,4770	0,0013	0,5086	0,4649
AGUA		0,8579	0,0294	0,0103	0,1097	0,0168	0,0168	0,0548	0,0002	0,0783	0,0608
ACETALDE		0,0000	0,5900	0,3844	0	0,1670	0,1670	0,4678	0,0352	0,4065	0,4661
H2		0,0000	0,0003	0,5842	0	0,6699	0,6699	0,0003	0,9633	0,0003	0,0003
BUTANONA		0,0000	0,0047	0,0007	0	0	0	0	0	0,0012	0,0018
PESADOS		0,1406	0,0001	0,0005	0	0	0	0	0	0,0009	0,0005
ACETONA		0	0,0028	0,0008	0	0	0	0	0	0,0013	0,0014
ACETATO		0	0,0115	0,0017	0	0	0	0	0	0,0029	0,0043
13-BD		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSIICO TOTAL	kg/h	163,3988	1211,5446	1882,7545	1918,8643	1334,5399	1334,5399	1124,8814	209,6585	2467,0789	4803,5049
ETANOL	kg/h	0,4515	451,0787	77,8592	1830,6561	570,9164	570,9164	567,2718	3,6445	1337,5990	2355,9495
AGUA	kg/h	105,3655	14,3680	18,0238	88,2082	25,6952	25,6952	25,4989	0,1963	80,5368	120,4037
ACETALDE	kg/h	0,0008	704,8055	1645,6578	0	623,4378	623,4378	532,0365	91,4013	1022,2200	2259,0620
H2	kg/h	0	0,0181	114,4520	0	114,4193	114,4193	0,0146	114,4047	0,0327	0,0654
BUTANONA	kg/h	0,0001	9,2627	4,8948	0	0,0001	0,0001	0,0001	0	4,8947	14,1575
PESADOS	kg/h	57,5807	0,0937	2,9713	0	0	0	0	0	2,9713	3,0649
ACETONA	kg/h	0,0002	4,3809	4,4163	0	0,0712	0,0712	0,0594	0,0118	4,3451	8,7854
ACETATO	kg/h	0	27,5370	14,4795	0	0,0001	0,0001	0,0001	0	14,4794	42,0165

13-BD	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MÁSCA											
ETANOL		0,0028	0,3723	0,0414	0,9540	0,4278	0,4278	0,5043	0,0174	0,5422	0,4905
AGUA		0,6448	0,0119	0,0096	0,0460	0,0193	0,0193	0,0227	0,0009	0,0326	0,0251
ACETALDE		0,0000	0,5817	0,8741	0	0,4672	0,4672	0,4730	0,4360	0,4143	0,4703
H2		0	0	0,0608	0	0,0857	0,0857	0,0000	0,5457	0	0
BUTANONA		0	0,0076	0,0026	0	0	0	0	0	0,0020	0,0029
PESADOS		0,3524	0,0001	0,0016	0	0	0	0	0	0,0012	0,0006
ACETONA		0,0000	0,0036	0,0023	0	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0018	0,0018
ACETATO		0,0000	0,0227	0,0077	0	0	0	0	0	0,0059	0,0087
13-BD		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ETILENO		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
DEE		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO VOLUMÉTRICO	m3/h	0,1874	1,6380	1228,6215	2,3621	1142,6324	637,4452	1,3491	636,0961	3,1787	6,0654

Stream Name	Unidades	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
De:		V-101	MIX2	E-201	R-201	E-201E	E-202	F-201	F-201	P-201	T-201
Hasta:		MIX2	E-201	R-201	E-201E	E-202	F-201	P-201	MIX21	T-201	V-201
Fase		L+V	L+V	V	V	L+V	L+V	L	V	L	L
Temperatura	°C	24,49	59,16	310	320	59,08	35	35	35	35,14	109,42
Presión	bar	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	3,040	3,040
Fracción Vapor mol		0,0004	0,0025	1	1	0,1691	0,0144	0	1	0	0
Fracción Líquido mol		0,9996	0,9975	0	0	0,8309	0,9856	1	0	1	1
Densidad	kg/m3	670,771	346,353	0,913	0,823	8,618	96,530	789,231	1,828	789,064	722,804
Entalpia de corriente	Gcal/h	-6,3967	-28,3792	-22,1426	-21,6616	-27,8981	-28,8217	-28,8298	0,0081	-28,8276	-25,7311
Peso Molecular medio	kg/kmol	43,66	43,71	43,71	40,08	40,08	40,08	39,98	46,23	39,98	37,20
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	110,0113	456,5097	456,5097	497,8665	497,8665	497,8691	490,6779	7,1912	490,6779	397,9496
ETANOL	kmol/h	51,1395	300,7594	300,7594	255,4864	255,4864	255,4871	254,9745	0,5126	254,9745	252,4248
AGUA	kmol/h	6,6834	51,4878	51,4878	135,8644	135,8644	135,8653	135,6300	0,2353	135,6300	134,7185
ACETALDE	kmol/h	51,2804	85,9217	85,9217	40,8747	40,8747	40,8748	40,1599	0,7150	40,1599	0,4016
H2	kmol/h	0,0324	0,0324	0,0324	0,0324	0,0324	0,0324	0,0004	0,0320	0,0004	0
BUTANONA	kmol/h	0,1963	8,5344	8,5344	8,5344	8,5344	8,5351	8,4940	0,0412	8,4940	7,9024
PESADOS	kmol/h	0,0510	0,0510	0,0510	1,8506	1,8506	1,8506	1,8499	0,0007	1,8499	1,8499
ACETONA	kmol/h	0,1513	1,0846	1,0846	1,0846	1,0846	1,0846	1,0726	0,0120	1,0726	0,0013
ACETATO	kmol/h	0,4769	4,9018	4,9018	5,1267	5,1267	5,1267	5,0832	0,0435	5,0832	0,0216
13-BD	kmol/h	0	0,3336	0,3336	41,7106	41,7106	41,7107	38,3442	3,3665	38,3442	0
ETILENO	kmol/h	0	0	0	2,0692	2,0692	2,0692	0,4351	1,6342	0,4351	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0,2999	0,2999	0,2999	0,0869	0,2130	0,0869	0
DEE	kmol/h	0	3,4030	3,4030	4,3028	4,3028	4,3028	3,9177	0,3851	3,9177	0

BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0,6297	0,6297	0,6297	0,6295	0,0002	0,6295	0,6295
FRACCIÓN MOLAR											
ETANOL		0,4649	0,6588	0,6588	0,5132	0,5132	0,5132	0,5196	0,0713	0,5196	0,6343
AGUA		0,0608	0,1128	0,1128	0,2729	0,2729	0,2729	0,2764	0,0327	0,2764	0,3385
ACETALDE		0,4661	0,1882	0,1882	0,0821	0,0821	0,0821	0,0818	0,0994	0,0818	0,0010
H2		0,0003	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0	0,0044	0	0
BUTANONA		0,0018	0,0187	0,0187	0,0171	0,0171	0,0171	0,0173	0,0057	0,0173	0,0199
PESADOS		0,0005	0,0001	0,0001	0,0037	0,0037	0,0037	0,0038	0,0001	0,0038	0,0046
ACETONA		0,0014	0,0024	0,0024	0,0022	0,0022	0,0022	0,0022	0,0017	0,0022	0
ACETATO		0,0043	0,0107	0,0107	0,0103	0,0103	0,0103	0,0104	0,0061	0,0104	0,0001
13-BD		0	0,0007	0,0007	0,0838	0,0838	0,0838	0,0781	0,4681	0,0781	0
ETILENO		0	0	0	0,0042	0,0042	0,0042	0,0009	0,2272	0,0009	0
PROPILEN		0	0	0	0,0006	0,0006	0,0006	0,0002	0,0296	0,0002	0
DEE		0	0,0075	0,0075	0,0086	0,0086	0,0086	0,0080	0,0535	0,0080	0
BUTANOL		0	0	0	0,0013	0,0013	0,0013	0,0013	0,0000	0,0013	0,0016
FLUJO MÁSICO TOTAL	kg/h	4803,505	19952,06	19952,06	19952,06	19952,06	19952,18	19619,75	332,422	19619,75	14803,20
ETANOL	kg/h	2355,95	13855,695	13855,695	11770,01	11770,01	11770,05	11746,43	23,6141	11746,43	11628,97
AGUA	kg/h	120,4037	927,5673	927,5673	2447,6348	2447,635	2447,652	2443,413	4,2389	2443,413	2426,991
ACETALDE	kg/h	2259,0620	3785,1236	3785,1236	1800,6611	1800,6611	1800,6662	1769,1684	31,4979	1769,1684	17,6917
H2	kg/h	0,0654	0,0654	0,0654	0,0654	0,0654	0,0654	0,0009	0,0645	0,0009	0
BUTANONA	kg/h	14,1575	615,3891	615,3891	615,3891	615,3891	615,4430	612,4752	2,9678	612,4752	569,8209
PESADOS	kg/h	3,0649	3,0653	3,0653	111,1341	111,1341	111,1341	111,0911	0,0431	111,0911	111,0911
ACETONA	kg/h	8,7854	62,9921	62,9921	62,9921	62,9921	62,9938	62,2961	0,6977	62,2961	0,0756
ACETATO	kg/h	42,0165	431,8815	431,8815	451,6989	451,6989	451,6950	447,8591	3,8360	447,8591	1,8999

13-BD	kg/h	0	18,0447	18,0447	2256,1930	2256,1930	2256,1995	2074,1016	182,0978	2074,1016	0
ETILENO	kg/h	0	0	0	58,0498	58,0498	58,0500	12,2057	45,8443	12,2057	0
PROPILEN	kg/h	0	0	0	12,6206	12,6206	12,6207	3,6575	8,9632	3,6575	0
DEE	kg/h	0	252,2398	252,2398	318,9344	318,9344	318,9325	290,3904	28,5420	290,3904	0
BUTANOL	kg/h	0	0,0002	0,0002	46,6778	46,6778	46,6778	46,6634	0,0144	46,6634	46,6634
FRACCIÓN MÁSCA											
ETANOL		0,4905	0,6944	0,6944	0,5899	0,5899	0,5899	0,5987	0,0710	0,5987	0,7856
AGUA		0,0251	0,0465	0,0465	0,1227	0,1227	0,1227	0,1245	0,0128	0,1245	0,1640
ACETALDE		0,4703	0,1897	0,1897	0,0902	0,0902	0,0902	0,0902	0,0948	0,0902	0,0012
H2		0	0	0	0	0	0	0	0,0002	0	0
BUTANONA		0,0029	0,0308	0,0308	0,0308	0,0308	0,0308	0,0312	0,0089	0,0312	0,0385
PESADOS		0,0006	0,0002	0,0002	0,0056	0,0056	0,0056	0,0057	0,0001	0,0057	0,0075
ACETONA		0,0018	0,0032	0,0032	0,0032	0,0032	0,0032	0,0032	0,0021	0,0032	0
ACETATO		0,0087	0,0216	0,0216	0,0226	0,0226	0,0226	0,0228	0,0115	0,0228	0,0001
13-BD		0	0,0009	0,0009	0,1131	0,1131	0,1131	0,1057	0,5478	0,1057	0
ETILENO		0	0	0	0,0029	0,0029	0,0029	0,0006	0,1379	0,0006	0
PROPILEN		0	0	0	0,0006	0,0006	0,0006	0,0002	0,0270	0,0002	0
DEE		0	0,0126	0,0126	0,0160	0,0160	0,0160	0,0148	0,0859	0,0148	0
BUTANOL		0	0	0	0,0023	0,0023	0,0023	0,0024	0	0,0024	0,0032
FLUJO VOLUMÉTRICO	m3/h	7,1612	57,6061	21844,4434	24231,9341	2315,0522	206,6932	24,8593	181,8330	24,8646	20,4802

Stream Name	Unidades	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
De:		V-201	T-202	MIX22	T-202	SET	T-201	P-202	T-203	SAC	MIX21
Hasta:		T-202	MIX22	Exterior	SET	MIX21	P-202	T-203	SAC	MIX21	Exterior
Fase		L+V	L	L+V	L	L	L	L	L	L	L+V
Temperatura	°C	78,67	92,89	93,54	77,64	77,64	36,0401261	36,33	76,94	76,94	32,07
Presión	bar	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	3,040	5,168	5,168	5,168	1,013
Fracción Vapor mol		0,1052	0	0,0025	0	0	0	0	0	0	0,5826
Fracción Líquido mol		0,8948	1	0,9975	1	1	1	1	1	1	0,4174
Densidad	kg/m3	12,077	901,296	206,270	745,647	745,647	694,435	694,035	717,381	717,381	3,243
Entalpia de corriente	Gcal/h	-25,7311	-6,4600	-6,9520	-19,6484	-0,1965	-2,1928	-2,1918	-2,9086	-0,3781	-0,5665
Peso Molecular medio	kg/kmol	37,20	19,95	20,21	42,63	42,63	51,94	51,94	50,69	50,69	47,41
FLUJO MOLAR Tot	kmol/h	397,9496	95,2651	102,0824	302,6846	3,0268	92,7283	92,7283	53,8400	6,9992	17,2172
ETANOL	kmol/h	252,4248	2,5242	2,5340	249,9005	2,4990	2,5497	2,5497	2,5497	0,3315	3,3431
AGUA	kmol/h	134,7185	90,2614	96,1101	44,4571	0,4446	0,9115	0,9115	0,9102	0,1183	0,7982
ACETALDE	kmol/h	0,4016	0	0	0,4016	0,0040	39,7583	39,7583	39,3607	5,1169	5,8359
H2	kmol/h	0	0	0	0	0	0,0004	0,0004	0	0	0,0320
BUTANONA	kmol/h	7,9024	0	0	7,9024	0,0790	0,5915	0,5915	0,5915	0,0769	0,1971
PESADOS	kmol/h	1,8499	1,8499	2,8087	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	kmol/h	0,0013	0	0	0,0013	0	1,0713	1,0713	1,0713	0,1393	0,1513
ACETATO	kmol/h	0,0216	0	0	0,0216	0,0002	5,0616	5,0616	5,0616	0,6580	0,7018
13-BD	kmol/h	0	0	0	0	0	38,3442	38,3442	0,3834	0,0498	3,4163
ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	0	0,4351	0,4351	0	0	1,6342
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	0	0,0869	0,0869	0	0	0,2130
DEE	kmol/h	0	0	0	0	0	3,9177	3,9177	3,9115	0,5085	0,8936

BUTANOL	kmol/h	0,6295	0,6295	0,6295	0	0	0	0	0	0	0,0002
FRACCIÓN MOLAR											
ETANOL		0,6343	0,0265	0,0248	0,8256	0,8256	0,0275	0,0275	0,0474	0,0474	0,1942
AGUA		0,3385	0,9475	0,9415	0,1469	0,1469	0,0098	0,0098	0,0169	0,0169	0,0464
ACETALDE		0,0010	0	0	0,0013	0,0013	0,4288	0,4288	0,7311	0,7311	0,3390
H2		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0019
BUTANONA		0,0199	0	0	0,0261	0,0261	0,0064	0,0064	0,0110	0,0110	0,0114
PESADOS		0,0046	0,0194	0,0275	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA		0	0	0	0	0	0,0116	0,0116	0,0199	0,0199	0,0088
ACETATO		0,0001	0	0	0,0001	0,0001	0,0546	0,0546	0,0940	0,0940	0,0408
13-BD		0	0	0	0	0	0,4135	0,4135	0,0071	0,0071	0,1984
ETILENO		0	0	0	0	0	0,0047	0,0047	0	0	0,0949
PROPILEN		0	0	0	0	0	0,0009	0,0009	0	0	0,0124
DEE		0	0	0	0	0	0,0422	0,0422	0,0727	0,0727	0,0519
BUTANOL		0,0016	0,0066	0,0062	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSICO TOTAL	kg/h	14803,202	1900,128	2063,527	12903,074	129,031	4816,5526	4816,553	2729,328	354,813	816,265
ETANOL	kg/h	11628,968	116,2897	116,7412	11512,678	115,127	117,4643	117,4643	117,4640	15,2703	154,011
AGUA	kg/h	2426,9911	1626,084	1731,45	800,9071	8,0091	16,4214	16,4214	16,3972	2,1316	14,3797
ACETALDE	kg/h	17,6917	0	0,0008	17,6917	0,1769	1751,477	1751,477	1733,962	225,415	257,09
H2	kg/h	0	0	0	0	0	0,0009	0,0009	0	0	0,0645
BUTANONA	kg/h	569,8209	0,0002	0,0003	569,8207	5,6982	42,6543	42,6543	42,6542	5,5450	14,2111
PESADOS	kg/h	111,0911	111,0907	168,6714	0,0004	0	0	0	0	0	0,0431
ACETONA	kg/h	0,0756	0	0,0002	0,0756	0,0008	62,2205	62,2205	62,2204	8,0887	8,7871

ACETATO	kg/h	1,8999	0	0	1,8999	0,0190	445,9592	445,9592	445,9588	57,9746	61,8296
13-BD	kg/h	0	0	0	0	0	2074,102	2074,102	20,7410	2,6963	184,794
ETILENO	kg/h	0	0	0	0	0	12,2057	12,2057	0	0	45,8443
PROPILEN	kg/h	0	0	0	0	0	3,6575	3,6575	0	0	8,9632
DEE	kg/h	0	0	0	0	0	290,3904	290,3904	289,9308	37,6910	66,2330
BUTANOL	kg/h	46,6634	46,6633	46,6633	0,0002	0	0	0	0	0	0,0144
FRACCIÓN MÁSICA											
ETANOL		0,7856	0,0612	0,0566	0,8922	0,8922	0,0244	0,0244	0,0430	0,0430	0,1887
AGUA		0,1640	0,8558	0,8391	0,0621	0,0621	0,0034	0,0034	0,0060	0,0060	0,0176
ACETALDE		0,0012	0,0000	0,0000	0,0014	0,0014	0,3636	0,3636	0,6353	0,6353	0,3150
H2		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,0001
BUTANONA		0,0385	0	0	0,0442	0,0442	0,0089	0,0089	0,0156	0,0156	0,0174
PESADOS		0,0075	0,0585	0,0817	0	0	0	0	0	0	0,0001
ACETONA		0	0	0	0	0	0,0129	0,0129	0,0228	0,0228	0,0108
ACETATO		0,0001	0	0	0,0001	0,0001	0,0926	0,0926	0,1634	0,1634	0,0757
13-BD		0	0	0	0	0	0,4306	0,4306	0,0076	0,0076	0,2264
ETILENO		0	0	0	0	0	0,0025	0,0025	0,0000	0,0000	0,0562
PROPILEN		0	0	0	0	0	0,0008	0,0008	0	0	0,0110
DEE		0	0	0	0	0	0,0603	0,0603	0,1062	0,1062	0,0811
BUTANOL		0,0032	0,0246	0,0226	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO VOLUMÉTRICO	m3/h	1225,735	2,1082	10,0040	17,3045	0,1730	6,9359	6,9399	3,8046	0,4946	251,682

