

# Trabajo Fin de Grado

## Grado en Ingeniería Química

### Án alisis tecnoecon omico de la producci on de propilenglicol a partir de  oxido de propileno

Autor: Jos e Espallargas Garc a

Tutor:  ngel Luis Villanueva Perales

**Dpto. Ingenier a Qu mica y Ambiental**  
**Escuela T cnica Superior de Ingenier a**  
**Universidad de Sevilla**

Sevilla, 2019





Trabajo Fin de Grado  
Ingeniería Química

# **Análisis tecnoeconómico de la producción de propilenglicol a partir de óxido de propileno**

Autor:

José Espallargas García

Tutor:

Ángel Luis Villanueva Perales

Profesor Titular

Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental

Escuela Técnica Superior de Ingeniería

Universidad de Sevilla

Sevilla, 2019



Trabajo Fin de Grado: Análisis tecnoeconómico de la producción de propilenglicol a partir de óxido de propileno

Autor: José Espallargas García

Tutor: Ángel Luis Villanueva Perales

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

Presidente:

Vocales:

Secretario:

Acuerdan otorgarle la calificación de:

Sevilla, 2019

El Secretario del Tribunal



*A mi familia*

*A mis maestros*





# Agradecimientos

---

Agradecer a mi familia, amigos, compañeros y profesores porque sin ellos jamás habría llegado hasta aquí. Gracias a su apoyo, sufrimiento y constancia he podido realizar y acabar el grado de Ingeniería Química por la Universidad de Sevilla.

# Resumen

---

El presente proyecto consta de una parte teórica que introduce en el tema al lector familiarizándose con el proceso de producción de propilenglicol y con el alcance y objetivo del proyecto. También dispone de una parte descriptiva y de cálculo dónde se explica detalladamente los balances de materia y las simulaciones propuestas para el proceso. Finalmente acaba con un apartado económico dónde se calcula y analiza el potencial económico de la planta.

<b>Agradecimientos</b> .....	<b>9</b>
<b>Resumen</b> .....	<b>10</b>
<b>Índice</b> .....	<b>11</b>
Índice de Tablas.....	<b>13</b>
Índice de Figuras.....	<b>15</b>
<b>Notación</b> .....	¡Error! Marcador no definido.
<b>1 Antecedentes, Objetivos y Alcance</b> .....	<b>1</b>
1.1. <i>Antecedentes</i> .....	<i>1</i>
1.1.1 Descripción Del propilenglicol .....	1
1.1.1.1 Propiedades físicas del PG .....	2
1.1.1.2. Propiedades químicas del PG.....	3
1.1.2 Usos y aplicaciones .....	4
1.1.3. Almacenamiento y transporte del PG .....	6
1.1.4. Toxicología del PG.....	6
1.2. <i>Objetivos y alcance del proyecto</i> .....	<i>7</i>
<b>2 Mercado del PG y rutas de producción</b> .....	<b>9</b>
2.1. <i>Introducción al mercado PG</i> .....	<i>9</i>
2.2. <i>Rutas de producción.</i> .....	<i>11</i>
2.2.1. Hidratación del óxido de propileno .....	11
2.2.1.1. Hidratación no catalítica del óxido de propileno .....	12
2.2.1.2. Hidratación catalítica del óxido de propileno .....	12
2.2.1.3. Materias primas utilizadas en la hidratación de óxido de propileno.....	13
2.2.1.3.1. Óxido de propileno.....	13
2.2.1.3.2. Agua .....	13
2.2.2. Producción de PG a través de glicerol .....	14
<b>3 Memoria Descriptiva</b> .....	<b>15</b>
3.1. <i>Descripción del proceso</i> .....	<i>15</i>
3.2. <i>Especificaciones del diseño</i> .....	<i>19</i>
3.2.1. Alimentación .....	19
3.2.2. Reacción.....	19
3.2.3. Separación de los productos.....	20
3.3. <i>Descripción de la simulación y de los equipos</i> .....	<i>21</i>
3.3.1. Componentes involucrados en la simulación .....	21
3.3.2. Selección del método termodinámico.....	21
3.3.3. Equipos .....	21
3.3.3.1. Simulación del escenario 1 .....	22
3.3.3.1.1. Reactor CRV-101 .....	22
3.3.3.1.2. Cooler/Heater .....	22
3.3.3.1.3. Mixer .....	25
3.3.3.1.4. Tanque Flash .....	27
3.3.3.1.5. Columnas de destilación .....	29
3.3.3.1.5.1. T-102 .....	29

3.3.3.1.5.2. T-103.....	30
3.3.3.1.6. Bomba .....	30
3.3.3.1.7. Heat Exchanger .....	31
3.3.3.2. Simulación del escenario 2 .....	32
3.3.3.2.1. Reactor CRV-101.....	32
3.3.3.2.2. Heater/Cooler.....	32
3.3.3.2.3. Mixer.....	32
3.3.3.2.4. Tanque Flash.....	32
3.3.3.2.5. Columnas de destilación.....	32
3.3.3.2.6. Bomba .....	33
3.3.3.2.7. Heat Exchanger .....	33
3.4. <i>Convergencia de la planta</i> .....	34
3.4.1. Rendimiento de la reacción .....	34
3.4.2. Caudal de recirculación y alimentación a la planta .....	35
<b>4 Memoria De Cálculo .....</b>	<b>37</b>
4.2. <i>Diseño de las dimensiones básicas de los equipos y resultados de la simulación</i> .....	45
4.2.1. Volumen del reactor .....	45
4.2.2. Área de transferencia de los intercambiadores.....	45
4.2.3. Diseño básico y resultados de la simulación para las torres de destilación.....	49
<b>5 Análisis Económico .....</b>	<b>55</b>
5.1. <i>Intercambiadores de calor</i> .....	55
5.2. <i>Evaporadores</i> .....	56
5.3. <i>Torres de destilación</i> .....	57
5.4. <i>Reactor CSTR</i> .....	58
5.5. <i>Costes totales de inversión de los equipos</i> .....	59
5.6. <i>Costes totales de la planta</i> .....	59
5.7. <i>Potencial económico de la planta</i> .....	61
<b>6 Conclusiones .....</b>	<b>65</b>
<b>7. Anexo 1.....</b>	<b>66</b>
7.1.1. Correlación de Gililand .....	66
7.1.2. Ecuación de Fenske .....	66
7.1.3. Ecuación de Underwood para calcular la relación de reflujo mínimo .....	67
7.1.4. Relación de reflujo .....	67
<b>Referencias.....</b>	<b>68</b>

# Índice de Tablas

---

Tabla 1. Propiedades físicas de los glicoles [1]	2
Tabla 2. Empresas que producen más PG	10
Tabla 3. Propiedades del óxido de propileno	13
Tabla 4. Proporciones de glicoles según ratio molar [10]	20
Tabla 5. Propiedades típicas del propilenglicol industrial.	21
Tabla 6. Características más importantes de los Heater/Cooler del proceso	23
Tabla 7. Características más importantes de los mixers del proceso	25
Tabla 8. Características más importantes de los tanques flash del proceso	27
Tabla 9. Parámetros de diseño del escenario 1 para el modelo aproximado de la columna de destilación T-102.	29
Tabla 10. Especificaciones iniciales para el escenario 1 del modelo aproximado de la columna de destilación T-103.	30
Tabla 11. Temperaturas de entrada al equipo E-102 en el escenario 1	31
Tabla 12. Temperaturas de entrada para los Heater/Cooler del escenario 2.	32
Tabla 13. Especificaciones iniciales para el escenario 2 del modelo aproximado de la columna de destilación T-102.	33
Tabla 14. Especificaciones iniciales para el escenario 2 del modelo aproximado de la columna de destilación T-103.	33
Tabla 15. Temperaturas de entrada al equipo E-102.	34
Tabla 16. Balance materia escenario 1	39
Tabla 17. Balance de materia escenario 1	40
Tabla 18. Balance de materia escenario 2	41
Tabla 19. Balance de materia escenario 2	43
Tabla 20. Cálculo del volumen del reactor según ratio H <sub>2</sub> O/PG.	45
Tabla 21. Diseño del equipo E-103.	46
Tabla 22. Diseño del equipo E-104.	46
Tabla 23. Diseño del equipo E-103.	46
Tabla 24. Diseño del equipo E-104.	47
Tabla 25. Diseño del equipo E-100+V-102.	47
Tabla 26. Diseño del equipo E-101+V-103.	47
Tabla 27. Diseño del equipo E-100-102.	48
Tabla 28. Diseño del equipo E-101+V.103.	48