Stream Name	Unidades	41	42	43	44	45	46	47	48
De:		SAC	V-202	T-203	T-301	T-301	T-302	T-302	SET
Hasta:		V-202	MIX2	T-301	T-302	Exterior	Exterior	Exterior	MIX2
Fase		L	L+V	L	L	V	L	V	L
Temperatura	°C	76,94	27,21	35,16	46,39	-12,30	53,03	46,37	77,64
Presión	bar	5,168	1,013	5,168	5,168	5,168	5,168	5,168	1,013
Fracción Vapor molar		0	0,3113	0	0	1	0	1	0
Fracción Líquido molar		1	0,6887	1	1	0	1	0	1
Densidad	kg/m3	717,381	6,569	601,532	588,265	8,044	617,438	10,520	745,647
Entalpia de la corriente	Gcal/h	-2,5305	-2,5305	0,8010	0,8094	0,0077	0,0011	0,9805	-19,4520
Peso Molecular medio	kg/kmol	50,69	50,69	53,67	53,98	33,76	51,12	54,08	42,63
FLUJO MOLAR TOTAL	kmol/h	46,8408	46,8408	38,8884	38,2884	0,6000	1,2884	37,0000	299,6577
ETANOL	kmol/h	2,2183	2,2183	0	0	0	0	0	247,4015
AGUA	kmol/h	0,7919	0,7919	0,0013	0,0011	0,0003	0	0,0011	44,0125
ACETALDE	kmol/h	34,2438	34,2438	0,3976	0,3976	0	0,3942	0,0034	0,3976
H2	kmol/h	0	0	0,0004	0,0000	0,0004	0	0	0
BUTANONA	kmol/h	0,5146	0,5146	0	0	0	0	0	7,8234
PESADOS	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA	kmol/h	0,9320	0,9320	0	0	0	0	0	0,0013
ACETATO	kmol/h	4,4036	4,4036	0	0	0	0	0	0,0213
13-BD	kmol/h	0,3336	0,3336	37,9608	37,8748	0,0860	0,8879	36,9868	0
ETILENO	kmol/h	0	0	0,4351	0,0073	0,4278	0,0000	0,0073	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0,0869	0,0015	0,0855	0,0000	0,0015	0

DEE	kmol/h	3,4030	3,4030	0,0062	0,0062	0	0,0062	0,0000	0
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR									
ETANOL		0,0474	0,0474	0	0	0	0	0	0,8256
AGUA		0,0169	0,0169	0	0	0,0005	0	0	0,1469
ACETALDE		0,7311	0,7311	0,0102	0,0104	0,0000	0,3060	0	0,0013
H2		0	0	0	0	0,0007	0	0	0
BUTANONA		0,0110	0,0110	0	0	0	0	0	0,0261
PESADOS		0	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA		0,0199	0,0199	0	0	0	0	0	0
ACETATO		0,0940	0,0940	0	0	0	0	0	0
13-BD		0,0071	0,0071	0,9761	0,9892	0,1433	0,6892	0,9996	0
ETILENO		0	0	0,0112	0,0002	0,7130	0	0,0002	0
PROPILEN		0	0	0,0022	0	0,1424	0	0	0
DEE		0,0727	0,0727	0,0002	0,0002	0	0,0048	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSICO TOTAL	kg/h	2374,5156	2374,5156	2087,2242	2066,9681	20,2562	65,8563	2001,1118	12774,0430
ETANOL	kg/h	102,1937	102,1937	0,0003	0,0003	0	0,0003	0,0000	11397,5514
AGUA	kg/h	14,2656	14,2656	0,0242	0,0192	0,0050	0	0,0192	792,8980
ACETALDE	kg/h	1508,5469	1508,5469	17,5148	17,5148	0,0000	17,3662	0,1486	17,5148
H2	kg/h	0	0	0,0009	0	0,0009	0	0	0
BUTANONA	kg/h	37,1091	37,1091	0,0001	0,0001	0	0,0001	0,0000	564,1225
PESADOS	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0,0004

ACETONA	kg/h	54,1317	54,1317	0,0001	0,0001	0	0,0001	0	0,0749
ACETATO	kg/h	387,9841	387,9841	0,0004	0,0004	0	0,0004	0	1,8809
13-BD	kg/h	18,0447	18,0447	2053,3606	2048,7087	4,6519	48,0296	2000,6792	0
ETILENO	kg/h	0	0	12,2057	0,2038	12,0020	0,0000	0,2038	0
PROPILEN	kg/h	0	0	3,6575	0,0611	3,5964	0,0000	0,0611	0
DEE	kg/h	252,2398	252,2398	0,4597	0,4597	0	0,4597	0	0
BUTANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0,0002
FRACCIÓN MÁSCICA									
ETANOL		0,0430	0,0430	0	0	0	0	0	0,8922
AGUA		0,0060	0,0060	0	0	0,0002	0	0	0,0621
ACETALDE		0,6353	0,6353	0,0084	0,0085	0,0000	0,2637	0,0001	0,0014
H2		0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANONA		0,0156	0,0156	0	0	0	0	0	0,0442
PESADOS		0	0	0	0	0	0	0	0
ACETONA		0,0228	0,0228	0	0	0	0	0	0
ACETATO		0,1634	0,1634	0	0	0	0	0	0,0001
13-BD		0,0076	0,0076	0,9838	0,9912	0,2297	0,7293	0,9998	0
ETILENO		0	0	0,0058	0,0001	0,5925	0	0,0001	0
PROPILEN		0	0	0,0018	0	0,1775	0	0	0
DEE		0,1062	0,1062	0,0002	0,0002	0	0,0070	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO VOLUMÉTRICO	m3/h	3,3100	361,4553	3,4698	3,5137	2,5181	0,1067	190,2124	17,1315

Planta de catalizador de Hf:Zn

Nº CORRIENTE	Unidad	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
De:		Exterior	MIX2	E-201	F-102	T-201	P-201	E-202	T-202	T-202	V-201
Hasta:		MIX2	E-201	T-201	T-201	P-201	E-202	T-202	T-204	V-201	T-203
Fase		L	L	L	V	L	L	L	V	L	L+V
Temperatura	°C	20	59,53	-20	0	15,48	15,61	56,51	41,08	95,97	77,26
Presión	bar	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	2,027	2,027	2,027	2,027	1,013
Fracción Vapor mol		0	0	0	1	0	0	0	1	0	0,072
Fracción Líquido mol		1	1	1	0	1	1	1	0	1	0,928
Densidad	kg/m3	812,351	765,682	856,924	1,089	786,486	786,346	736,819	4,147	717,921	20,202
Entalpia de corriente	Gcal/h	-8,023	-15,306	-15,822	0,755	-15,141	-15,140	-14,800	0,720	-15,027	-15,027
Peso Molec. medio	kg/kmol	42,99	43,01	43,01	24,40	44,56	44,56	44,56	53,46	43,06	43,06
FLUJO MOLAR TOT.	kmol/h	120,4090	233,8272	233,8272	108,8329	274,9146	274,9146	274,9146	39,6280	235,2866	235,2866
ETANOL	kmol/h	107,2001	206,7947	206,7947	0,0836	206,5380	206,5380	206,5380	2,0654	204,4726	204,4726
AGUA	kmol/h	13,2089	26,2377	26,2377	0,5626	26,7625	26,7625	26,7625	0	26,7625	26,7625
ACETALDE	kmol/h	0	0,0095	0,0095	3,2318	3,2411	3,2411	3,2411	1,3108	1,9303	1,9303
H2	kmol/h	0	0	0	57,9944	0,0296	0,0296	0,0296	0,0296	0	0
PESADOS	kmol/h	0	0,0132	0,0132	0,0136	0,0268	0,0268	0,0268	0	0,0268	0,0268
13-BD	kmol/h	0	0	0	35,9411	34,7333	34,7333	34,7333	34,3860	0,3473	0,3473
ETILENO	kmol/h	0	0	0	5,9161	0,0835	0,0835	0,0835	0,0835	0	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	2,4486	0,0929	0,0929	0,0929	0,0929	0	0
1-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0,7336	0,7334	0,7334	0,7334	0,7099	0,0235	0,0235
2-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0,6611	0,6611	0,6611	0,6611	0,6077	0,0533	0,0533
DEE	kmol/h	0	0	0	0,3423	0,3423	0,3423	0,3423	0,3422	0	0

BUTANOL	kmol/h	0	0,0007	0,0007	0,0008	0,0015	0,0015	0,0015	0	0,0015	0,0015
BUTANAL	kmol/h	0	0,7714	0,7714	0,9034	1,6685	1,6685	1,6685	0	1,6685	1,6685
DMF	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR											
ETANOL		0,8903	0,8844	0,8844	0,0008	0,7513	0,7513	0,7513	0,0521	0,8690	0,8690
AGUA		0,1097	0,1122	0,1122	0,0052	0,0973	0,0973	0,0973	0	0,1137	0,1137
ACETALDE		0	0	0	0,0297	0,0118	0,0118	0,0118	0,0331	0,0082	0,0082
H2		0	0	0	0,5329	0,0001	0,0001	0,0001	0,0007	0	0
PESADOS		0	0	0	0,0001	0	0	0	0	0,0001	0,0001
13-BD		0	0	0	0,3302	0,1263	0,1263	0,1263	0,8677	0,0015	0,0015
ETILENO		0	0	0	0,0544	0,0003	0,0003	0,0003	0,0021	0	0
PROPILEN		0	0	0	0,0225	0,0003	0,0003	0,0003	0,0023	0	0
1-BUTENO		0	0	0	0,0067	0,0027	0,0027	0,0027	0,0179	0,0001	0,0001
2-BUTENO		0	0	0	0,0061	0,0024	0,0024	0,0024	0,0153	0,0002	0,0002
DEE		0	0	0	0,0031	0,0012	0,0012	0,0012	0,0086	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANAL		0	0,0033	0,0033	0,0083	0,0061	0,0061	0,0061	0	0,0071	0,0071
DMF		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSIICO TOT.	kg/h	5176,569	10056,401	10056,401	2656,029	12250,663	12250,663	12250,663	2118,494	10132,169	10132,169
ETANOL	kg/h	4938,607	9526,832	9526,832	3,854	9515,008	9515,008	9515,008	95,150	9419,858	9419,858
AGUA	kg/h	237,9614	472,680	472,680	10,136	482,135	482,135	482,135	0	482,135	482,135
ACETALDE	kg/h	0	0,418	0,418	142,370	142,780	142,780	142,780	57,743	85,037	85,037
H2	kg/h	0	0	0	116,910	0,060	0,060	0,060	0,060	0	0
PESADOS	kg/h	0	0,793	0,793	0,819	1,611	1,611	1,611	0	1,611	1,611

13-BD	kg/h	0	0	0	1944,111	1878,781	1878,781	1878,781	1859,993	18,788	18,788
ETILENO	kg/h	0	0	0	165,968	2,344	2,344	2,344	2,344	0	0
PROPILEN	kg/h	0	0	0	103,037	3,911	3,911	3,911	3,911	0	0
1-BUTENO	kg/h	0	0	0	41,163	41,150	41,150	41,150	39,829	1,321	1,321
2-BUTENO	kg/h	0	0	0	37,093	37,092	37,092	37,092	34,099	2,993	2,993
DEE	kg/h	0	0	0	25,371	25,371	25,371	25,371	25,365	0,006	0,006
BUTANOL	kg/h	0	0,054	0,054	0,056	0,110	0,110	0,110	0	0,110	0,110
BUTANAL	kg/h	0	55,624	55,624	65,141	120,310	120,310	120,310	0	120,310	120,310
DMF	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MÁSCA											
ETANOL		0,954	0,9473	0,9473	0,0015	0,7767	0,7767	0,7767	0,0449	0,9297	0,9297
AGUA		0,046	0,0470	0,0470	0,0038	0,0394	0,0394	0,0394	0	0,0476	0,0476
ACETALDE		0	0	0	0,0536	0,0117	0,0117	0,0117	0,0273	0,0084	0,0084
H2		0	0	0	0,0440	0	0	0	0	0	0
PESADOS		0	0,0001	0,0001	0,0003	0,0001	0,0001	0,0001	0	0,0002	0,0002
13-BD		0	0	0	0,7320	0,1534	0,1534	0,1534	0,8780	0,0019	0,0019
ETILENO		0	0	0	0,0625	0,0002	0,0002	0,0002	0,0011	0	0
PROPILEN		0	0	0	0,0388	0,0003	0,0003	0,0003	0,0018	0	0
1-BUTENO		0	0	0	0,0155	0,0034	0,0034	0,0034	0,0188	0,0001	0,0001
2-BUTENO		0	0	0	0,0140	0,0030	0,0030	0,0030	0,0161	0,0003	0,0003
DEE		0	0	0	0,0096	0,0021	0,0021	0,0021	0,0120	0	0
BUTANOL		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANAL		0	0,0055	0,0055	0,0245	0,0098	0,0098	0,0098	0	0,0119	0,0119
DMF		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

FLUJO VOLUMÉTRICO	m3/h	6,372	13,134	11,735	2439,339	15,576	15,579	16,626	510,892	14,113	501,552
--------------------------	-------------	--------------	---------------	---------------	-----------------	---------------	---------------	---------------	----------------	---------------	----------------

N° CORRIENTE	Unidad	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
De:		T-203	T-203	V-202	SET	R-101	E-101	E-102	F-101	F-101	E-103
Hasta:		Exterior	V-202	SET	R-101	E-101	E-102	F-101	E-103	MIX1	F-102
Fase		L	L	L+V	L+V	V	V	L+V	V	L	L+V
Temperatura	°C	53	95,29	78,05	78,05	360	235	35	35	35	0
Presión	bar	1,925	1,925	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013
Fracción Vapor mol		0	0	0,066	0,066	1	1	0,542	1	0	0,94
Fracción Líquido mol		1	1	0,934	0,934	0	0	0,458	0	1	0,06
Densidad	kg/m3	737,354	719,769	22,002	22,002	0,807	0,690	1,720	0,974	958,697	1,169
Entalpia de corriente	Gcal/h	-0,239	-14,802	-14,802	-7,519	-2,293	-4,248	-6,503	0,415	-6,918	0,297
Peso Molecular medio	kg/kmol	44,90	43,03	43,03	43,03	23,60	23,60	23,60	24,64	22,38	24,64
FLUJO MOLAR TOT.	kmol/h	4,7618	230,5249	230,5249	117,1066	213,4637	213,4637	213,4637	115,7865	97,6772	115,7865
ETANOL	kmol/h	2,0447	202,4279	202,4279	102,8334	0,8227	0,8227	0,8227	0,2918	0,5310	0,2918
AGUA	kmol/h	0,2811	26,4814	26,4814	13,4526	93,1304	93,1304	93,1304	5,8027	87,3277	5,8027
ACETALDE	kmol/h	1,9110	0,0193	0,0193	0,0098	4,0897	4,0897	4,0897	3,4956	0,5941	3,4956
H2	kmol/h	0	0	0	0	57,9957	57,9957	57,9957	57,9946	0,0011	57,9946
PESADOS	kmol/h	0	0,0268	0,0268	0,0136	8,1747	8,1747	8,1747	0,3074	7,8673	0,3074
13-BD	kmol/h	0,3473	0	0	0	36,2122	36,2122	36,2122	36,0888	0,1234	36,0888
ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	5,9167	5,9167	5,9167	5,9162	0,0004	5,9162
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	2,4489	2,4489	2,4489	2,4487	0,0002	2,4487
1-BUTENO	kmol/h	0,0235	0	0	0	0,9691	0,9691	0,9691	0,7892	0,1799	0,7892
2-BUTENO	kmol/h	0,0533	0	0	0	0,9691	0,9691	0,9691	0,7355	0,2336	0,7355

DEE	kmol/h	0	0	0	0	0,3571	0,3571	0,3571	0,3501	0,0070	0,3501
BUTANOL	kmol/h	0	0,0015	0,0015	0,0008	0,2048	0,2048	0,2048	0,0300	0,1748	0,0300
BUTANAL	kmol/h	0,1006	1,5679	1,5679	0,7965	2,1725	2,1725	2,1725	1,5358	0,6367	1,5358
DMF	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MOLAR											
ETANOL		0,4294	0,8781	0,8781	0,8781	0,0039	0,0039	0,0039	0,0025	0,0054	0,0025
AGUA		0,0590	0,1149	0,1149	0,1149	0,4363	0,4363	0,4363	0,0501	0,8940	0,0501
ACETALDE		0,4013	0	0	0	0,0192	0,0192	0,0192	0,0302	0,0061	0,0302
H2		0	0	0	0	0,2717	0,2717	0,2717	0,5009	0	0,5009
PESADOS		0	0,0001	0,0001	0,0001	0,0383	0,0383	0,0383	0,0027	0,0805	0,0027
13-BD		0,0729	0	0	0	0,1696	0,1696	0,1696	0,3117	0,0013	0,3117
ETILENO		0	0	0	0	0,0277	0,0277	0,0277	0,0511	0	0,0511
PROPILEN		0	0	0	0	0,0115	0,0115	0,0115	0,0211	0	0,0211
1-BUTENO		0,0049	0	0	0	0,0045	0,0045	0,0045	0,0068	0,0018	0,0068
2-BUTENO		0,0112	0	0	0	0,0045	0,0045	0,0045	0,0064	0,0024	0,0064
DEE		0	0	0	0	0,0017	0,0017	0,0017	0,0030	0,0001	0,0030
BUTANOL		0	0	0	0	0,0010	0,0010	0,0010	0,0003	0,0018	0,0003
BUTANAL		0,0211	0,0068	0,0068	0,0068	0,0102	0,0102	0,0102	0,0133	0,0065	0,0133
DMF		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO MÁSIKO TOT.	kg/h	213,811	9918,359	9918,359	5038,526	5038,526	5038,526	5038,526	2852,927	2185,599	2852,927
ETANOL	kg/h	94,199	9325,660	9325,660	4737,435	37,903	37,903	37,903	13,441	24,462	13,441
AGUA	kg/h	5,065	477,070	477,070	242,352	1677,771	1677,771	1677,771	104,538	1573,233	104,538
ACETALDE	kg/h	84,187	0,850	0,850	0,432	180,163	180,163	180,163	153,993	26,170	153,993
H2	kg/h	0	0	0	0	116,912	116,912	116,912	116,910	0,002	116,910

PESADOS	kg/h	0	1,611	1,611	0,818	490,910	490,910	490,910	18,461	472,450	18,461
13-BD	kg/h	18,788	0	0	0	1958,776	1958,776	1958,776	1952,102	6,675	1952,102
ETILENO	kg/h	0	0	0	0	165,985	165,985	165,985	165,973	0,012	165,973
PROPILEN	kg/h	0	0	0	0	103,051	103,051	103,051	103,042	0,009	103,042
1-BUTENO	kg/h	1,321	0	0	0	54,376	54,376	54,376	44,280	10,095	44,280
2-BUTENO	kg/h	2,993	0	0	0	54,376	54,376	54,376	41,267	13,108	41,267
DEE	kg/h	0,006	0	0	0	26,468	26,468	26,468	25,950	0,518	25,950
BUTANOL	kg/h	0	0,110	0,110	0,056	15,183	15,183	15,183	2,226	12,957	2,226
BUTANAL	kg/h	7,253	113,057	113,057	57,433	156,652	156,652	156,652	110,744	45,908	110,744
DMF	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRACCIÓN MÁSCA											
ETANOL		0,4406	0,9402	0,9402	0,9402	0,0075	0,0075	0,0075	0,0047	0,0112	0,0047
AGUA		0,0237	0,0481	0,0481	0,0481	0,3330	0,3330	0,3330	0,0366	0,7198	0,0366
ACETALDE		0,3937	0,0001	0,0001	0,0001	0,0358	0,0358	0,0358	0,0540	0,0120	0,0540
H2		0	0	0,0000	0	0,0232	0,0232	0,0232	0,0410	0	0,0410
PESADOS		0	0,0002	0,0002	0,0002	0,0974	0,0974	0,0974	0,0065	0,2162	0,0065
13-BD		0,0879	0	0,0000	0	0,3888	0,3888	0,3888	0,6842	0,0031	0,6842
ETILENO		0	0	0,0000	0	0,0329	0,0329	0,0329	0,0582	0	0,0582
PROPILEN		0	0	0,0000	0	0,0205	0,0205	0,0205	0,0361	0	0,0361
1-BUTENO		0,0062	0	0,0000	0	0,0108	0,0108	0,0108	0,0155	0,0046	0,0155
2-BUTENO		0,0140	0	0,0000	0	0,0108	0,0108	0,0108	0,0145	0,0060	0,0145
DEE		0	0	0,0000	0	0,0053	0,0053	0,0053	0,0091	0,0002	0,0091
BUTANOL		0	0	0,0000	0	0,0030	0,0030	0,0030	0,0008	0,0059	0,0008
BUTANAL		0,0339	0,0114	0,0114	0,0114	0,0311	0,0311	0,0311	0,0388	0,0210	0,0388

DMF		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FLUJO VOLUMÉTRICO	m3/h	0,2900	13,7799	450,7895	229,0011	6240,1798	7301,3579	2930,0069	2927,7272	2,2798	2439,5530

N° CORRIENTE	Unidad	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
De:		F-102	T-201	SET	A-201	A-201	E-203	T-204	T-204	V-203	T-205
Hasta:		MIX1	A-201	MIX2	Exterior	Exterior	T-204	Exterior	V-203	T-205	Exterior
Fase		L	V	L+V	V	L+V	L	V	L	L+V	V
Temperatura	°C	0	-13,38	78,05	-13,38	-13,38	41,08	14,74	160,99	144,77	131,69
Presión	bar	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	2,027	2,027	2,027	1,013	1,013
Fracción Vapor mol		0	1	0,066	1	0,963	0	1	0	0,088	1
Fracción Líquido mol		1	0	0,934	0	0,037	1	0	1	0,912	0
Densidad	kg/m3	921,648	0,320	22,002	0,095	1,722	929,250	4,568	795,596	23,515	1,883
Entalpia de corriente	Gcal/h	-0,458	0,075	-7,282	-0,017	0,089	-11,973	0,884	-11,125	-11,125	-0,437
Peso Molecular medio	kg/kmol	28,32	6,82	43,03	2,03	35,33	73,05	53,96	72,50	72,50	62,56
FLUJO MOLAR TOT.	kmol/h	6,9535	67,7455	113,4182	58,0025	9,7430	212,1400	34,4000	217,3680	217,3680	11,3680
ETANOL	kmol/h	0,2081	0,3404	99,5945	0	0,3404	0,352	0	2,4173	2,4173	2,0653
AGUA	kmol/h	5,2401	0,0377	13,0289	0,0377	0	0	0	0	0	0
ACETALDE	kmol/h	0,2638	0,0001	0,0095	0	0,0001	0	0	1,3108	1,3108	1,3108
H2	kmol/h	0,0002	57,9648	0	57,9648	0	0	0,0296	0	0	0
PESADOS	kmol/h	0,2938	0	0,0132	0	0	0	0	0	0	0
13-BD	kmol/h	0,1477	1,2078	0	0	1,2078	0	34,0935	0,2925	0,2925	0,2925
ETILENO	kmol/h	0,0002	5,8325	0	0	5,8325	0	0,0835	0	0	0
PROPILEN	kmol/h	0,0001	2,3556	0	0	2,3556	0	0,0926	0,0004	0,0004	0,0004
1-BUTENO	kmol/h	0,0556	0,0002	0	0	0,0002	0	0,0989	0,611	0,611	0,611

2-BUTENO	kmol/h	0,0744	0	0	0	0	0	0	0,6077	0,6077	0,6077
DEE	kmol/h	0,0078	0	0	0	0	0	0	0,3423	0,3423	0,3422
BUTANOL	kmol/h	0,0293	0	0,0007	0	0	0	0	0	0	0
BUTANAL	kmol/h	0,6324	0,0063	0,7714	0	0,0063	0	0	0	0	0
DMF	kmol/h	0	0	0	0	0	211,7879	0,0018	211,7861	211,7861	6,1382
FRACCIÓN MOLAR											
ETANOL		0,0299	0,0050	0,8781	0	0,0349	0,0017	0	0,0111	0,0111	0,1817
AGUA		0,7536	0,0006	0,1149	0,0006	0	0	0	0	0	0
ACETALDE		0,0379	0	0,0001	0	0	0	0	0,0060	0,0060	0,1153
H2		0	0,8556	0	0,9994	0	0	0,0009	0	0	0
PESADOS		0,0422	0,0000	0,0001	0	0	0	0	0	0	0
13-BD		0,0212	0,0178	0	0	0,1240	0	0,9911	0,0013	0,0013	0,0257
ETILENO		0	0,0861	0	0	0,5986	0	0,0024	0	0	0
PROPILEN		0	0,0348	0	0	0,2418	0	0,0027	0	0	0
1-BUTENO		0,0080	0	0	0	0	0	0,0029	0,0028	0,0028	0,0537
2-BUTENO		0,0107	0	0	0	0	0	0	0,0028	0,0028	0,0535
DEE		0,0011	0	0	0	0	0	0	0,0016	0,0016	0,0301
BUTANOL		0,0042	0	0	0	0	0	0	0	0	0
BUTANAL		0,0910	0,0001	0,0068	0	0,0006	0	0	0	0	0
DMF		0	0	0	0	0	0,9983	0	0,9743	0,9743	0,5400
FLUJO MÁSICO TOT.	kg/h	196,899	461,764	4879,832	117,529	344,235	15496,799	1856,159	15759,134	15759,134	711,135
ETANOL	kg/h	9,587	15,682	4588,225	0	15,682	16,217	0,004	111,363	111,363	95,146
AGUA	kg/h	94,402	0,679	234,718	0,678615474	0	0	0	0	0	0
ACETALDE	kg/h	11,623	0,006	0,418	0	0,006	0	0	57,743	57,743	57,743

H2	kg/h	0,000	116,850	0	116,8501042	0	0	0,060	0	0	0
PESADOS	kg/h	17,642	0,000	0,793	0	0,0000	0	0	0	0	0
13-BD	kg/h	7,990	65,331	0	0	65,331	0	1844,173	15,820	15,820	15,820
ETILENO	kg/h	0,005	163,624	0	0	163,624	0	2,344	0	0	0
PROPILEN	kg/h	0,006	99,125	0	0	99,125	0	3,895	0,016	0,016	0,016
1-BUTENO	kg/h	3,117	0,012	0	0	0,012	0	5,547	34,283	34,283	34,283
2-BUTENO	kg/h	4,175	0,000	0	0	0	0	0,004	34,095	34,095	34,095
DEE	kg/h	0,579	0,000	0	0	0	0,005	0	25,370	25,370	25,365
BUTANOL	kg/h	2,170	0,000	0,054	0	0	0	0	0	0	0
BUTANAL	kg/h	45,603	0,453	55,624	0	0,453	0	0	0	0	0
DMF	kg/h	0	0	0	0	0	15480,577	0,132	15480,445	15480,445	448,668
FRACCIÓN MÁSCICA											
ETANOL		0,0487	0,0340	0,9402	0	0,0456	0,0010	0	0,0071	0,0071	0,1338
AGUA		0,4794	0,0015	0,0481	0,0058	0	0	0	0	0	0
ACETALDE		0,0590	0	0,0001	0	0	0	0	0,0037	0,0037	0,0812
H2		0	0,2531	0	0,9942	0	0	0	0	0	0
PESADOS		0,0896	0	0,0002	0	0	0	0	0	0	0
13-BD		0,0406	0,1415	0	0	0,1898	0	0,9935	0,0010	0,0010	0,0222
ETILENO		0	0,3543	0	0	0,4753	0	0,0013	0	0	0
PROPILEN		0	0,2147	0	0	0,2880	0	0,0021	0	0	0
1-BUTENO		0,0158	0	0	0	0	0	0,0030	0,0022	0,0022	0,0482
2-BUTENO		0,0212	0	0	0	0	0	0	0,0022	0,0022	0,0479
DEE		0,0029	0	0	0	0	0	0	0,0016	0,0016	0,0357
BUTANOL		0,0110	0	0	0	0	0	0	0	0	0

BUTANAL		0,2316	0,0010	0,0114	0	0,0013	0	0	0	0	0
DMF		0	0	0	0	0	0,9990	0,0001	0,9823	0,9823	0,6309
FLUJO VOLUMÉTRICO	m3/h	0,2136	1444,0568	221,7884	1236,3763	199,9317	16,6767	406,3129	19,8080	670,1689	377,6394

Nº CORRIENTE	Unidad	31	32	33	34	35	36
De:		T-205	Exterior	MIX22	P-202	E-101	MIX1
Hasta:		MIX22	MIX22	P-202	E-203	R-101	Exterior
Fase		L	L	L	L	V	L
Temperatura	°C	151,2	20	147,89	147,98	340	32,47
Presión	bar	1,013	1,013	1,013	2,027	1,013	1,013
Fracción Vapor mol		0	0	0	0	1	0
Fracción Líquido mol		1	1	1	1	0	1
Densidad	kg/m3	813,02	950,052	816,807	816,7	1,722	946,542
Entalpia de corriente	Gcal/h	-10,712	-0,351	-11,063	-11,062	-5,564	-6,638
Peso Molec. medio	kg/kmol	73,05	73,09	73,05	73,05	24,64	23,81
FLUJO MOLAR TOT.	kmol/h	206	6,14	212,14	212,14	120,3717	104,6307
ETANOL	kmol/h	0,352	0	0,352	0,352	99,8026	0,7391
AGUA	kmol/h	0	0	0	0	18,269	92,5678
ACETALDE	kmol/h	0	0	0	0	0,2733	0,8579
H2	kmol/h	0	0	0	0	0,0002	0,0013
PESADOS	kmol/h	0	0	0	0	0,307	8,1611
13-BD	kmol/h	0	0	0	0	0,1477	0,2711

ETILENO	kmol/h	0	0	0	0	0,0002	0,0006
PROPILEN	kmol/h	0	0	0	0	0,0001	0,0003
1-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0	0,0556	0,2355
2-BUTENO	kmol/h	0	0	0	0	0,0744	0,308
DEE	kmol/h	0	0	0	0	0,0078	0,0148
BUTANOL	kmol/h	0	0	0	0	0,03	0,2041
BUTANAL	kmol/h	0	0	0	0	1,4038	1,2691
DMF	kmol/h	205,6479	6,14	211,7879	211,7879	0	0
FRACCIÓN MOLAR							
ETANOL		0,0017	0	0,0017	0,0017	0,8291	0,00706
AGUA		0	0	0	0	0,1518	0,88471
ACETALDE		0	0	0	0	0,0023	0,00820
H2		0	0	0	0	0	0,00001
PESADOS		0	0	0	0	0,0026	0,07800
13-BD		0	0	0	0	0,0012	0,00259
ETILENO		0	0	0	0	0	0,00001
PROPILEN		0	0	0	0	0	0
1-BUTENO		0	0	0	0	0,0005	0,00225
2-BUTENO		0	0	0	0	0,0006	0,00294
DEE		0	0	0	0	0,0001	0,00014
BUTANOL		0	0	0	0	0,0002	0,00195
BUTANAL		0	0	0	0	0,0117	0,01213
DMF		0,9983	1	0,9983	0,9983	0	0

FLUJO MÁSICO TOT.	kg/h	15047,999	448,8	15496,799	15496,799	5076,73109	2382,498
ETANOL	kg/h	16,217	0	16,217	16,217	4597,812	34,049
AGUA	kg/h	0	0	0	0	329,121	1667,635
ACETALDE	kg/h	0	0	0	0	12,041	37,793
H2	kg/h	0	0	0	0	0	0,002
PESADOS	kg/h	0	0	0	0	18,434	490,092
13-BD	kg/h	0	0	0	0	7,99	14,665
ETILENO	kg/h	0	0	0	0	0,005	0,017
PROPILEN	kg/h	0	0	0	0	0,006	0,015
1-BUTENO	kg/h	0	0	0	0	3,117	13,212
2-BUTENO	kg/h	0	0	0	0	4,175	17,283
DEE	kg/h	0,005	0	0,005	0,005	0,579	1,097
BUTANOL	kg/h	0	0	0	0	2,225	15,127
BUTANAL	kg/h	0	0	0	0	101,227	91,511
DMF	kg/h	15031,777	448,8	15480,577	15480,577	0	0
FRACCIÓN MÁSICA							
ETANOL		0,0011	0	0,001	0,001	0,9057	0,0142913
AGUA		0	0	0	0	0,0648	0,69995232
ACETALDE		0	0	0	0	0,0024	0,01586276
H2		0	0	0	0	0	8,3946E-07
PESADOS		0	0	0	0	0,0036	0,2057051
13-BD		0	0	0	0	0,0016	0,0061553

ETILENO		0	0	0	0	0	0
PROPILEN		0	0	0	0	0	0
1-BUTENO		0	0	0	0	0,0006	0,00554544
2-BUTENO		0	0	0	0	0,0008	0,00725415
DEE		0	0	0	0	0,0001	0,00046044
BUTANOL		0	0	0	0	0,0004	0,00634922
BUTANAL		0	0	0	0	0,0199	0,03840969
DMF		0,9989	1	0,999	0,999	0	0
FLUJO VOLUMÉTRICO	m3/h	18,5088	0,4724	18,9724	18,9749	222,0021	2,4934

PLANTA DE CATALIZADOR DE Y:Zn

NÚMERO DE CORRIENTE	Unidades	1	2	3	4	5	6	7	8	9
De:		Exterior	E-101	R-101	E-101E	E-102	F-101	F-101	A-101	A-101
Hasta:		E-101	R-101	E-101E	E-102	F-101	A-101	Exterior	Exterior	C-201
Fase		L	V	V	L+V	L+V	V	L	L+V	V
Temperatura	°C	20	340	350	52,34	35	18,31	18,31	-77	35
Presión	bar	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	22	1,013
Fracción Vapor mol		0	1	1	0,532	0,494	1	0	0,956	1
Fracción Líquido mol		1	0	0	0,468	0,506	0	1	0,044	0
Densidad	kg/L	820,12	0,86	0,43	1,56	1,78	1,11	1000,04	3,78	1,94
Entalpia de corriente	cal/s	-22416801	-1675144	-1380625	-1947162	-1993499	302012	-2295511	-55976	343007
Peso Molecular medio	kg/kmol	42,98	42,98	22,18	22,18	22,18	26,65	18,03	2,72	48,21
FLUJO MOLAR TOT.	kmol/h	120,450	120,450	233,396	233,396	233,396	112,496	120,900	53,316	59,180

ETANOL	kmol/h	107,2	107,2	0	0	0	0	0	0	0
AGUA	kmol/h	13,25	13,25	123,200	123,200	123,200	2,337	120,863	2,337	0
PROPILEN	kmol/h	0	0	8,772	8,772	8,772	8,771	0,001	0	8,771
ETILENO	kmol/h	0	0	9,320	9,320	9,320	9,319	0,001	0	9,319
H2	kmol/h	0	0	50,980	50,980	50,980	50,979	0,001	50,979	0
13BD	kmol/h	0	0	41,124	41,124	41,124	41,090	0,034	0	41,090
FRACCIÓN MOLAR										
ETANOL		0,89	0,89	0	0	0	0	0	0	0
AGUA		0,11	0,11	0,528	0,528	0,528	0,021	1,000	0,044	0
PROPILEN		0	0	0,038	0,038	0,038	0,078	0	0	0,148
ETILENO		0	0	0,040	0,040	0,040	0,083	0	0	0,157
H2		0	0	0,218	0,218	0,218	0,453	0	0,956	0
13BD		0	0	0,176	0,176	0,176	0,365	0	0	0,694
FLUJO MÁSSICO TOT.	kg/h	5177,304	5177,304	5177,304	5177,304	5177,304	2998,018	2179,286	144,865	2853,153
ETANOL	kg/h	4938,601	4938,601	0	0	0	0	0	0	0
AGUA	kg/h	238,702	238,702	2219,478	2219,478	2219,478	42,096	2177,382	42,096	0
PROPILEN	kg/h	0	0	369,124	369,124	369,124	369,069	0,055	0	369,069
ETILENO	kg/h	0	0	261,463	261,463	261,463	261,435	0,028	0	261,435
H2	kg/h	0	0	102,770	102,770	102,770	102,768	0,002	102,768	0
13BD	kg/h	0	0	2224,469	2224,469	2224,469	2222,650	1,819	0	2222,65
FRACCIÓN MÁSSICA										
ETANOL		0,954	0,954	0	0	0	0	0	0	0
AGUA		0,046	0,046	0,429	0,429	0,429	0,014	0,999	0,290592	0
PROPILEN		0	0	0,071	0,071	0,071	0,123	0	0	0,12935

ETILENO		0	0	0,051	0,051	0,051	0,087	0	0	0,09163
H2		0	0	0,020	0,020	0,020	0,034	0	0,70941	0
13BD		0	0	0,430	0,430	0,430	0,741	0,001	0	0,779015
FLUO VOLUMÉTRICO	l/min	105,214	100754	198866,6	55162,4675	48348,421	44841,178	36,31989	639,1547	24515,045

Stream Name	Unidades	10	11	12	13	14	15	16	17
De:		C-201	E-201	E-202	T-201	T-201	V-201	T-202	T-202
Hasta:		E-201	E-202	T-201		V-201	T-202		
Fase		V	L+V	L	L	L	L+V	V	L
Temperatura	°C	159,87	35	7,46	-47,01	41,7	39,84	35,07	46,28
Presión	bar	11,652	11,652	11,652	11,652	11,652	6,383	6,383	6,383
Fracción Vapor mol		1	0,207	0	0	0	0,024	1	0
Fracción Líquido mol		0	0,793	1	1	1	0,976	0	1
Densidad	kg/L	14,10	0,10	0,71	0,46	0,55	0,29	0,01	0,58
Entalpia de corriente	cal/s	384887	18179	-189637	23270	18300	18300	14359	240999
Peso Molec. medio	kg/kmol	48,21	48,21	48,21	28,19	51,95	51,95	42,48	54,07
FLUJO MOLAR TOT.	kmol/h	59,180	59,180	59,180	9,314	49,866	49,866	9,100	40,766
ETANOL	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0
AGUA	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kmol/h	8,7705	8,7705	8,7705	0,0877	8,6828	8,6828	8,5960	0,0868
ETILENO	kmol/h	9,3191	9,3191	9,3191	9,2259	0,0932	0,0932	0,0932	0
H2	kmol/h	0	0	0	0	0	0	0	0
13BD	kmol/h	41,090	41,090	41,090	0	41,090	41,090	0,411	40,679
FRACCIÓN MOLAR									

ETANOL		0	0	0	0	0	0	0	0
AGUA		0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN		0,148	0,148	0,148	0,009	0,174	0,174	0,945	0,002
ETILENO		0,157	0,157	0,157	0,991	0,002	0,002	0,010	0
H2		0	0	0	0	0	0	0	0
13BD		0,694	0,694	0,694	0	0,824	0,824	0,045	0,998
FLUJO MÁSICO TOT.	kg/h	2853,154	2853,154	2853,154	262,515	2590,639	2590,639	386,565	2204,073
ETANOL	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0
AGUA	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN	kg/h	369,069	369,069	369,069	3,691	365,378	365,378	361,725	3,654
ETILENO	kg/h	261,435	261,435	261,435	258,820	2,614	2,614	2,614	0
H2	kg/h	0	0	0	0	0	0	0	0
13BD	kg/h	2222,650	2222,650	2222,650	0,004	2222,646	2222,646	22,226	2200,420
FRACCIÓN MÁSICA									
ETANOL		0	0	0	0	0	0	0	0
AGUA		0	0	0	0	0	0	0	0
PROPILEN		0,129	0,129	0,129	0,014	0,141	0,141	0,936	0,002
ETILENO		0,092	0,092	0,092	0,986	0,001	0,001	0,007	0
HYDRO-01		0	0	0	0	0	0	0	0
13BD		0,7790	0,7790	0,7790	0	0,8580	0,8580	0,0575	0,9983
Volume Flow	l/min	3371,41	482,31	67,34	9,44	77,85	147,81	553,48	63,68