Tabla 29. Diseño del equipo E-102.	48
Tabla 30. Diseño del equipo E-102.	49
Tabla 31. Resultados para el escenario 1 del modelo aproximado de la columna de destilación T-102.	49
Tabla 32. Resultados para el escenario 1 del modelo aproximado de la columna de destilación T-103.	51
Tabla 33. Resultados para el escenario 2 del modelo aproximado de la columna de destilación T-102.	51
Tabla 34. Resultados para el escenario 2 del modelo aproximado de la columna de destilación T-103	52
Tabla 35. Diámetros y alturas de las torres de destilación del escenario 1	53
Tabla 36. Diámetros y alturas de las torres de destilación del escenario 2	53
Tabla 37. Diámetros y alturas de las torres de destilación del escenario 1	53
Tabla 38. Diámetros y alturas de las torres de destilación del escenario 2	54
Tabla 39. Diseño y coste de inversión del equipo E-103.	55
Tabla 40. Diseño y coste de inversión del equipo E-104.	55
Tabla 41. Diseño y coste de inversión del equipo E-102.	55
Tabla 42. Coste de inversión del equipo E-103.	56
Tabla 43. Coste de inversión del equipo E-104.	56
Tabla 44. Coste de inversión del equipo E-102.	56
Tabla 45. Coste de inversión del equipo E-100+V-102.	56
Tabla 46. Coste de inversión del equipo E-101+V-103.	56
Tabla 47. Diseño y coste de inversión del equipo E-100-102.	57
Tabla 48. Diseño y coste de inversión del equipo E-101+V.103.	57
Tabla 49. Coste de inversión torre de destilación T-102.	57
Tabla 50. Coste de inversión torre de destilación T-103.	58
Tabla 51. Coste de inversión torre de destilación T-102.	58
Tabla 52. Coste de inversión torre de destilación T-103.	58
Tabla 53. Coste de inversión Reactor CRV-101 escenario 1.	59
Tabla 54. Coste de inversión Reactor CRV-101 escenario 2.	59
Tabla 55. Coste total de inversión de los equipos para los dos escenarios	59
Tabla 56. Factores Método de Chilton para el escenario 1 [15]	60
Tabla 57. Factores Método de Chilton para el escenario 2 [15]	61
Tabla 58. Coste anual de las materias primas para el escenario 1.	62
Tabla 59. Coste anual de las materias primas para el escenario 1.	62
Tabla 60. Coste de servicios anuales para el escenario 1.	62
Tabla 61. Coste de servicios anuales para el escenario 2.	63
Tabla 62. Venta de propilenglicol para los dos escenarios	63

# Índice de Figuras

---

Figura 1. Molécula propilenglicol [9]	1
Figura 2. Viscosidad frente % glicol [1]	3
Figura 3. . Presión de vapor frente T [1]	3
Figura 4. Densidad frente % glicol [1]	3
Figura 5. T solidificación frente % glicol [1]	3
Figura 6. Principales productores de PG a mediados del 2000	9
Figura 7. Consumo mundial de propilenglicol	10
Figura 8. Esquema de la producción de PG.	12
Figura 9. Reacción global para producir propilenglicol	13
Figura 10. Reacciones para producir PG a través de glicerol	14
Figura 11. Diagrama de bloques del proceso	15
Figura 12. Diagrama de flujo del proceso.	17
Figura 13. Hidratación del óxido de propileno	19
Figura 14. Torre T-102	29
Figura 15. Torre T-103	30
Figura 16. Intercambiador E-102	31





# 1 ANTECEDENTES, OBJETIVOS Y ALCANCE

## 1.1. Antecedentes

### 1.1.1 Descripción Del propilenglicol

La familia de compuestos químicos de propilenglicol se divide en propilenglicol (PG), dipropilenglicol (DPG) y tripropilenglicol (TPG). A estos compuestos se le denomina glicoles porque están compuestos de moléculas que contienen dos grupos  $-OH$  en átomos de carbono adyacente, las moléculas que contienen dos grupos  $-OH$  se les denomina dialcoholes o dioles.

El nombre químico que le asigna la IUPAC al propilenglicol es 1,2-propanodiol, al dipropilenglicol es oxibispropanol y al tripropilenglicol es ((1-Metil-1,2-etanodil) bis (oxi)) bis-propanol. Estos productos químicos se fabrican como coproductos y comercialmente se utilizan en una gran variedad de aplicaciones. La gran mayoría de su producción comercial es a través de la hidratación del óxido de propileno.

El compuesto químico más importante de esta familia es el monopropilenglicol y sus nombres comerciales más comunes son propilenglicol industrial (PGI) y propilenglicol USP (PG USP), que designa la calidad industrial general en comparación con la categoría de alimentos y medicamentos.

La fórmula química del monopropilenglicol es  $C_3H_8O_2$  y su estructura química está representada en la figura 1.

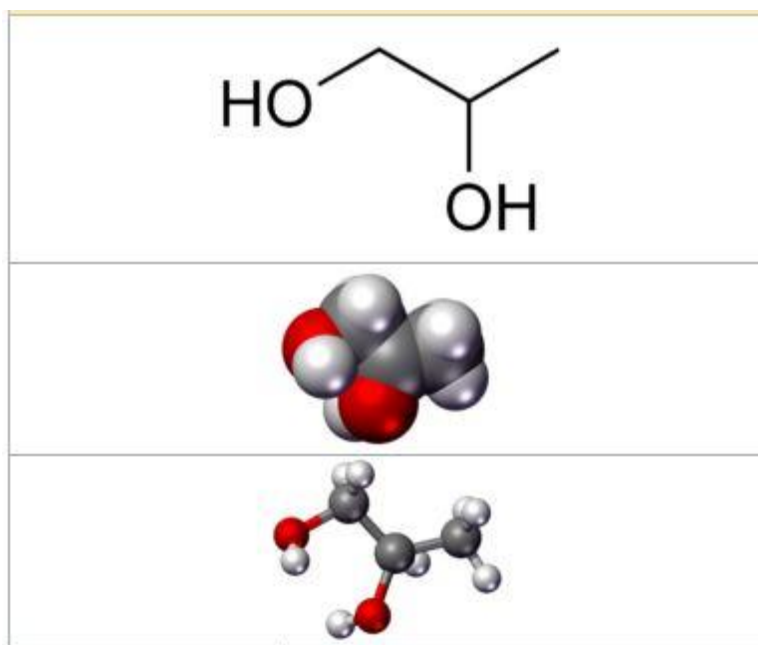


Figura 1. Molécula propilenglicol [9]

### 1.1.1.1 Propiedades físicas del PG

El monopropilenglicol [1] es un compuesto líquido claro, incoloro y muy higroscópico (el DPG y el TPG tienen propiedades similares). Estos glicoles son líquidos moderadamente viscosos que no se cristalizan fácilmente, pero se solidifican en masas vítreas al enfriarse.

Las principales propiedades físicas de estos dioles se muestran en la tabla 1.

Property	1,2-Propanediol	Dipropylene glycol <sup>†</sup>	Tripropylene glycol <sup>†</sup>
$M_r$	76.10	134.18	196.26
$bp$ , °C	187.9	232.8	271
$mp$ , °C	< -60	< -40	< -30
$d_{20}^{20}$	1.036	1.023	1.019
Refractive index $n_D^{20}$	1.4328	1.4415	1.4449
Vapor pressure (20°C), kPa	0.011	< 0.001	< 0.001
Heat of vaporization at $bp$ , kJ/kg	711	400	330
Specific heat capacity (20°C), kJ kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	2.49	2.36	2.26
Electrical conductivity (20°C), $\mu S/m$	4.4	0.19	
Cubic coefficient of expansion (20°C), K <sup>-1</sup>	$7.2 \times 10^{-4}$	$7.4 \times 10^{-4}$	$7.7 \times 10^{-4}$
Heat conductivity (20°C), Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	0.20	0.16	0.11
Dynamic viscosity (20°C), mPa·s	56	107	84
Surface tension (20°C), mN/m	38	35	35
Dielectric constant (20°C)	28	21	14
Flash point (DIN 51 758), °C	103	120	149
Ignition temperature (DIN 51 794), °C	410	350	260
Lower explosion limit in air, vol%	2.6	1.26	1.3

Tabla 1. Propiedades físicas de los glicoles [1]

El monopropilenglicol es miscible con agua y otros disolventes polares (alcoholes y acetona). Además es buen solvente en muchas sustancias químicas orgánicas polares, tales como fenoles, alcoholes, colorantes, productos naturales y algunas resinas. El propilenglicol es escasamente soluble en solventes no polares, como éteres de petróleo, benceno, hidrocarburos aromáticos y al tetracloruro de carbono.