ANEXO VIII: Resultado del costes de los equipos

PLANTA CON CATALIZADOR DE Ta2O3

ÍTEM	Magnitud	Valor	C _x ⁰ (\$)	C _x (\$)	Coste instalado (\$)
E-101	A (m2)	9,52	4241,6	6358,7	12081,5
E-102	A (m2)	9,68	4271,3	6403,2	12166,2
E-103	A (m2)	12,71	4806,2	7205,1	13689,6
E-104	A (m2)	150,68	22281,7	33403,1	63465,8
E-201	A (m2)	98,74	16160,6	24226,8	46030,9
E-202	A (m2)	29,15	7329,4	10987,7	20876,6
E-301	A (m2)	36,97	9256,9	13877,3	26366,9
E-302	A (m2)	8,48	4048,1	6068,7	11530,5
E-303	A (m2)	119,93	20544,6	30799,0	58518,0
H-101	Q (kW)	561,85	54348,5	81475,5	105918,1
H-201	Q (kW)	570,34	55053,7	82532,7	107292,4
R-101	Q (kW)	1043,07	92525,8	138708,0	180320,4
R-201	Q (kW)	396,64	40283,7	60390,5	78507,6
C-201	Pot (kW)	93,407	160688,0	240892,0	313159,6
C-101	Pot (kW)	97,796	165328,3	247848,4	322202,9
P-201	Q (L/min) H (m)	175,1/12,64	5030,1	7540,8	21114,3
P-202	Q (L/min) H (m)	59/26,6	5188,9	7778,8	21780,6
P-301	Q (L/min) H (m)	326,6/37,9	5070,1	7600,8	21282,1
F-301	D,L (m) / W(kg)	0,914/3,66/1134	32238,2	48329,1	82159,5
F-103	D,L (m) / W(kg)	0,914/3,66/1179	32778,9	49139,9	83537,8
F-201	D,L (m) / W(kg)	1,219/3,66/1542,2	36958,1	55404,9	94188,4
F-101	D,L (m) / W(kg)	1,219/3,66/1563,1	37182,6	55741,5	94760,6
T-202	D,L(m)/W(kg)/N	0,76/15,9/5035/30	144758,7	217012,0	
T-202-cond	A (m2)	33,01	7871,9	11800,9	748850,5
T-202-reb	A (m2)	16,14	13877,4	20803,9	
T-101	D,L(m)/W(kg)/N	0,46/18,9/7938/20	165695,9	248399,5	
T-101-cond	A (m2)	31,67	7685,2	11521,1	816767,6
T-101-reb	A (m2)	2,05	8228,3	12335,3	
T-302	D,L(m)/W(kg)/N	0,91/19,5/14801/20	247529,1	371078,0	
T-302-cond	A (m2)	3,9	3409,2	5110,8	1289729,3
T-302-reb	A (m2)	100,6	35834,8	53721,0	

T-301	D,L(m)/W(kg)/N	1,1/19,5/16897/20	270999,0	406262,4	
T-301-cond	A (m2)	69,75	13901,8	20840,7	1391745,7
T-301-reb	A (m2)	53,59	24555,7	36812,2	
T-201	D,L(m)/W(kg)/N	0,46/14,6/4082/22	117523,7	176183,2	
T-201-cond	A (m2)	65,823	12149,9	18214,2	633446,6
T-201-reb	A (m2)	8,72	11174,1	16751,5	
T-303	D,L(m)/W(kg)/N	0,46/19,5/10437/20	193238,1	289688,7	
T-303-cond	A (m2)	1,09	2389,1	3581,5	917501,9
T-303-reb	A (m2)	2,38	8380,7	12563,7	
T-102	D,L(m)/W(kg)/N	0,61/23,2/12701/22	223113,5	334475,8	1003427,5
T-203	D,L(m)/W(kg)/N	0,91/15,9/6078/30	162326,8	243348,8	
T-203-cond	A (m2)	148,22	24194,5	36270,7	899781,1
T-203-reb	A (m2)	15,17	13546,3	20307,6	
COSTE INSTALADO TOTAL (\$)					9492200,7

PLANTA CON CATALIZADOR DE ZrO2

ÍTEM	Magnitud	Valor	C _x ⁰ (\$)	C _x (\$)	Coste instalado (\$)
E-101	A (m2)	119,699812	18650,2	27959,1	53122,2
E-102	A (m2)	143,357991	21427,2	32122,1	61032,1
E-103	A (m2)	15,2044776	5223,3	7830,5	14877,9
E-104	A (m2)	149,38982	22131,5	33178,0	63038,2
E-201	A (m2)	160,183656	23389,1	35063,3	66620,3
E-202	A (m2)	68,2498494	12451,9	18667,1	35467,4
H-101	Q (Kw)	543,413	52811,1	79170,6	102921,8
R-101	Q (Kw)	1008,92	89914,5	134793,5	175231,5
R-201	Q (Kw)	545,732	53004,8	79461,1	103299,4
C-201	Pot (kW)	94,6122	161970,3	242814,3	315658,6
P-201	Q (L/min) H (m)	455,8/28,8	5113,3	7665,4	17630,5
P-202	Q (L/min) H (m)	127,2/31,2	5016,2	7519,9	17295,8
F-102	D,L (m) / W(kg)	0,91/3,7/1179	32779,0	49140,0	83538,0
F-201	D,L (m) / W(kg)	1,4/4,1/1859,8	40357,9	60501,7	102852,9
F-101	D,L (m) / W(kg)	0,91/3,7/1179	32779,0	49140,0	83538,0
T-203	D,L(m)/W(kg)/N	0,61/29,9/29121/32	379710,0	569234,2	
T-203-cond	A (m2)	59,688	11379,8	17059,8	1804755,8
T-203-reb	A (m2)	6,356	10200,1	15291,2	

T-201	D,L(m)/W(kg)/N	0,61/33,5/40325/36	472022,6	707622,6	
T-201-cond	A (m2)	81,076	14029,2	21031,6	2246450,8
T-201-reb	A (m2)	14,89	13449,7	20162,8	
T-202	D,L(m)/W(kg)/N	0,61/37,2/62869/40	638856,1	957727,5	
T-202-cond	A (m2)	57,932	11157,6	16726,6	2998645,5
T-202-reb	A (m2)	25,118	16739,3	25094,4	
T-101	D,L(m)/W(kg)/N	0,46/17,7/7303/18	157573,8	236223,4	
T-101-cond	A (m2)	20,51	6060,6	9085,6	772276,3
T-101-reb	A (m2)	1,716	8082,3	12116,4	
T-102	D,L(m)/W(kg)/N	0,61/23,2/12701/22	223117,6	334481,9	1003445,8
T-301	D,L(m)/W(kg)/N	0,46/23,8/18947/25	280627,3	420696,5	
T-301-cond	A (m2)	7,816	3921,0	5878,2	1327245,0
T-301-reb	A (m2)	7,224	10566,4	15840,3	
T-302	D,L(m)/W(kg)/N	0,61/25,6/25515/27	344170,7	515956,1	
T-302-cond	A (m2)	33,398	7925,6	11881,5	1810526,6
T-302-reb	A (m2)	166,807	50476,8	75671,2	
COSTE INSTALADO TOTAL (\$)					13259470,4

PLANTA CON CATALIZADOR DE Hf:Zn

ÍTEM	Magnitud	Valor	C _x ⁰ (\$)	C _x (\$)	Coste instalado (\$)
E-101	A (m2)	42,6	9170,4	13747,6	26120,5
E-102	A (m2)	34,5	8070,9	12099,3	22988,7
E-103	A (m2)	29,7	7412,3	11112,0	21112,8
E-201	A (m2)	240,8	32735,1	49074,1	93240,9
E-202	A (m2)	93,8	15563,7	23332,0	44330,9
E-203	A (m2)	44,1	9363,7	14037,4	26671,1
R-101	Q (Kw)	3804,7	281569,6	422109,0	548741,7
P-201	Q (L/min) H (m)	259,6/13,1	5002,3	7499,1	20997,4
P-202	Q (L/min) H (m)	316,2/12,6	5004,3	7502,1	21006,0
F-101	D,L (m) / W(kg)	0,91/3,7/1179	32777,8	49138,1	83534,7
F-102	D,L (m) / W(kg)	0,91/3,7/1179	32777,8	49138,1	83534,7
T-201	D,L(m)/W(kg)/N	0,61/21,3/5035/20	135029,6	202426,7	607280,1
T-202	D,L(m)/W(kg)/N	0,45/15,8/10796/16	194730,6	291926,2	
T-202-cond	A (m2)	81,1	14384,9	21564,8	986871,9
T-202-reb	A (m2)	14,9	10316,9	15466,3	

T-203	D,L(m)/W(kg)/N	0,46/17,7/7258/18	157111,9	235531	756459,3
T-203-cond	A (m2)	57,9	2568,4	3850,3	
T-203-reb	A (m2)	25,1	8519,5	12771,8	
T-205	D,L(m)/W(kg)/N	0,61/23,8/20062/25	294823,4	441978,2	1513002,5
T-205-cond	A (m2)	20,5	2943,4	4412,5	
T-205-reb	A (m2)	1,7	38651,5	57943,5	
T-204	D,L(m)/W(kg)/N	1,1/23,8/26331/25	362752,8	543813,1	2359902,8
T-204-cond	A (m2)	7,8	23263,0	34874,2	
T-204-reb	A (m2)	7,2	138711,8	207946,9	
A-201	D,L(m)/P(kW)	1,1/7,3/995	701915,7	1052262	1788845,4
COSTE INSTALADO TOTAL (\$)					13259470,4

PLANTA CON CATALIZADOR DE Y:Zn

ÍTEM	Magnitud	Valor	C_x^0	C_x	Coste instalado (\$)
			(\$)	(\$)	
E-101	A (m2)	53,2	10547,6	15812,2	30043,1
E-102	A (m2)	9,2	4186,8	6276,5	11925,4
E-201	A (m2)	27,1	21097,4	31627,7	60092,7
E-202	A (m2)	338,2	132232,0	198232,8	376642,2
R-101	Q (kW)	1233,1	106848,5	160179,7	208233,6
C-201	Pot (kW)	175,34	237440,3	355953,5	462739,6
F-101	D,L(m)/W(kg)	0,91/3,7/1779	32778,4	49139,0	83536,3
A-201	D,L(m)/Pot(kW)	1,2/1,5/4036	1667028,7	2499090,6	4248454,0
T-202	D,L(m)/W(kg)/N	0,46/12,8/2041/10	80307,4	120391,1	608493,1
T-202-cond	A (m2)	11,6	13849,3	20761,9	
T-202-reb	A (m2)	15,7	41142,5	61678,0	
T-203	D,L(m)/W(kg)/N	0,46/11/2722/12	92018,2	137947,2	507331,3
T-203-cond	A (m2)	8,4	5036,5	7550,3	
T-203-reb	A (m2)	12,5	15751,1	23613,0	

ANEXO IX : CAPEX y OPEX de las plantas de generación de vapor

PLANTA PRODUCCIÓN VAPOR DE Ta₂O₃:			
ÍTEM	Ceq.0 (\$)	Ceq (\$)	C.inst (\$)
E-101	2.744,12	4.113,79	7.816,20
E-102	4.232,80	6.345,51	12.056,47
P-201	5.094,95	7.637,99	21.386,37
P-202	5.746,21	8.614,31	24.120,06
H-101	588.126,68	881.677,59	1.146.180,86
PLANTA PRODUCCIÓN VAPOR DE ZrO₂:			
ÍTEM	Ceq.0 (\$)	Ceq (\$)	C.inst (\$)
E-101	2.584,93	3.875,14	7.362,76
E-102	5.311,81	7.963,08	15.129,85
P-201	5.676,15	8.509,27	23.825,97
P-202	5.087,19	7.626,36	21.353,80
H-101	473.797,82	710.283,91	923.369,09
PLANTA PRODUCCIÓN VAPOR DE Hf:Zn:			
ÍTEM	Ceq.0 (\$)	Ceq (\$)	C.inst (\$)
E-101	2.299,54	3.447,30	6.549,87
E-102	91.186,72	136.700,63	259.731,20
P-201	5.006,86	7.505,93	21.016,60
P-202	5.123,03	7.680,08	21.504,23
H-101	358.649,96	537.662,44	698.961,18

CONCEPTO	PLANTA PRODUCCIÓN VAPOR DE:		
	2 PASOS		1 PASO
	Ta₂O₃	ZrO₂	Hf:Zn
Coste equipos instalados	1211559,97	991041,469	1007763,08
Tuberías del proceso	545202,0	445968,7	453493,4
Instrumentación	60578,0	49552,1	50388,2
Edificios y terreno	157502,8	128835,4	131009,2
Auxiliares (potencia, vapor...)	0,0	0,0	0,0
Líneas exteriores	36346,8	29731,2	30232,9
COSTE DIRECTO TOTAL	2011189,55	1645128,84	1672886,71

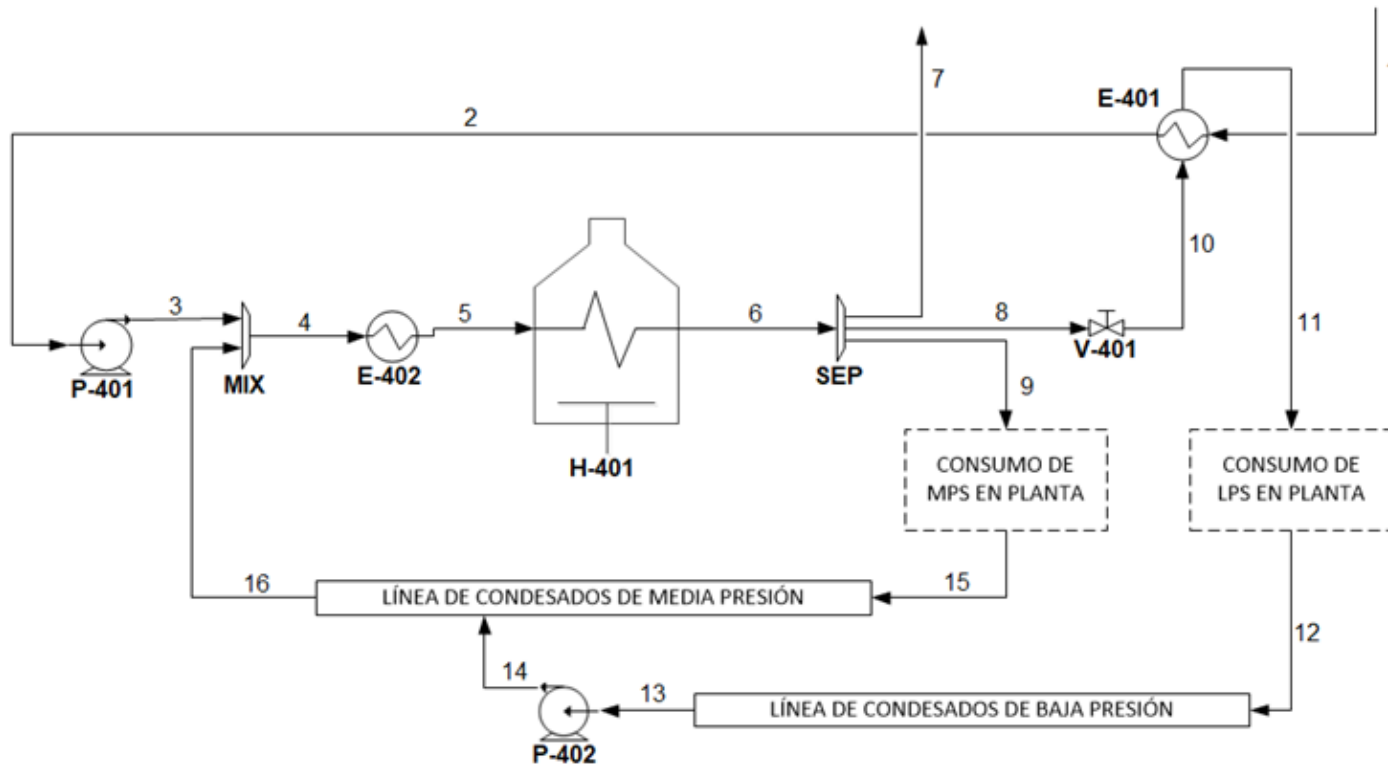
Ingeniería y Construcción	402237,9	329025,8	334577,3
Conting. beneficio contratista	201119,0	164512,9	167288,7
Factor de tamaño	502797,4	411282,2	418221,7
COSTE INDIRECTO	1106154,3	904820,861	920087,69
COSTE TOTAL FIJO	3117343,8	2549949,7	2592974,4
CAPITAL CIRCULANTE	311734,4	254995,0	259297,4
CAPEX	3429078,18	2804944,67	2852271,84

		PLANTA CON CATALIZADOR DE:		
		Ta2O3	ZrO2	Hf:Zn
MATERIAS PRIMAS (\$/h)	Agua caldera	81,013	14,995	43,835
SERVICIOS (\$/h)	CW	0	1,488	0
	Electricidad	1,146	1,042	0,836
COSTES FIJOS DE PRODUCCIÓN	1	2,286	1,870	1,902
	2	28,733	28,733	28,733
	3	5,747	5,747	5,747
	4	5,747	5,747	5,747
	5	14,366	14,366	14,366
	6	2,858	2,337	2,377
	7	0,286	0,234	0,238
	8	0,572	0,467	0,475
	9	0,286	0,234	0,238
COSTES GENERALES		4,291	2,318	3,135
OPEX (\$/h)		147,329	79,578	107,627
OPEX (\$/año)		1178633,18	636626,592	861017,765

ANEXO X: Balance de materia y energía de las plantas de generación de vapor

PLANTA DE GENERACIÓN DE VAPOR DEL PROCESO CON CATALIZADOR DE Ta₂O₃

PFD



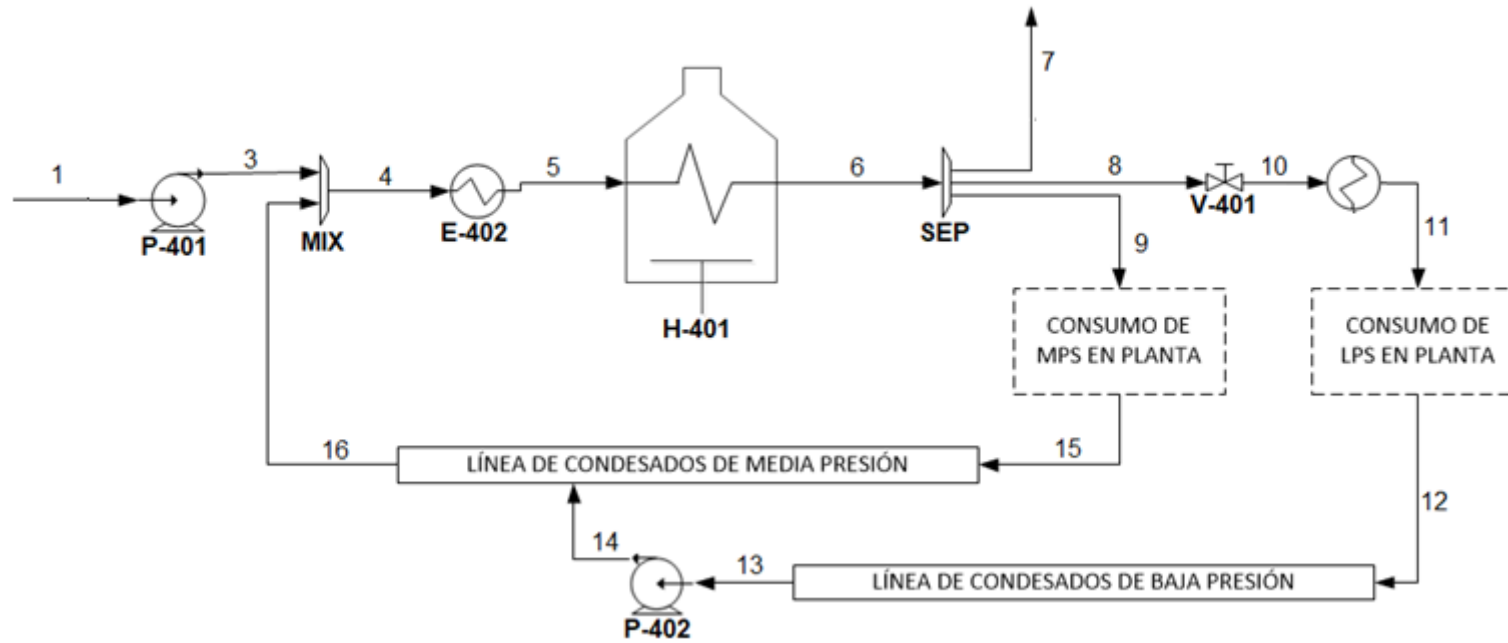
BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA

	Unidades	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
De:			E-401	P-401	MIX	E-402	H-401	SEP	SEP	SEP	V-401
Hasta:		E-401	P-401	MIX	E-402	H-401	SEP		V-401	CONS-MPS	E-401E
Fase		L	L	L	L	L	V	V	V	V	V
Temperatura	°C	20,0	20,8	21,2	36,7	79,0	195,0	195,0	195,0	195,0	160,7
Presión	bar	1,01325	1,01325	14	14	14	14	14	14	14	2,33
Frac. Vap. másica		0	0	0	0	0	1	1	1	1	1
Frac. Liq. másica		1	1	1	1	1	0	0	0	0	0
Entalpia	kcal/kg	-3794,52	-3793,75	-3793,05	-3777,56	-3735,30	-3148,48	-3148,48	-3148,48	-3148,48	-3148,48
Densidad	kg/m ³	998,21	998,05	998,55	994,01	972,98	7,10	7,10	7,10	7,10	1,18
Flujo molar	kmol/h	653,27	653,27	653,27	728,47	728,47	728,47	653,27	27,89	47,31	27,89
Flujo másico	kg/h	11768,89	11768,89	11768,89	13123,60	13123,60	13123,60	11768,89	502,45	852,26	502,45
Flujo volumétrico	m³/h	11,79	11,79	11,79	13,20	13,49	1847,51	1656,80	70,73	119,98	424,13

	Unidades	11	12	13	14	15	16
De:		E-401E	CONS-LPS	COND-L	P-402	CONS-MPS	COND-M
Hasta:		CONS-LPS	COND-L	P-402	COND-M	COND-M	MIX
Fase		V	L	L	L	L	L
Temperatura	°C	125,1	125,1	125,1	125,9	195,0	169,8
Presión	bar	2,33	2,33	2,33	14	14	14
Frac. Vap. másica		1	0	0	0	0	0
Frac. Liq. másica		0	1	1	1	1	1
Entalpia	kcal/kg	-3166,54	-3689,07	-3689,07	-3688,06	-3616,35	-3642,95
Densidad	kg/m ³	1,30	938,94	938,94	938,87	870,39	898,02
Flujo molar	kmol/h	27,89	27,89	27,89	27,89	47,31	75,20
Flujo másico	kg/h	502,45	502,45	502,45	502,45	852,26	1354,71
Flujo volumétrico	m³/h	385,72	0,54	0,54	0,54	0,98	1,51

PLANTA DE GENERACIÓN DE VAPOR DEL PROCESO CON CATALIZADOR DE ZrO2

PFD

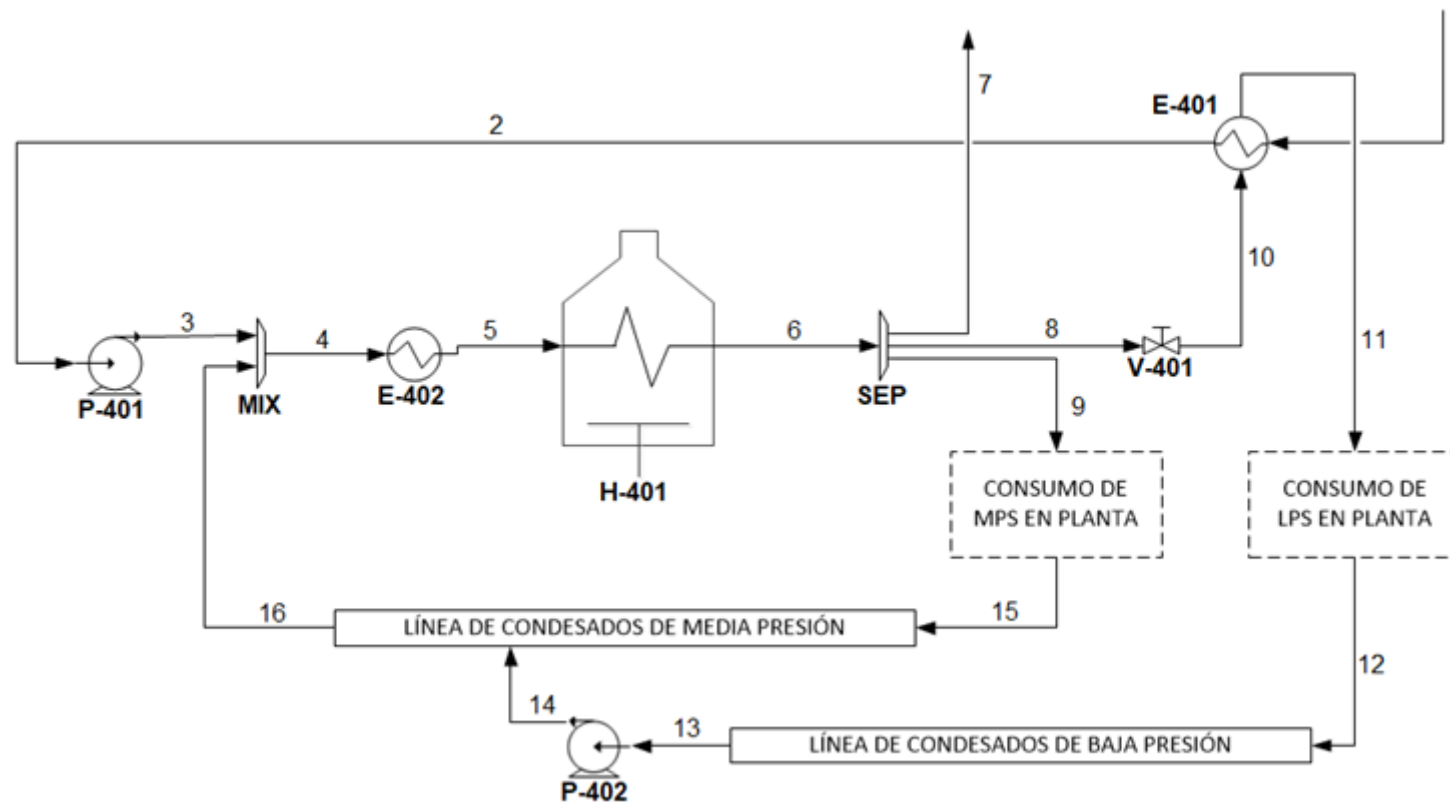


BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA

	Unidades	1	3	4	5	6	7	8	9	10
De:			P-401	MIX	E-402	H-401	SEP	SEP	SEP	V-401
Hasta:		P-401	MIX	E-402	H-401	SEP		V-401	CONS-MPS	E-401
Fase		L	L	L	L	V	V	V	V	V
Temperatura	°C	20,0	20,8	124,0	168,7	195,0	195,0	195,0	195,0	160,7
Presión	bar	1,01325	14	14	14	14	14	14	14	2,33
Frac. Vap. másica		0	0	0	0	1	1	1	1	1
Frac. Liq. másica		1	1	1	1	0	0	0	0	0
Entalpia	kcal/kg	-3794,52	-3793,47	-3690,02	-3644,14	-3148,48	-3148,48	-3148,48	-3148,48	-3148,48
Densidad	kg/m ³	998,21	998,64	940,46	899,20	7,10	7,10	7,10	7,10	1,18
Flujo molar	kmol/h	32,14	32,14	670,99	670,99	670,99	32,14	607,09	31,76	607,09
Flujo másico	kg/h	579,01	579,01	12088,14	12088,14	12088,14	579,01	10936,91	572,21	10936,91
Flujo volumétrico	m³/h	0,58	0,58	12,85	13,44	1701,74	81,51	1539,67	80,55	9232,04

	Unidades	11	12	13	14	15	16
De:		E-401	CONS-LPS	COND-L	P-402	CONS-MPS	COND-M
Hasta:		CONS-LPS	COND-L	P-402	COND-M	COND-M	MIX
Fase		V	L	L	L	L	L
Temperatura	°C	125,1	125,1	125,1	125,6	195,0	129,1
Presión	bar	2,33	2,33	2,33	14	14	14
Frac. Vap. másica		1	0	0	0	0	0
Frac. Liq. másica		0	1	1	1	1	1
Entalpia	kcal/kg	-3166,54	-3689,07	-3689,07	-3688,40	-3616,35	-3684,82
Densidad	kg/m ³	1,30	938,94	938,94	939,14	870,39	936,18
Flujo molar	kmol/h	607,09	607,09	607,09	607,09	31,76	638,85
Flujo másico	kg/h	10936,91	10936,91	10936,91	10936,91	572,21	11509,13
Flujo volumétrico	m³/h	8395,91	11,65	11,65	11,65	0,66	12,29

PLANTA DE GENERACIÓN DE VAPOR DEL PROCESO CON CATALIZADOR DE Hf:Zn



BALANCE DE MATERIA Y ENERGÍA

	Unidades	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
De:			E-401	P-401	MIX	E-402	H-401	SEP	SEP	SEP	V-401
Hasta:		E-401	P-401	MIX	E-402	H-401	SEP		V-401	CONS-MPS	E-401E
Fase		L	L	L	L	L+V	V	V	V	V	V
Temperatura	°C	20	27,3	28,1	104,7	184,1	184,1	184,1	184,1	184,1	156,8
Presión	bar	1,01325	1,01325	14	11	11	11	11	11	11	2,33
Frac. Vap. másica		0	0	0	0	0,05	1	1	1	1	1
Frac. Liq. másica		1	1	1	1	0,95	0	0	0	0	0
Entalpia	kcal/kg	-3794,52	-3787,24	-3786,18	-3709,54	-3602,03	-3150,44	-3150,44	-3150,44	-3150,44	-3150,44
Densidad	kg/m ³	998,21	996,43	996,80	955,38	93,16	5,64	5,64	5,64	5,64	1,20
Flujo molar	kmol/h	234,30	234,30	234,30	532,77	532,77	532,77	234,30	106,05	192,43	106,05
Flujo másico	kg/h	4221,00	4221,00	4221,00	9598,05	9598,05	9598,05	4221,00	1910,45	3466,60	1910,45
Flujo volumétrico	m³/h	4,23	4,24	4,23	10,05	103,03	1703,16	749,01	339,01	615,14	1596,72

	Unidades	11	12	13	14	15	16
De:		E-401E	CONS-LPS	COND-L	P-402	CONS-MPS	COND-M
Hasta:		CONS-LPS	COND-L	P-402	COND-M	COND-M	MIX
Fase		V	L	L	L	L	L
Temperatura	°C	125,1	125,1	125,1	125,9	184,1	163,7
Presión	bar	2,33	2,33	2,33	14	11	11
Frac. Vap. másica		1	0	0	0	0	0
Frac. Liq. másica		0	1	1	1	1	1
Entalpia	kcal/kg	-3166,54	-3689,07	-3689,07	-3688,06	-3628,04	-3649,37
Densidad	kg/m ³	1,30	938,94	938,94	938,87	882,62	904,08
Flujo molar	kmol/h	106,05	106,05	106,05	106,05	192,43	298,47
Flujo másico	kg/h	1910,45	1910,45	1910,45	1910,45	3466,60	5377,05
Flujo volumétrico	m³/h	1466,59	2,03	2,03	2,03	3,93	5,95

ANEXO XI: Analisis de flujos de caja de los procesos

-PLANTA CON CATALIZADO DE TA2O3

	Cdad.		Precio		1	2	3	4	5
Ingresos					26.148.889	26.148.889	26.148.889	26.148.889	26.148.889
13 Butadieno	14.075	t/a	1.488	\$/t	20.942.523	20.942.523	20.942.523	20.942.523	20.942.523
MPS (a venta)	94.151	t/a	30	\$/t	2.821.822	2.821.822	2.821.822	2.821.822	2.821.822
Hidrogeno	1.010	t/a	2.360	\$/t	2.384.544	2.384.544	2.384.544	2.384.544	2.384.544
Etileno									
Propileno									
Gastos					27.716.570	27.716.570	27.716.570	27.716.570	27.716.570
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	5.502	t/a	752	\$/t	4.136.704	4.136.704	4.136.704	4.136.704	4.136.704
Agua proceso	94.151	t/a	7	\$/t	648.137	648.137	648.137	648.137	648.137
Catalizador Cu/MC	0,3	t/a	116.980	\$/t	31.323	31.323	31.323	31.323	31.323
Catalizador Ta2O3	1,1	t/a	95.480	\$/t	108.801	108.801	108.801	108.801	108.801
Catalizador ZrO2	0	t/a	16.460	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Hf:Zn	0	t/a	7.320	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Y:Zn	0	t/a	11.430	\$/t	0	0	0	0	0
CW	8.042	kW	2	\$/GW	416.888	416.888	416.888	416.888	416.888
Refrigerantes									
Ref. 0°C	2.120	kW	2,542	\$/GJ	325.55.239	155.239	155.239	155.239	155.239
Ref. -5°C	347	kW	2,866	\$/GJ	28.666	28.666	28.666	28.666	28.666

Ref. -15°C	0	kW	3,443	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -20°C	69	kW	3,763	\$/GJ	7.448	7.448	7.448	7.448	7.448
Ref. -25°C	0	kW	4,134	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -50°C	0	kW	8,275	\$/GJ	0	0	0	0	0
G.COMB	0	kW	19,863	\$/GJ	0	0	0	0	0
MPS	0	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	0	kW	8,178	\$/GJ	0	0	0	0	0
Electricidad	194	kw	0,113	\$/kwh	175.701	175.701	175.701	175.701	175.701
Aguas Residuales	16.261	m3/a	0,951	\$/m3	15.460	15.460	15.460	15.460	15.460
Residuos	1,407	t/a	1.204	\$/t	1.695	1.695	1.695	1.695	1.695
Otros costes fijos	2.799.293	\$/a			2.799.293	2.799.293	2.799.293	2.799.293	2.799.293
EBITDA					-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681
Amortización	35.616.249		15		2.374.417	2.374.417	2.374.417	2.374.417	2.374.417
B.A.I					-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098
<i>IS</i>			25%		<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>
B.D.I					-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098
Flujo de caja libre				-47.361.356	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681
FCF acumulado				-47.361.356	-48.929.037	-50.496.718	-52.064.399	-53.632.080	-55.199.761

	Cdad.		Precio		6	7	8	9	10
Ingresos					26.148.889	26.148.889	26.148.889	26.148.889	26.148.889
13 Butadieno	14.075	t/a	1.488	\$/t	20.942.523	20.942.523	20.942.523	20.942.523	20.942.523
MPS (a venta)	94.151	t/a	30	\$/t	2.821.822	2.821.822	2.821.822	2.821.822	2.821.822
Hidrogeno	1.010	t/a	2.360	\$/t	2.384.544	2.384.544	2.384.544	2.384.544	2.384.544
Etileno									
Propileno									
Gastos					27.716.570	27.716.570	27.716.570	27.716.570	27.716.570
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	5.502	t/a	752	\$/t	4.136.704	4.136.704	4.136.704	4.136.704	4.136.704
Agua proceso	94.151	t/a	7	\$/t	648.137	648.137	648.137	648.137	648.137
Catalizador Cu/MC	0,3	t/a	116.980,0	\$/t	31.323	31.323	31.323	31.323	31.323
Catalizador Ta2O3	1,1	t/a	95.480,0	\$/t	108.801	108.801	108.801	108.801	108.801
Catalizador ZrO2	0	t/a	16.460,00	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Hf:Zn	0	t/a	7.320,00	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Y:Zn	0	t/a	11.430,00	\$/t	0	0	0	0	0
CW	8.042	kW	2	\$/GW	416.888	416.888	416.888	416.888	416.888
Refrigerantes									
Ref. 0°C	2.120	kW	2,542	\$/GJ	155.239	155.239	155.239	155.239	155.239
Ref. -5°C	347	kW	2,866	\$/GJ	28.666	28.666	28.666	28.666	28.666
Ref. -15°C	0	kW	3,443	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -20°C	69	kW	3,763	\$/GJ	7.448	7.448	7.448	7.448	7.448
Ref. -25°C	0	kW	4,134	\$/GJ	0	0	0	0	0

Ref. -50°C	0	kW	8,275	\$/GJ	0	0	0	0	0
G.COMB	0	kW	19,863	\$/GJ	0	0	0	0	0
MPS	0	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	0	kW	8,178	\$/GJ	0	0	0	0	0
Electricidad	194	kw	0,113	\$/kwh	175.701	175.701	175.701	175.701	175.701
Aguas Residuales	16.261	m3/a	0,951	\$/m3	15.460	15.460	15.460	15.460	15.460
Residuos	1,407	t/a	1.204	\$/t	1.695	1.695	1.695	1.695	1.695
Otros costes fijos	2.799.293	\$/a			2.799.293	2.799.293	2.799.293	2.799.293	2.799.293
EBITDA					-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681
Amortización	35.616.249		15		2.374.417	2.374.417	2.374.417	2.374.417	2.374.417
B.A.I					-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098
<i>IS</i>			25%		<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>
B.D.I					-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098
Flujo de caja libre				-47.361.356	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681
FCF acumulado				-47.361.356	-56.767.442	-58.335.123	-59.902.804	-61.470.484	-63.038.165

	Cdad.		Precio		11	12	13	14	15
Ingresos					26.148.889	26.148.889	26.148.889	26.148.889	26.148.889
13 Butadieno	14.075	t/a	1.488	\$/t	20.942.523	20.942.523	20.942.523	20.942.523	20.942.523
MPS (a venta)	94.151	t/a	30	\$/t	2.821.822	2.821.822	2.821.822	2.821.822	2.821.822
Hidrogeno	1.010	t/a	2.360	\$/t	2.384.544	2.384.544	2.384.544	2.384.544	2.384.544
Etileno									
Propileno									
Gastos					27.716.570	27.716.570	27.716.570	27.716.570	27.716.570
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	5.502	t/a	752	\$/t	4.136.704	4.136.704	4.136.704	4.136.704	4.136.704
Agua proceso	94.151	t/a	7	\$/t	648.137	648.137	648.137	648.137	648.137
Catalizador Cu/MC	0,3	t/a	116.980,0	\$/t	31.323	31.323	31.323	31.323	31.323
Catalizador Ta2O3	1,1	t/a	95.480,0	\$/t	108.801	108.801	108.801	108.801	108.801
Catalizador ZrO2	0	t/a	16.460,00	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Hf:Zn	0	t/a	7.320,00	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Y:Zn	0	t/a	11.430,00	\$/t	0	0	0	0	0
CW	8.042	kW	2	\$/GW	416.888	416.888	416.888	416.888	416.888
Refrigerantes									
Ref. 0°C	2.120	kW	2,542	\$/GJ	155.239	155.239	155.239	155.239	155.239
Ref. -5°C	347	kW	2,866	\$/GJ	28.666	28.666	28.666	28.666	28.666
Ref. -15°C	0	kW	3,443	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -20°C	69	kW	3,763	\$/GJ	7.448	7.448	7.448	7.448	7.448
Ref. -25°C	0	kW	4,134	\$/GJ	0	0	0	0	0

Ref. -50°C	0	kW	8,275	\$/GJ	0	0	0	0	0
G.COMB	0	kW	19,863	\$/GJ	0	0	0	0	0
MPS	0	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	0	kW	8,178	\$/GJ	0	0	0	0	0
Electricidad	194	kw	0,113	\$/kwh	175.701	175.701	175.701	175.701	175.701
Aguas Residuales	16.261	m3/a	0,951	\$/m3	15.460	15.460	15.460	15.460	15.460
Residuos	1,407	t/a	1.204	\$/t	1.695	1.695	1.695	1.695	1.695
Otros costes fijos	2.799.293	\$/a			2.799.293	2.799.293	2.799.293	2.799.293	2.799.293
EBITDA					-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681
Amortización	35.616.249		15		2.374.417	2.374.417	2.374.417	2.374.417	10.125.680
B.A.I					-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-11.693.361
<i>IS</i>			25%		0	0	0	0	0
B.D.I					-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-3.942.098	-11.693.361
Flujo de caja libre				-47.361.356	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	-1.567.681	6.026.080
FCF acumulado				-47.361.356	-64.605.846	-66.173.527	-67.741.208	-69.308.889	-63.282.810