El propilenglicol se está utilizando como una alternativa al etilenglicol en sistemas anticongelantes debido en gran medida a que reduce el punto de congelación del agua. La temperatura de solidificación del PG, del DPG y del TPG con respecto al tanto por ciento de agua en disolución se representa gráficamente en la figura 5. Las viscosidades y las densidades de las soluciones acuosas de estos compuestos se representan en las figuras 2 y 4 y la presión de vapor con respecto a la temperatura en la figura 3.

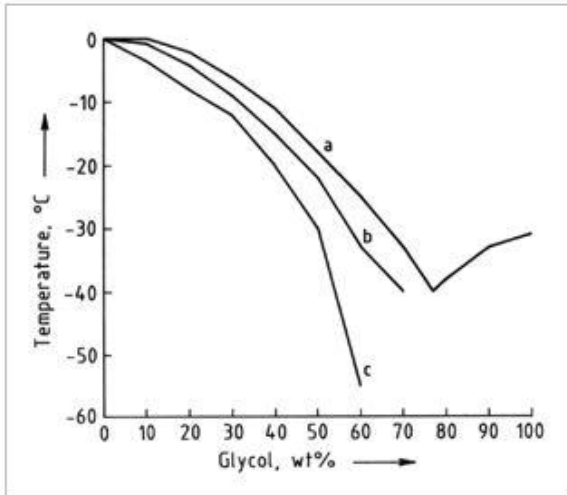


Figura 5. T solidificación frente % glicol [1]

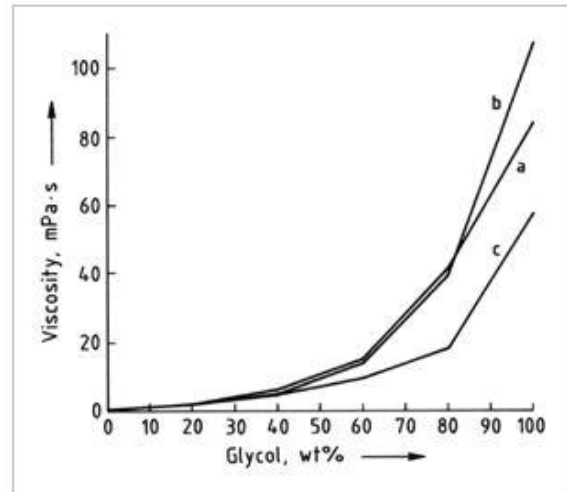


Figura 2. Viscosidad frente % glicol [1]

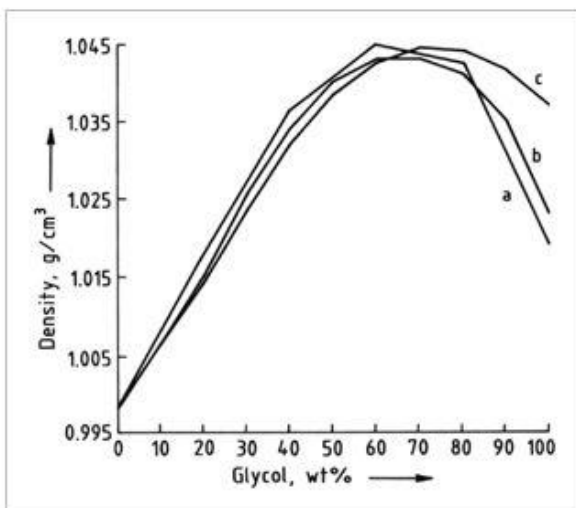


Figura 4. Densidad frente % glicol [1]