PLANTA CON CATALIZADOR DE ZrO2

	Cdad.		Precio		1	2	3	4	5
Ingresos					25.221.485	25.221.485	25.221.485	25.221.485	25.221.485
13 Butadieno	15.984	t/a	1.488	\$/t	23.783.712	23.783.712	23.783.712	23.783.712	23.783.712
MPS (a venta)	4.632	t/a	30	\$/t	138.829	138.829	138.829	138.829	138.829
Hidrogeno	550	t/a	2.360	\$/t	1.298.944	1.298.944	1.298.944	1.298.944	1.298.944
Etileno									
Propileno									
Gastos					22.757.770	22.757.770	22.757.770	22.757.770	22.757.770
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	0	t/a	752	\$/t	0	0	0	0	0
Agua proceso	4.632	t/a	7	\$/t	31.887	31.887	31.887	31.887	31.887
Catalizador Cu/MC	0,3	t/a	116.980	\$/t	30.297	30.297	30.297	30.297	30.297
Catalizador Ta2O3	0	t/a	95.480	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador ZrO2	2	t/a	16.460	\$/t	25.341	25.341	25.341	25.341	25.341
Catalizador Hf:Zn	0	t/a	7.320	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Y:Zn	0	t/a	11.430	\$/t	0	0	0	0	0
CW	7.154	kW	2	\$/GW	370.878	370.878	370.878	370.878	370.878
Refrigerantes									
Ref. 0°C	0	kW	2,542	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -5°C	0	kW	2,866	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -15°C	407	kW	3,443	\$/GJ	40.363	40.363	40.363	40.363	40.363
Ref. -20°C	0	kW	3,763	\$/GJ	0	0	0	0	0

Ref. -25°C	0	kW	4,134	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -50°C	0	kW	8,275	\$/GJ	0	0	0	0	0
G.COMB	2.098	kW	19,863	\$/GJ	0	0	0	0	0
MPS	311	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	6.646	kW	8,178	\$/GJ	0	0	0	0	0
Electricidad	98	kw	0,113	\$/kwh	88.937	88.937	88.937	88.937	88.937
Aguas Residuales	15.201	m3/a	0,951	\$/m3	14.452	14.452	14.452	14.452	14.452
Residuos	1,799	t/a	1.204,400	\$/t	2.166	2.166	2.166	2.166	2.166
Otros costes fijos	2.962.234	\$/a			2.962.234	2.962.234	2.962.234	2.962.234	2.962.234
EBITDA					2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715
Amortización	47.857.755		15		3.190.517	3.190.517	3.190.517	3.190.517	3.190.517
B.A.I					-726.802	-726.802	-726.802	-726.802	-726.802
<i>IS</i>			<i>25%</i>		<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>
B.D.I					-726.802	-726.802	-726.802	-726.802	-726.802
Flujo de caja libre				-64.173.089	2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715
FCF acumulado				-64.173.089	-61.709.374	-59.245.659	-56.781.944	-54.318.229	-51.854.514

	Cdad.		Precio		6	7	8	9	10
Ingresos					25.221.485	25.221.485	25.221.485	25.221.485	25.221.485
13 Butadieno	15.984	t/a	1.488	\$/t	23.783.712	23.783.712	23.783.712	23.783.712	23.783.712
MPS (a venta)	4.632	t/a	30	\$/t	138.829	138.829	138.829	138.829	138.829
Hidrogeno	550	t/a	2.360	\$/t	1.298.944	1.298.944	1.298.944	1.298.944	1.298.944
Etileno									
Propileno									
Gastos					22.757.770	22.757.770	22.757.770	22.757.770	22.757.770
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	0	t/a	752	\$/t	0	0	0	0	0
Agua proceso	4.632	t/a	7	\$/t	31.887	31.887	31.887	31.887	31.887
Catalizador Cu/MC	0,3	t/a	116.980	\$/t	30.297	30.297	30.297	30.297	30.297
Catalizador Ta2O3	0	t/a	95.480	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador ZrO2	2	t/a	16.460	\$/t	25.341	25.341	25.341	25.341	25.341
Catalizador Hf:Zn	0	t/a	7.320	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Y:Zn	0	t/a	11.430	\$/t	0	0	0	0	0
CW	7.154	kW	2	\$/GW	370.878	370.878	370.878	370.878	370.878
Refrigerantes									
Ref. 0°C	0	kW	2,542	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -5°C	0	kW	2,866	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -15°C	407	kW	3,443	\$/GJ	40.363	40.363	40.363	40.363	40.363
Ref. -20°C	0	kW	3,763	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -25°C	0	kW	4,134	\$/GJ	0	0	0	0	0

Ref. -50°C	0	kW	8,275	\$/GJ	0	0	0	0	0
G.COMB	2.098	kW	19,863	\$/GJ	0	0	0	0	0
MPS	311	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	6.646	kW	8,178	\$/GJ	0	0	0	0	0
Electricidad	98	kw	0,113	\$/kwh	88.937	88.937	88.937	88.937	88.937
Aguas Residuales	15.201	m3/a	0,951	\$/m3	14.452	14.452	14.452	14.452	14.452
Residuos	1,799	t/a	1.204,400	\$/t	2.166	2.166	2.166	2.166	2.166
Otros costes fijos	2.962.234	\$/a			2.962.234	2.962.234	2.962.234	2.962.234	2.962.234
EBITDA					2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715
Amortización	47.857.755		15		3.190.517	3.190.517	3.190.517	3.190.517	3.190.517
B.A.I					-726.802	-726.802	-726.802	-726.802	-726.802
<i>IS</i>			25%		0	0	0	0	0
B.D.I					-726.802	-726.802	-726.802	-726.802	-726.802
Flujo de caja libre				-64.173.089	2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715
FCF acumulado				-64.173.089	-49.390.799	-46.927.084	-44.463.369	-41.999.654	-39.535.939

	Cdad.		Precio		11	12	13	14	15
Ingresos					25.221.485	25.221.485	25.221.485	25.221.485	25.221.485
13 Butadieno	15.984	t/a	1.488	\$/t	23.783.712	23.783.712	23.783.712	23.783.712	23.783.712
MPS (a venta)	4.632	t/a	30	\$/t	138.829	138.829	138.829	138.829	138.829
Hidrogeno	550	t/a	2.360	\$/t	1.298.944	1.298.944	1.298.944	1.298.944	1.298.944
Etileno									
Propileno									
Gastos					22.757.770	22.757.770	22.757.770	22.757.770	22.757.770
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	0	t/a	752	\$/t	0	0	0	0	0
Agua proceso	4.632	t/a	7	\$/t	31.887	31.887	31.887	31.887	31.887
Catalizador Cu/MC	0,3	t/a	116.980	\$/t	30.297	30.297	30.297	30.297	30.297
Catalizador Ta2O3	0	t/a	95.480	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador ZrO2	2	t/a	16.460	\$/t	25.341	25.341	25.341	25.341	25.341
Catalizador Hf:Zn	0	t/a	7.320	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Y:Zn	0	t/a	11.430	\$/t	0	0	0	0	0
CW	7.154	kW	2	\$/GW	370.878	370.878	370.878	370.878	370.878
Refrigerantes									
Ref. 0°C	0	kW	2,542	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -5°C	0	kW	2,866	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -15°C	407	kW	3,443	\$/GJ	40.363	40.363	40.363	40.363	40.363
Ref. -20°C	0	kW	3,763	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -25°C	0	kW	4,134	\$/GJ	0	0	0	0	0

Ref. -50°C	0	kW	8,275	\$/GJ	0	0	0	0	0
G.COMB	2.098	kW	19,863	\$/GJ	0	0	0	0	0
MPS	311	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	6.646	kW	8,178	\$/GJ	0	0	0	0	0
Electricidad	98	kw	0,113	\$/kwh	88.937	88.937	88.937	88.937	88.937
Aguas Residuales	15.201	m3/a	0,951	\$/m3	14.452	14.452	14.452	14.452	14.452
Residuos	1,799	t/a	1.204,400	\$/t	2.166	2.166	2.166	2.166	2.166
Otros costes fijos	2.962.234	\$/a			2.962.234	2.962.234	2.962.234	2.962.234	2.962.234
EBITDA					2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715
Amortización	47.857.755		15		3.190.517	3.190.517	3.190.517	3.190.517	13.926.929
B.A.I					-726.802	-726.802	-726.802	-726.802	-11.463.214
<i>IS</i>			25%		0	0	0	0	0
B.D.I					-726.802	-726.802	-726.802	-726.802	-11.463.214
Flujo de caja libre				-64.173.089	2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715	2.463.715
FCF acumulado				-64.173.089	-37.072.224	-34.608.510	-32.144.795	-29.681.080	-27.217.365

PLANTA CON CATALIZADOR DE Hf:Zn

	Cdad.		Precio		1	2	3	4	5
Ingresos					25.371.049	25.371.049	25.371.049	25.371.049	25.371.049
13 Butadieno	14.861	t/a	1.488	\$/t	22.112.425	22.112.425	22.112.425	22.112.425	22.112.425
MPS (a venta)	35.652	t/a	30	\$/t	1.068.544	1.068.544	1.068.544	1.068.544	1.068.544
Hidrogeno	928	t/a	2.360	\$/t	2.190.080	2.190.080	2.190.080	2.190.080	2.190.080
Etileno	0								
Propileno	0								
Gastos					26.199.840	26.199.840	26.199.840	26.199.840	26.199.840
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	3.590	t/a	752	\$/t	2.699.263	2.699.263	2.699.263	2.699.263	2.699.263
Agua proceso	35.652	t/a	7	\$/t	245.431	245.431	245.431	245.431	245.431
Catalizador Cu/MC	0,0	t/a	116.980	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Ta2O3	0	t/a	95.480	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador ZrO2	0	t/a	16.460	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Hf:Zn	1,4	t/a	7.320	\$/t	10.517	10.517	10.517	10.517	10.517
Catalizador Y:Zn	0	t/a	11.430	\$/t	0	0	0	0	0
CW	5.306	kW	2	\$/GW	275.058	275.058	275.058	275.058	275.058
Refrigerantes									
Ref. 0°C	0	kW	2,542	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -5°C	152	kW	2,866	\$/GJ	12.522	12.522	12.522	12.522	12.522
Ref. -15°C	0	kW	3,443	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -20°C	600	kW	3,763	\$/GJ	65.062	65.062	65.062	65.062	65.062

Ref. -25°C	0	kW	4,134	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -50°C	0	kW	8,275	\$/GJ	0	0	0	0	0
G.COMB	0	kW	19,863	\$/GJ	0	0	0	0	0
MPS	0	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	0	kW	8,178	\$/GJ	0	0	0	0	0
Electricidad	997	kw	0,113	\$/kwh	902.004	902.004	902.004	902.004	902.004
Aguas Residuales	19.060	m3/a	0,951	\$/m3	18.121	18.121	18.121	18.121	18.121
Residuos	1,437	t/a	1.204,400	\$/t	1.731	1.731	1.731	1.731	1.731
Otros costes fijos	2.778.915	\$/a			2.778.915	2.778.915	2.778.915	2.778.915	2.778.915
EBITDA					-828.791	-828.791	-828.791	-828.791	-828.791
Amortización	33.404.578		15		2.226.972	2.226.972	2.226.972	2.226.972	2.226.972
B.A.I					-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763
<i>IS</i>			<i>25%</i>		<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>	<i>0</i>
B.D.I					-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763
Flujo de caja libre				-44.528.003	-828.791	-828.791	-828.791	-828.791	-828.791
FCF acumulado				-44.528.003	-45.356.795	-46.185.586	-47.014.377	-47.843.169	-48.671.960

	Cdad.		Precio		6	7	8	9	10
Ingresos					25.371.049	25.371.049	25.371.049	25.371.049	25.371.049
13 Butadieno	14.861	t/a	1.488	\$/t	22.112.425	22.112.425	22.112.425	22.112.425	22.112.425
MPS (a venta)	35.652	t/a	30	\$/t	1.068.544	1.068.544	1.068.544	1.068.544	1.068.544
Hidrogeno	928	t/a	2.360	\$/t	2.190.080	2.190.080	2.190.080	2.190.080	2.190.080
Etileno	0								
Propileno	0								
Gastos					26.199.840	26.199.840	26.199.840	26.199.840	26.199.840
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	3.590	t/a	752	\$/t	2.699.263	2.699.263	2.699.263	2.699.263	2.699.263
Agua proceso	35.652	t/a	7	\$/t	245.431	245.431	245.431	245.431	245.431
Catalizador Cu/MC	0,0	t/a	116.980	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Ta2O3	0	t/a	95.480	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador ZrO2	0	t/a	16.460	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Hf:Zn	1,4	t/a	7.320	\$/t	10.517	10.517	10.517	10.517	10.517
Catalizador Y:Zn	0	t/a	11.430	\$/t	0	0	0	0	0
CW	5.306	kW	2	\$/GW	275.058	275.058	275.058	275.058	275.058
Refrigerantes									
Ref. 0°C	0	kW	2,542	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -5°C	152	kW	2,866	\$/GJ	12.522	12.522	12.522	12.522	12.522
Ref. -15°C	0	kW	3,443	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -20°C	600	kW	3,763	\$/GJ	65.062	65.062	65.062	65.062	65.062
Ref. -25°C	0	kW	4,134	\$/GJ	0	0	0	0	0

Ref. -50°C	0	kW	8,275	\$/GJ	0	0	0	0	0
G.COMB	0	kW	19,863	\$/GJ	0	0	0	0	0
MPS	0	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	0	kW	8,178	\$/GJ	0	0	0	0	0
Electricidad	997	kw	0,113	\$/kwh	902.004	902.004	902.004	902.004	902.004
Aguas Residuales	19.060	m3/a	0,951	\$/m3	18.121	18.121	18.121	18.121	18.121
Residuos	1,437	t/a	1.204,400	\$/t	1.731	1.731	1.731	1.731	1.731
Otros costes fijos	2.778.915	\$/a			2.778.915	2.778.915	2.778.915	2.778.915	2.778.915
EBITDA					-828.791	-828.791	-828.791	-828.791	-828.791
Amortización	33.404.578		15		2.226.972	2.226.972	2.226.972	2.226.972	2.226.972
B.A.I					-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763
<i>IS</i>			25%		0	0	0	0	0
B.D.I					-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763
Flujo de caja libre				-44.528.003	-828.791	-828.791	-828.791	-828.791	-828.791
FCF acumulado				-44.528.003	-49.500.751	-50.329.543	-51.158.334	-51.987.125	-52.815.917

	Cdad.		Precio		11	12	13	14	15
Ingresos					25.371.049	25.371.049	25.371.049	25.371.049	25.371.049
13 Butadieno	14.861	t/a	1.488	\$/t	22.112.425	22.112.425	22.112.425	22.112.425	22.112.425
MPS (a venta)	35.652	t/a	30	\$/t	1.068.544	1.068.544	1.068.544	1.068.544	1.068.544
Hidrogeno	928	t/a	2.360	\$/t	2.190.080	2.190.080	2.190.080	2.190.080	2.190.080
Etileno	0								
Propileno	0								
Gastos					26.199.840	26.199.840	26.199.840	26.199.840	26.199.840
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	3.590	t/a	752	\$/t	2.699.263	2.699.263	2.699.263	2.699.263	2.699.263
Agua proceso	35.652	t/a	7	\$/t	245.431	245.431	245.431	245.431	245.431
Catalizador Cu/MC	0,0	t/a	116.980	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Ta2O3	0	t/a	95.480	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador ZrO2	0	t/a	16.460	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Hf:Zn	1,4	t/a	7.320	\$/t	10.517	10.517	10.517	10.517	10.517
Catalizador Y:Zn	0	t/a	11.430	\$/t	0	0	0	0	0
CW	5.306	kW	2	\$/GW	275.058	275.058	275.058	275.058	275.058
Refrigerantes									
Ref. 0°C	0	kW	2,542	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -5°C	152	kW	2,866	\$/GJ	12.522	12.522	12.522	12.522	12.522
Ref. -15°C	0	kW	3,443	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -20°C	600	kW	3,763	\$/GJ	65.062	65.062	65.062	65.062	65.062
Ref. -25°C	0	kW	4,134	\$/GJ	0	0	0	0	0

Ref. -50°C	0	kW	8,275	\$/GJ	0	0	0	0	0
G.COMB	0	kW	19,863	\$/GJ	0	0	0	0	0
MPS	0	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	0	kW	8,178	\$/GJ	0	0	0	0	0
Electricidad	997	kw	0,113	\$/kwh	902.004	902.004	902.004	902.004	902.004
Aguas Residuales	19.060	m3/a	0,951	\$/m3	18.121	18.121	18.121	18.121	18.121
Residuos	1,437	t/a	1.204,400	\$/t	1.731	1.731	1.731	1.731	1.731
Otros costes fijos	2.778.915	\$/a			2.778.915	2.778.915	2.778.915	2.778.915	2.778.915
EBITDA					-828.791	-828.791	-828.791	-828.791	-828.791
Amortización	33.404.578		15		2.226.972	2.226.972	2.226.972	2.226.972	9.561.694
B.A.I					-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-10.390.486
<i>IS</i>			25%		0	0	0	0	0
B.D.I					-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-3.055.763	-10.390.486
Flujo de caja libre				-44.528.003	-828.791	-828.791	-828.791	-828.791	-828.791
FCF acumulado				-44.528.003	-53.644.708	-54.473.500	-55.302.291	-56.131.082	-56.959.874

PLANTA CON CATALIZADOR DE Y:Zn

	Cdad.		Precio		1	2	3	4	5
Ingresos					33.039.892	33.039.892	33.039.892	33.039.892	33.039.892
13 Butadieno	17.613	t/a	1.488	\$/t	26.207.080	26.207.080	26.207.080	26.207.080	26.207.080
MPS (a venta)	0	t/a	30	\$/t	0	0	0	0	0
Hidrogeno	853	t/a	2.360	\$/t	2.013.212	2.013.212	2.013.212	2.013.212	2.013.212
Etileno	2.086		764	\$/t	1.594.566	1.594.566	1.594.566	1.594.566	1.594.566
Propileno	3.058		1.055	\$/t	3.225.034	3.225.034	3.225.034	3.225.034	3.225.034
Gastos					27.077.642	27.077.642	27.077.642	27.077.642	27.077.642
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	0	t/a	752	\$/t	0	0	0	0	0
Agua proceso	0	t/a	7	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Cu/MC	0,0	t/a	116.980	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Ta2O3	0	t/a	95.480	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador ZrO2	0	t/a	16.460	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Hf:Zn	0,0	t/a	7.320	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Y:Zn	3	t/a	11.430	\$/t	37.632	37.632	37.632	37.632	37.632
CW	1.806	kW	2	\$/GW	93.636	93.636	93.636	93.636	93.636
Refrigerantes									
Ref. 0°C	0	kW	2,542	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -5°C	0	kW	2,866	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -15°C	0	kW	3,443	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -20°C	0	kW	3,763	\$/GJ	0	0	0	0	0

Ref. -25°C	870	kW	4,134	\$/GJ	103.594	103.594	103.594	103.594	103.594
Ref. -50°C	35	kW	8,275	\$/GJ	8.303	8.303	8.303	8.303	8.303
G.COMB	1.233	kW	19,863	\$/GJ	705.389	705.389	705.389	705.389	705.389
MPS	0	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	2.292	kW	8,178	\$/GJ	539.739	539.739	539.739	539.739	539.739
Electricidad	4.211	kw	0,113	\$/kwh	3.810.160	3.810.160	3.810.160	3.810.160	3.810.160
Aguas Residuales	33.688	m3/a	0,951	\$/m3	32.028	32.028	32.028	32.028	32.028
Residuos	3,292	t/a	1.204,400	\$/t	3.965	3.965	3.965	3.965	3.965
Otros costes fijos	2.551.979	\$/a			2.551.979	2.551.979	2.551.979	2.551.979	2.551.979
EBITDA					5.962.250	5.962.250	5.962.250	5.962.250	5.962.250
Amortización	22.480.952		15		1.498.730	1.498.730	1.498.730	1.498.730	1.498.730
B.A.I					4.463.520	4.463.520	4.463.520	4.463.520	4.463.520
<i>IS</i>			25%		<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>
B.D.I					3.347.640	3.347.640	3.347.640	3.347.640	3.347.640
Flujo de caja libre				-30.534.840	4.846.370	4.846.370	4.846.370	4.846.370	4.846.370
FCF acumulado				-30.534.840	-25.688.470	-20.842.100	-15.995.730	-11.149.360	-6.302.991

	Cdad.		Precio		6	7	8	9	10
Ingresos					33.039.892	33.039.892	33.039.892	33.039.892	33.039.892
13 Butadieno	17.613	t/a	1.488	\$/t	26.207.080	26.207.080	26.207.080	26.207.080	26.207.080
MPS (a venta)	0	t/a	30	\$/t	0	0	0	0	0
Hidrogeno	853	t/a	2.360	\$/t	2.013.212	2.013.212	2.013.212	2.013.212	2.013.212
Etileno	2.086		764	\$/t	1.594.566	1.594.566	1.594.566	1.594.566	1.594.566
Propileno	3.058		1.055	\$/t	3.225.034	3.225.034	3.225.034	3.225.034	3.225.034
Gastos					27.077.642	27.077.642	27.077.642	27.077.642	27.077.642
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	0	t/a	752	\$/t	0	0	0	0	0
Agua proceso	0	t/a	7	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Cu/MC	0,0	t/a	116.980	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Ta2O3	0	t/a	95.480	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador ZrO2	0	t/a	16.460	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Hf:Zn	0,0	t/a	7.320	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Y:Zn	3	t/a	11.430	\$/t	37.632	37.632	37.632	37.632	37.632
CW	1.806	kW	2	\$/GW	93.636	93.636	93.636	93.636	93.636
Refrigerantes									
Ref. 0°C	0	kW	2,542	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -5°C	0	kW	2,866	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -15°C	0	kW	3,443	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -20°C	0	kW	3,763	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -25°C	870	kW	4,134	\$/GJ	103.594	103.594	103.594	103.594	103.594

Ref. -50°C	35	kW	8,275	\$/GJ	8.303	8.303	8.303	8.303	8.303
G.COMB	1.233	kW	19,863	\$/GJ	705.389	705.389	705.389	705.389	705.389
MPS	0	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	2.292	kW	8,178	\$/GJ	539.739	539.739	539.739	539.739	539.739
Electricidad	4.211	kw	0,113	\$/kwh	3.810.160	3.810.160	3.810.160	3.810.160	3.810.160
Aguas Residuales	33.688	m3/a	0,951	\$/m3	32.028	32.028	32.028	32.028	32.028
Residuos	3,292	t/a	1.204,400	\$/t	3.965	3.965	3.965	3.965	3.965
Otros costes fijos	2.551.979	\$/a			2.551.979	2.551.979	2.551.979	2.551.979	2.551.979
EBITDA					5.962.250	5.962.250	5.962.250	5.962.250	5.962.250
Amortización	22.480.952		15		1.498.730	1.498.730	1.498.730	1.498.730	1.498.730
B.A.I					4.463.520	4.463.520	4.463.520	4.463.520	4.463.520
<i>IS</i>			25%		<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>
B.D.I					3.347.640	3.347.640	3.347.640	3.347.640	3.347.640
Flujo de caja libre				-30.534.840	4.846.370	4.846.370	4.846.370	4.846.370	4.846.370
FCF acumulado				-30.534.840	-1.456.621	3.389.749	8.236.119	13.082.489	17.928.858

	Cdad.		Precio		11	12	13	14	15
Ingresos					33.039.892	33.039.892	33.039.892	33.039.892	33.039.892
13 Butadieno	17.613	t/a	1.488	\$/t	26.207.080	26.207.080	26.207.080	26.207.080	26.207.080
MPS (a venta)	0	t/a	30	\$/t	0	0	0	0	0
Hidrogeno	853	t/a	2.360	\$/t	2.013.212	2.013.212	2.013.212	2.013.212	2.013.212
Etileno	2.086		764	\$/t	1.594.566	1.594.566	1.594.566	1.594.566	1.594.566
Propileno	3.058		1.055	\$/t	3.225.034	3.225.034	3.225.034	3.225.034	3.225.034
Gastos					27.077.642	27.077.642	27.077.642	27.077.642	27.077.642
Etanol	41.418	t/a	463	\$/t	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216	19.191.216
DMF	0	t/a	752	\$/t	0	0	0	0	0
Agua proceso	0	t/a	7	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Cu/MC	0,0	t/a	116.980	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Ta2O3	0	t/a	95.480	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador ZrO2	0	t/a	16.460	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Hf:Zn	0,0	t/a	7.320	\$/t	0	0	0	0	0
Catalizador Y:Zn	3	t/a	11.430	\$/t	37.632	37.632	37.632	37.632	37.632
CW	1.806	kW	2	\$/GW	93.636	93.636	93.636	93.636	93.636
Refrigerantes									
Ref. 0°C	0	kW	2,542	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -5°C	0	kW	2,866	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -15°C	0	kW	3,443	\$/GJ	0	0	0	0	0
Ref. -20°C	0	kW	3,763	\$/GJ	0	0	0	0	0

Ref. -25°C	870	kW	4,134	\$/GJ	103.594	103.594	103.594	103.594	103.594
Ref. -50°C	35	kW	8,275	\$/GJ	8.303	8.303	8.303	8.303	8.303
G.COMB	1.233	kW	19,863	\$/GJ	705.389	705.389	705.389	705.389	705.389
MPS	0	kW	15,296	\$/GJ	0	0	0	0	0
LPS	2.292	kW	8,178	\$/GJ	539.739	539.739	539.739	539.739	539.739
Electricidad	4.211	kw	0,113	\$/kwh	3.810.160	3.810.160	3.810.160	3.810.160	3.810.160
Aguas Residuales	33.688	m3/a	0,951	\$/m3	32.028	32.028	32.028	32.028	32.028
Residuos	3,292	t/a	1.204,400	\$/t	3.965	3.965	3.965	3.965	3.965
Otros costes fijos	2.551.979	\$/a			2.551.979	2.551.979	2.551.979	2.551.979	2.551.979
EBITDA					5.962.250	5.962.250	5.962.250	5.962.250	5.962.250
Amortización	22.480.952		15		1.498.730	1.498.730	1.498.730	1.498.730	9.552.618
B.A.I					4.463.520	4.463.520	4.463.520	4.463.520	-3.590.368
<i>IS</i>			25%		<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>	<i>1.115.880</i>	<i>0</i>
B.D.I					3.347.640	3.347.640	3.347.640	3.347.640	-3.590.368
Flujo de caja libre				-30.534.840	4.846.370	4.846.370	4.846.370	4.846.370	5.962.250
FCF acumulado				-30.534.840	22.775.228	27.621.598	32.467.968	37.314.338	43.276.587

ANEXO XII: Resumen del análisis económico

Precio productos

13 Butadieno	1487,97	\$/t
MPS (a venta)	29,97	\$/t
Hidrogeno	2360	\$/t
Etileno	764,29	\$/t
Propileno	1054,76	\$/t

Precio MP

Etanol	463,35	\$/t
Agua Proces	6,884	\$/t
DMF	751,8	\$/t
Electricidad	113,1	\$/MWh
Gas	50,05	\$/MWh

IS

25%

	Caso 1		Caso 2		Caso 3		Caso 4	
	Ta2O3		ZrO2		Hf:Zn		Y:Zn	
Catalizador	Ta2O3		ZrO2		Hf:Zn		Y:Zn	
Etanol	41.418	t/año	41.418	t/año	41.418	t/año	41.418	t/año
DMF	5.502	t/año	0	t/año	3.590	t/año	0	t/año
Agua de proceso	94.151	t/año	4.632	t/año	35.652	t/año	0	t/año
13 BD	14.075	t/año	15.984	t/año	14.861	t/año	17.613	t/año
MPS (a venta)	94.151	t/año	4.632	t/año	35.652	t/año	0	t/año
Hidrogeno	1.010	t/año	550	t/año	928	t/año	853	t/año
Etileno	0	t/año	0	t/año	0	t/año	2.086	t/año
Propileno	0	t/año	0	t/año	0	t/año	3.058	t/año
Cons. Electricidad	194	kW	98	kW	997	kW	4.211	kW

CAPEX

47.361.356

64.173.089

44.528.003

30.534.840

Coste prod.

\$/t_BD

\$/t_BD

\$/t_BD

\$/t_BD

Etanol	19.191.216	1363,5	19.191.216	1200,7	19.191.216	1089,6274	19.191.216	1089,6274
DMF	4.136.704	293,9	0	0,0	2.699.263	153,25713	0	0
Agua Caldera	648.137	46,1	31.887	2,0	245.431	13,934942	0	0
Catalizadores	140.123	10,0	55.637	3,5	10.517	0,5971558	37.632	2,1366548
CW	416.888	29,6	370.878	23,2	275.058	15,617101	93.636	5,3164091
Refrigerantes								
Ref. 0°C	155.239	11,0	0	0,0	0	0	0	0
Ref. -5°C	28.666	2,0	0	0,0	12.522	0,7109929	0	0
Ref. -15°C	0	0,0	40.363	2,5	0	0	0	0
Ref. -20°C	7.448	0,5	0	0,0	65.062	3,6940325	0	0
Ref. -25°C	0	0,0	0	0,0	0	0	103.594	5,8818003
Ref. -50°C	0	0,0	0	0,0	0	0	8.303	0,4714415
G.COMB	0	0,0	0	0,0	0	0	705.389	40,050185
MPS	0	0,0	0	0,0	0	0	0	0
LPS	0	0,0	0	0,0	0	0	539.739	30,644963
Electricidad	175.701	12,5	88.937	5,6	902.004	51,213446	3.810.160	216,33099
Aguas Residuales	15.460	1,1	14.452	0,9	18.121	1,0288539	32.028	1,818492
Residuos	1.695	0,1	2.166	0,1	1.731	0,0982533	3.965	0,2251432
Otros costes fijos	2.799.293	198,9	2.962.234	185,3	2.778.915	157,7796	2.551.979	144,89477
Amortizacion	2.374.417	168,7	3.190.517	199,6	2.226.972	126,44169	1.498.730	85,094008
Subproductos	5.206.366	369,9	1.437.773	90,0	3.258.624	185,01622	6.832.812	387,94934
TIR	#¡DIV/0!		-6%		#¡DIV/0!		14%	
VAN	-57.467.376 \$		-45.433.877 \$		-50.831.856 \$		6.594.167 \$	
ROI	15 años		15 años		15 años		6 años	

ANEXO XIII: Cálculo de las suposiciones para el análisis ambiental

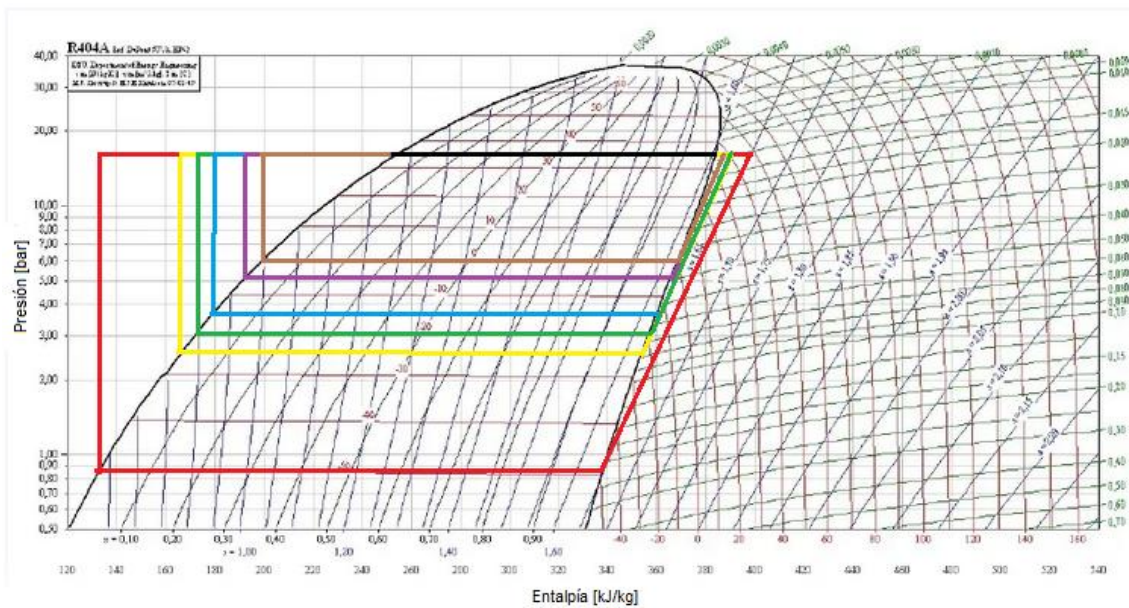
CÁLCULO DE LOS EMISIONES GASEOSAS POR LA QUEMA DE LAS CORRIENTES RESIDUALES

En la siguiente tabla se muestran los kmol/h de los elementos carbono y nitrógeno atómico, para determinar las emisiones globales de CO₂ y NO de los 3 procesos que queman sus corrientes residuales combustibles. Esto es sencillo de determinar conocida la fórmula molecular del compuesto (primera columna de la siguiente tabla), y los resultados de los flujos molares de cada compuesto de esos tres procesos (que se extraen de la Tablas 33, 39 y 45):

		Ta ₂ O ₃		ZrO ₂		Hf:Zn	
		C	N	C	N	C	N
C₂H₆O	ETANOL	1,3562	0	7,712	0	8,9	0
H₂O	AGUA	0	0	0	0	0	0
C₂H₄O	ACETALDE	15,4386	0	13,8902	0	6,444	0
H₂	H₂	0	0	0	0	0	0
C₄H₈O	BUTANONA	0,8092	0	0,952	0	0	0
C₂H₄O₂	PESADOS	0,0122	0	0,00284	0	0	0
C₃H₆O	ACETONA	0,8319	0	0,489	0	0	0
C₄H₈O₂	ACETATO	3,9728	0	2,984	0	0	0
C₄H₆	13-BD	16,1736	0	31,024	0	7,388	0
C₂H₄	ETILENO	8,1824	0	7,392	0	11,666	0
C₃H₆	PROPILEN	3,2733	0	1,533	0	7,068	0
C₄H₈	1-BUTENO	1,8112	0	0	0	2,54	0
C₄H₈	2-BUTENO	0,4556	0	0	0	2,644	0
C₄H₈O	BUTANAL	0	0	0	0	0,428	0
C₄H₆O	CROTONAL	0,004	0	0	0	0	0
C₄H₁₀O	DEE	7,2748	0	5,1408	0	1,368	0
C₄H₁₀O	BUTANOL	0	0	0,0008	0	0	0
C₃H₇ON	DMF	28,2186	9,4062	0	0	18,414	6,138
TOTAL (kmol/h)		87,8144	9,4062	71,12064	0	66,86	6,138

CÁLCULO DE LOS CONSUMOS DE REFRIGERANTES DE BAJA TEMPERATURA

Para el cálculo de estos los valores de consumo de agua de refrigeración y electricidad para el caso de cada refrigerante, se supondrá que el circuito es de refrigeración simple (1 etapa), y se utilizará el diagrama de Mollier del refrigerante R-404A que es el indicado para el rango de temperaturas requerido.



En la figura anterior se muestra el proceso de refrigeración simple del refrigerante según la temperatura de este, de color rojo, amarillo, verde, azul, violeta, marrón correspondientes a los refrigerantes de -50, -25, -20, -15, -5 y 0°C respectivamente, donde las líneas superiores coincidentes en 35 °C es la cantidad de calor a retirar con agua de refrigeración y las inferiores correspondiente al enfriamiento en el equipo requerido por este refrigerante.

Como se observa en la figura anterior, se suponen compresiones y expansiones isentrópicas, para mejorar la suposición anterior, al consumo eléctrico calculado se le aplicará un rendimiento del 70%, para compensar la posible destrucción de exergía del proceso. El consumo eléctrico se calculará de la siguiente forma:

$$w_e \left(\frac{kJ}{kg} \right) = \frac{\gamma R T_1}{0,7 \cdot PM(\gamma - 1)} \cdot \left(\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right)$$

Donde:

- γ : Coeficiente de expansión adiabática del R-404A (1,118)
- R: Constante de los gases ideales (8,314 kJ/kmol·K)
- T_1 : Temperatura de entrada del gas al compresor (K)
- PM: Peso molecular del R404A (97,6 kg/kmol)
- P_2, P_1 : Presiones de salida y entrada al compresor respectivamente (bar)

Obteniéndose finalmente:

Temperatura refrigerante (°C)	Calor latente (kJ/kg)	P₁ (bar)	P₂ (bar)	Consumo CW (kJ/kg)	W (kJ/kg)
0	168,39	6,2	18	182,66	37,48
-5	172,45	5,3	18	193,96	42,56
-15	180,3	3,8	18	210,91	53,07
-20	183,56	3	18	218,44	60,73
-25	186,56	2,5	18	222,21	66,24
-50	201,95	0,9	18	263,64	95,62

ANEXO XIX: Impactos de los procesos de fabricación de butadieno

APARTIR DE ETANOL CON CATALIZADOR DE Ta₂O₃

Categoría de impacto	Unidad	Total	Emision directa	Cat. Cu/M	Cat. Ta ₂ O ₃	Bio-Ethanol	Agua Caldera	DMF	Uso CW
Global warming	kg CO2 eq	0,23229175	0	0,00161881	0,00167448	0,61011516	0,00214159	0,97878292	0,00437522
Stratospheric ozone depletion	kg CFC11 eq	1,74E-05	0	1,69E-09	1,03E-09	1,76E-05	1,43E-09	4,57E-07	2,63E-09
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	0,07481523	0	0,0002651	0,00027108	0,00949742	0,0009659	0,06403614	0,00041682
Ozone formation, Human health	kg NOx eq	14,400759	14,391486	2,37E-06	3,55E-06	0,0095019	4,00E-06	0,00194043	9,48E-06
Fine particulate matter formation	kg PM2.5 eq	1,6078642	1,599054	1,66E-06	1,65E-06	0,00903892	3,32E-06	0,00140189	1,21E-05
Ozone Terrestrial formation	kg NOx eq	14,401369	14,391486	2,44E-06	3,62E-06	0,01012073	4,03E-06	0,00202388	9,60E-06
Terrestrial acidification	kg SO2 eq	5,2172009	5,1922224	5,04E-06	3,57E-06	0,02658505	7,86E-06	0,00336886	3,14E-05
Freshwater eutrophication	kg P eq	0,00070964	0	2,09E-06	2,06E-06	0,00024532	1,94E-06	0,00023151	1,49E-06
Marine eutrophication	kg N eq	0,00540579	0	1,40E-07	1,42E-07	0,00419697	1,51E-07	0,00118608	1,94E-07
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	3,5188871	0	0,00673063	0,00063095	4,1573069	0,00172048	2,2473247	0,00857317
Freshwater ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,06229119	0	0,00015297	5,54E-05	0,04035166	5,69E-05	0,01749081	7,09E-05
Marine ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,05122677	0	0,00019943	7,61E-05	0,02472086	7,86E-05	0,02207865	0,00010309
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,04173091	0	0,00010184	0,00010169	0,01854946	0,00010837	0,01578328	0,00025633
Human non-carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	2,6554885	0	0,00338248	0,00226178	2,0760498	0,0024992	0,44734528	0,00337518
Land use	m ² a crop eq	28,698118	0	0,00053385	0,00050376	28,604112	0,00035786	0,04933562	0,00029863
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	0,00469327	0	2,64E-06	0,00013406	0,0040322	1,79E-06	0,00053438	1,21E-05
Fossil resource scarcity	kg oil eq	-0,24625196	0	0,00085191	0,00043136	0,12781465	0,00056427	0,5882716	0,00122659
Water consumption	m³	0,16356147	0	1,45E-05	1,72E-05	0,13915221	0,00681041	0,01402877	0,01216048

Categoría de impacto	Unidad	Uso Ref.0°C	Uso Ref.-20°C	Electricity	Hydrogen	Venta MPS	Wastewater	Res. Solido
Global warming	kg CO2 eq	0,16571012	0,00796817	0,06768141	-0,25687252	-1,3467407	0,00020736	5,42E-07
Stratospheric ozone depletion	kg CFC11 eq	1,09E-07	5,24E-09	4,45E-08	-4,56E-07	-3,31E-07	1,55E-09	2,72E-13
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	0,03090873	0,00148769	0,01267112	-0,013356	-0,03198742	5,50E-05	6,14E-09
Ozone formation, Human health	kg NOx eq	0,00016924	8,12E-06	6,85E-05	-0,00087023	-0,00155638	1,06E-06	4,59E-09
Fine particulate matter formation	kg PM2.5 eq	8,13E-05	3,88E-06	3,21E-05	-0,0007515	-0,00100376	7,55E-07	1,10E-09
Ozone formation, Terrestrial ecosystems	kg NOx eq	0,00017066	8,19E-06	6,91E-05	-0,00092637	-0,00159426	1,07E-06	4,66E-09
Terrestrial acidification	kg SO2 eq	0,0002474	1,18E-05	9,81E-05	-0,00233658	-0,00301585	3,15E-06	2,43E-09
Freshwater eutrophication	kg P eq	0,00024397	1,17E-05	0,00010023	-3,84E-06	-0,00012659	1,20E-06	3,70E-11
Marine eutrophication	kg N eq	1,68E-05	8,10E-07	6,90E-06	-4,02E-07	-8,58E-06	6,75E-06	2,65E-12
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,03921153	0,00185828	0,01512811	-1,017263	-1,9339132	0,00013799	5,03E-06
Freshwater ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00640648	0,00030841	0,00262818	-0,00096155	-0,00421682	1,87E-05	1,16E-08
Marine ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00878679	0,00042298	0,00360398	-0,00197823	-0,00678786	2,53E-05	1,62E-08
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,01177678	0,00056648	0,00481645	-0,00096637	-0,00917132	6,40E-05	2,78E-09
Human non-carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,26070841	0,01254882	0,10689471	-0,0436877	-0,21550004	0,00298216	1,57E-07
Land use	m2a crop eq	0,05263858	0,00253506	0,02162774	-0,00270108	-0,03084699	2,12E-05	1,83E-07
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	7,50E-05	3,57E-06	2,95E-05	-3,64E-05	-8,37E-05	2,01E-07	6,61E-11
Fossil resource scarcity	kg oil eq	0,04069077	0,00195607	0,01660152	-0,57073771	-0,45273096	3,32E-05	1,65E-07
Water consumption	m3	0,00520147	0,00020672	0,00070941	-0,00013559	-0,00142059	-0,00103523	3,98E-10

APARTIR DE ETANOL CON CATALIZADOR DE ZrO2

Categoría de impacto	Unidad	Total	Emision directa	Cat. Cu/M	Cat. ZrO2	Bio-Ethanol	Agua Caldera	Uso CW
Global warming	kg CO2 eq	0,40526475	0	0,00137943	0,00434916	0,53749905	9,28E-05	0,00342908
Stratospheric ozone depletion	kg CFC11 eq	1,53E-05	0	1,44E-09	2,86E-09	1,55E-05	6,21E-11	2,06E-09
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	0,01316802	0	0,0002259	0,00081228	0,00836703	4,19E-05	0,00032668
Ozone formation, Human health	kg NOx eq	0,00787696	0	2,02E-06	4,45E-06	0,00837098	1,73E-07	7,43E-06
Fine particulate matter formation	kg PM2.5 eq	0,00752542	0	1,42E-06	2,09E-06	0,00796311	1,44E-07	9,47E-06
Ozone formation, Terrestrial ecosystems	kg NOx eq	0,00838836	0	2,08E-06	4,48E-06	0,00891616	1,75E-07	7,52E-06
Terrestrial acidification	kg SO2 eq	0,02205817	0	4,29E-06	6,36E-06	0,02342089	3,41E-07	2,46E-05
Freshwater eutrophication	kg P eq	0,00031808	0	1,78E-06	6,42E-06	0,00021612	8,39E-08	1,16E-06
Marine eutrophication	kg N eq	0,00370996	0	1,19E-07	4,42E-07	0,00369744	6,55E-09	1,52E-07
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	3,0117925	0	0,00573533	0,00101651	3,6625029	7,46E-05	0,00671922
Freshwater ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,0377795	0	0,00013035	0,00016843	0,035549	2,46E-06	5,56E-05
Marine ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,02440303	0	0,00016994	0,00023099	0,02177857	3,41E-06	8,08E-05
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,0208112	0	8,68E-05	0,00030872	0,0163417	4,70E-06	0,0002009
Human non-carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	1,9149178	0	0,0028823	0,00685232	1,8289577	0,00010832	0,0026453
Land use	m2a crop eq	25,220247	0	0,00045491	0,00138631	25,199641	1,55E-05	0,00023405
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	0,00357342	0	2,25E-06	4,33E-06	0,00355228	7,77E-08	9,49E-06
Fossil resource scarcity	kg oil eq	-0,22209798	0	0,00072594	0,00106707	0,11260211	2,45E-05	0,00096134
Water consumption	m3	0,13281707	0	1,23E-05	4,57E-05	0,12259027	0,00029518	0,00953078

Categoría de impacto	Unidad	Ref.-15°C	Electricity	Hydrogen	Venta MPS	Wastewater	Res. Solido
Global warming	kg CO2 eq	0,03701849	0,0301815	-0,15049401	-0,05836215	0,00017077	6,10E-07
Stratospheric ozone depletion	kg CFC11 eq	2,43E-08	1,99E-08	-2,67E-07	-1,43E-08	1,27E-09	3,06E-13
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	0,00690951	0,00565049	-0,00782488	-0,0013862	4,53E-05	6,92E-09
Ozone formation, Human health	kg NOx eq	3,77E-05	3,06E-05	-0,00050984	-6,74E-05	8,76E-07	5,17E-09
Fine particulate matter formation	kg PM2.5 eq	1,81E-05	1,43E-05	-0,00044028	-4,35E-05	6,22E-07	1,24E-09
Ozone formation, Terrestrial ecosystems	kg NOx eq	3,81E-05	3,08E-05	-0,00054273	-6,91E-05	8,79E-07	5,24E-09
Terrestrial acidification	kg SO2 eq	5,50E-05	4,38E-05	-0,00136894	-0,00013069	2,59E-06	2,73E-09
Freshwater eutrophication	kg P eq	5,46E-05	4,47E-05	-2,25E-06	-5,49E-06	9,84E-07	4,17E-11
Marine eutrophication	kg N eq	3,76E-06	3,08E-06	-2,35E-07	-3,72E-07	5,56E-06	2,98E-12
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00867055	0,00674615	-0,59598429	-0,08380776	0,00011364	5,66E-06
Freshwater ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00143232	0,001172	-0,00056335	-0,00018274	1,54E-05	1,31E-08
Marine ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00196443	0,00160714	-0,00115898	-0,00029416	2,09E-05	1,82E-08
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,0026315	0,00214782	-0,00056617	-0,00039745	5,27E-05	3,13E-09
Human non-carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,05828188	0,04766807	-0,02559533	-0,00933888	0,00245596	1,77E-07
Land use	m2a crop eq	0,01177198	0,00964456	-0,00158248	-0,00133678	1,75E-05	2,06E-07
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	1,66E-05	1,31E-05	-2,13E-05	-3,63E-06	1,66E-07	7,45E-11
Fossil resource scarcity	kg oil eq	0,00908824	0,0074032	-0,33437834	-0,01961948	2,73E-05	1,86E-07
Water consumption	m3	0,00101997	0,00031635	-7,94E-05	-6,16E-05	-0,00085256	4,48E-10

APARTIR DE ETANOL CON CATALIZADOR DE Hf:Zn

Categoría de impacto	Unidad	Total	Emisión directa	Cat. Hf:Zn	BioEthanol	Agua Caldera	DMF	CW
Global warming	kg CO2 eq	1,0263187	0	0,00314127	0,57947396	0,000770233	0,60659547	0,00274175
Stratospheric ozone depletion	kg CFC11 eq	1,70E-05	0	4,94E-09	1,67E-05	5,15E-10	2,83E-07	1,65E-09
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	0,11016513	0	0,00056543	0,00902044	0,000347391	0,03968606	0,0002612
Ozone formation, Human health	kg NOx eq	0,1615692	0,15178344	3,45E-06	0,0090247	1,44E-06	0,00120257	5,94E-06
Fine particulate matter formation	kg PM2.5 eq	0,02589755	0,01686483	1,80E-06	0,00858497	1,19E-06	0,00086882	7,57E-06
Ozone formation, Terrestrial ecosystems	kg NOx eq	0,16217875	0,15178344	3,48E-06	0,00961245	1,45E-06	0,00125429	6,01E-06
Terrestrial acidification	kg SO2 eq	0,08081294	0,05476108	4,95E-06	0,0252499	2,83E-06	0,00208783	1,97E-05
Freshwater eutrophication	kg P eq	0,00094164	0	4,50E-06	0,000233	6,96E-07	0,00014348	9,31E-07
Marine eutrophication	kg N eq	0,00476767	0	3,13E-07	0,00398619	5,44E-08	0,00073507	1,22E-07
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	4,3859555	0	0,00200953	3,9485187	0,000618778	1,3927675	0,00537241
Freshwater ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,06339328	0	0,00014313	0,03832512	2,05E-05	0,01083984	4,44E-05
Marine ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,05608067	0	0,00019436	0,02347933	2,83E-05	0,01368312	6,46E-05
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,05332111	0	0,00021927	0,01761787	3,90E-05	0,0097816	0,00016063
Human non-carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	2,8132918	0	0,00592779	1,9717865	0,000898848	0,27723984	0,00211507
Land use	m2a crop eq	27,317919	0	0,00104229	27,167557	0,000128707	0,03057549	0,00018714
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	0,00432503	0	1,98E-05	0,00382969	6,45E-07	0,00033118	7,59E-06
Fossil resource scarcity	kg oil eq	0,2230968	0	0,00075611	0,12139555	0,000202943	0,36457818	0,00076865
Water consumption	m3	0,15479818	0	3,27E-05	0,13216371	0,002449394	0,00869426	0,00762041

Categoría de impacto	Unidad	Ref.-5°C	Ref.-20°C	Electricity	Hydrogen	MPS uso	Wastewater	Res. Sólido
Global warming	kg CO2 eq	0,01248404	0,06610759	0,33000839	-0,09095133	-0,48428407	0,00023084	5,26E-07
Stratospheric ozone depletion	kg CFC11 eq	8,21E-09	4,35E-08	2,17E-07	-1,61E-07	-1,19E-07	1,72E-09	2,63E-13
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	0,00232912	0,01234253	0,06178323	-0,00472898	-0,01150258	6,13E-05	5,96E-09
Ozone formation, Human health	kg NOx eq	1,27E-05	6,74E-05	0,00033416	-0,00030812	-0,00055967	1,18E-06	4,45E-09
Fine particulate matter formation	kg PM2.5 eq	6,11E-06	3,22E-05	0,00015629	-0,00026609	-0,00036095	8,41E-07	1,07E-09
Ozone formation, Terrestrial ecosystems	kg NOx eq	1,28E-05	6,79E-05	0,00033695	-0,000328	-0,00057329	1,19E-06	4,52E-09
Terrestrial acidification	kg SO2 eq	1,86E-05	9,80E-05	0,00047843	-0,00082732	-0,00108449	3,51E-06	2,36E-09
Freshwater eutrophication	kg P eq	1,84E-05	9,75E-05	0,00048871	-1,36E-06	-4,55E-05	1,33E-06	3,59E-11
Marine eutrophication	kg N eq	1,27E-06	6,72E-06	3,37E-05	-1,42E-07	-3,08E-06	7,52E-06	2,57E-12
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,0029435	0,01541713	0,0737633	-0,36018418	-0,69542961	0,00015362	4,88E-06
Freshwater ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00048278	0,00255871	0,01281475	-0,00034046	-0,00151636	2,08E-05	1,13E-08
Marine ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00066215	0,00350922	0,0175727	-0,00070043	-0,00244089	2,82E-05	1,57E-08
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,0008873	0,00469981	0,02348456	-0,00034216	-0,00329798	7,12E-05	2,70E-09
Human non-carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,01964581	0,10411081	0,52120886	-0,01546859	-0,0774932	0,00331997	1,52E-07
Land use	m2a crop eq	0,00396714	0,02103206	0,10545488	-0,00095638	-0,01109249	2,36E-05	1,78E-07
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	5,64E-06	2,96E-05	0,00014364	-1,29E-05	-3,01E-05	2,24E-07	6,41E-11
Fossil resource scarcity	kg oil eq	0,00306529	0,01622842	0,0809475	-0,20208215	-0,16280075	3,69E-05	1,60E-07
Water consumption	m3	0,00037501	0,001715	0,00345902	-4,80E-05	-0,00051084	-0,00115249	3,86E-10

APARTIR DE ETANOL CON CATALIZADOR DE Y:Zn

Categoría de impacto	Unidad	Total	Emisión directa	Cat. Y:Zn	Bio-Ethanol	Uso CW	Ref.-25°C	Uso Ref.-50°C
Global warming	kg CO2 eq	2,4080517	0,799228	0,010047161	0,48800371	0,00078602	0,08657255	0,00461843
Stratospheric ozone depletion	kg CFC11 eq	1,49E-05	0	1,06E-08	1,41E-05	4,72E-10	5,69E-08	3,04E-09
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	0,25047013	0	0,00170128	0,007596556	7,49E-05	0,0161664	0,00086283
Ozone formation, Human health	kg NOx eq	0,008268214	0	1,09E-05	0,007600144	1,70E-06	8,82E-05	4,70E-06
Fine particulate matter formation	kg PM2.5 eq	0,007553196	0	5,43E-06	0,007229826	2,17E-06	4,20E-05	2,23E-06
Ozone formation, Terrestrial ecosystems	kg NOx eq	0,008695678	0	1,10E-05	0,008095117	1,72E-06	8,89E-05	4,74E-06
Terrestrial acidification	kg SO2 eq	0,022229207	0	1,60E-05	0,021264188	5,64E-06	0,00012809	6,81E-06
Freshwater eutrophication	kg P eq	0,002115615	0	1,34E-05	0,000196222	2,67E-07	0,00012769	6,82E-06
Marine eutrophication	kg N eq	0,003495148	0	1,54E-06	0,003356965	3,49E-08	8,80E-06	4,70E-07
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	3,7916011	0	0,003428323	3,3252431	0,0015402	0,02013354	0,00106667
Freshwater ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,08181967	0	0,000355706	0,032275484	1,27E-05	0,00335155	0,00017889
Marine ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,087770291	0	0,000487641	0,019773104	1,85E-05	0,00459653	0,00024534
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,10285337	0	0,000658964	0,014836879	4,60E-05	0,00615514	0,00032841
Human non-carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	3,7040684	0	0,014437311	1,660539	0,00060636	0,13636663	0,00727827
Land use	m2a crop eq	23,293997	0	0,002925381	22,879144	5,36E-05	0,02755111	0,00147086
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	0,004484063	0	0,000720895	0,003225173	2,18E-06	3,87E-05	2,06E-06
Fossil resource scarcity	kg oil eq	-0,074384834	0	0,002519703	0,1022332	0,00022036	0,02125112	0,00113355
Water consumption	m3	0,12426038	0	0,00010587	0,11130161	0,00218467	0,00215616	0,00010321

Categoría de impacto	Unidad	Natural gas	Electricity	uso MPS	Hydrogen	Ethylene	Propylene	Wastewater	Resid. Solido
Global warming	kg CO2 eq	0,00738452	1,1739482	0,3854653	-0,094409706	-0,18018007	-0,27359118	0,000177825	1,01E-06
Stratospheric ozone depletion	kg CFC11 eq	9,87E-09	7,72E-07	9,47E-08	-1,67E-07	-2,93E-10	-4,40E-10	1,33E-09	5,08E-13
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	2,57E-05	0,21978324	0,00915547	-0,004908799	-1,37E-05	-2,10E-05	4,72E-05	1,15E-08
Ozone formation	kg NOx eq	1,43E-05	0,00118871	0,00044547	-0,000319839	-0,00031784	-0,00044905	9,13E-07	8,60E-09
Fine particulate matter	kg PM2.5 eq	6,38E-06	0,00055598	0,0002873	-0,000276203	-0,00012014	-0,00018246	6,48E-07	2,06E-09
Ozone Terrestrial formation	kg NOx eq	1,55E-05	0,00119864	0,00045631	-0,000340472	-0,00034635	-0,0004904	9,15E-07	8,72E-09
Terrestrial acidification	kg SO2 eq	2,09E-05	0,00170194	0,0008632	-0,000858777	-0,00036585	-0,00055563	2,70E-06	4,55E-09
Freshwater eutrophication	kg P eq	1,30E-07	0,00173852	3,62E-05	-1,41E-06	-1,26E-06	-1,99E-06	1,03E-06	6,93E-11
Marine eutrophication	kg N eq	1,31E-08	0,00011971	2,46E-06	-1,48E-07	-1,96E-07	-2,94E-07	5,79E-06	4,96E-12
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,000256378	0,26240026	0,55352632	-0,37388001	-0,00088675	-0,00135472	0,00011834	9,41E-06
Freshwater ecotoxicity	kg 1,4-DCB	6,18E-06	0,04558628	0,00120694	-0,000353405	-0,00032284	-0,00049395	1,61E-05	2,18E-08
Marine ecotoxicity	kg 1,4-DCB	8,41E-06	0,06251185	0,00194283	-0,000727068	-0,00043759	-0,00067105	2,17E-05	3,03E-08
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	8,03E-06	0,08354229	0,00262502	-0,000355174	-0,00195102	-0,00309611	5,49E-05	5,20E-09
Human non-carcinogenic tox	kg 1,4-DCB	0,00022919	1,854111	0,0616806	-0,016056771	-0,00693555	-0,01074546	0,002557452	2,94E-07
Land use	m2a crop eq	2,64E-05	0,37513761	0,00882905	-0,000992741	-6,63E-05	-0,00010116	1,82E-05	3,43E-07
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	1,86E-07	0,00051098	2,39E-05	-1,34E-05	-1,04E-05	-1,64E-05	1,72E-07	1,24E-10
Fossil resource scarcity	kg oil eq	0,01577515	0,2879568	0,1295811	-0,20976623	-0,16986644	-0,25545186	2,84E-05	3,09E-07
Water consumption	m3	3,57E-06	0,0123049	0,0004066	-4,98E-05	-0,00137895	-0,00198961	-0,000887792	7,44E-10

APARTIR DE VÍA PETROQUÍMICA

Categoría de impacto	Unidad	Butadiene {RER} market for butadiene APOS, U
Global warming	kg CO2 eq	1,2288215
Stratospheric ozone depletion	kg CFC11 eq	2,36E-09
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	9,53E-05
Ozone formation, Human health	kg NOx eq	0,00245184
Fine particulate matter formation	kg PM2.5 eq	0,00099149
Ozone formation, Terrestrial ecosystems	kg NOx eq	0,00269983
Terrestrial acidification	kg SO2 eq	0,0030284
Freshwater eutrophication	kg P eq	6,91E-06
Marine eutrophication	kg N eq	1,69E-06
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00530604
Freshwater ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00181955
Marine ecotoxicity	kg 1,4-DCB	0,00245742
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,00955188
Human non-carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	0,03942913
Land use	m2a crop eq	0,00048104
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	6,55E-05
Fossil resource scarcity	kg oil eq	1,4215493
Water consumption	m3	0,0066593