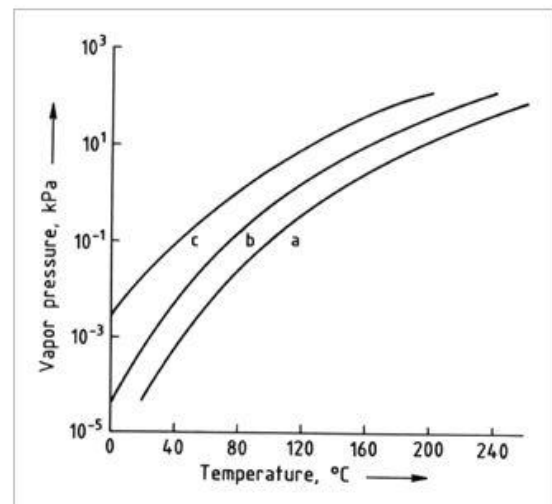


Figura 3. . Presión de vapor frente T [1]

### 1.1.1.2. Propiedades químicas del PG

El monopropilenglicol [2] es una molécula pequeña compuesta por tres átomos de carbono, dos átomos de oxígeno y ocho átomos de hidrógeno y es un alcohol difuncional con un hidroxilo primario y uno secundario. Químicamente, la presencia del grupo hidroxilo secundario diferencia el

propilenglicol del etilenglicol, que tiene dos grupos hidroxilos primarios. Su peso molecular es 76,09 g/mol y es un producto muy soluble en agua, de hecho, el propilenglicol es higroscópico, lo que significa que puede extraer agua del aire y disolverla. Dicha molécula es muy estable y no se descompone con el tiempo. Es un poco inflamable a alta temperatura y no reacciona con el aire. De las propiedades químicas más importantes de este compuesto es que al mezclarse con agua eleva su punto de ebullición y disminuye el punto de congelación.

El propilenglicol [1] es ligeramente tóxico para los ojos y la piel y en dosis elevadas si se ingiere. El compuesto es absorbido por la piel, por lo que la exposición de grandes cantidades provoca síntomas similares a los producidos por ingestión.

### 1.1.2 Usos y aplicaciones

El propilenglicol [8] encuentra su mayor uso en la fabricación de resinas de poliéster insaturado. Se hace reaccionar con ácidos dicarboxílicos aromáticos saturados e insaturados, tales como el ácido isoftálico y el anhídrido maleico. Las resinas resultantes se disuelven en estireno u otro monómero polimerizable, luego se combinan con una carga, vidrio troceado, un iniciador de polimerización de peróxido y otros aditivos, y se curan para producir un compuesto termoestable reticulado duro. Las aplicaciones para tales productos incluyen plásticos para automóviles, embarcaciones de fibra de vidrio y construcción.

El propilenglicol tiene muchas aplicaciones en la industria alimentaria y farmacéutica.

#### 1. Aplicaciones en la industria [8] alimentaria:

- Soluciones y emulsiones aromáticas. Es un compuesto muy eficaz como solvente para aromas.
- Extractor de aromas o auxiliar del proceso. Se utiliza como solvente en la extracción del aroma de vainilla de la planta de la vainilla y del aroma de café a partir del café tostado. Su alto poder solubilizador permite su uso en la extracción de muchas otras materias aromatizantes naturales.
- Humectación y rehidratación. El PG es la mejor elección entre los alcoholes polihídricos para proporcionar humedad o balance humectante. Es particularmente efectivo para alimentos con baja humedad y se usa ampliamente en frutas y vegetales procesados.
- Solvente para colorantes alimenticios. Es un excelente solvente y es ampliamente utilizado para colorantes alimenticios. Sus ventajas sobre otros solventes usados para este propósito incluyen baja volatilidad y resistencia a la luz.
- Solventes para antioxidante. El hydroxianisol butilado, el hidroxitolueno butilado y el propilgalato son antioxidantes que generalmente se disuelven en PG. Estos antioxidantes son usados en diversos alimentos para seres humanos y animales.
- Agente plastificador y suavizante. Se utiliza en la fabricación de los sellos y tapas de corcho utilizados en alimentos y bebidas, es necesario incorporar un agente plastificador para mantener la flexibilidad del corcho y condiciones adecuadas para tapan el envase. Además se utiliza también como agente suavizante en alimentos semi húmedo para proporcionar una sensación agradable durante la degustación.

- Empaques y tintas. El PG es un excelente solvente para tintas de alta velocidad, aprobadas para contacto indirecto con alimentos.
- Medio de transferencia de calor. La industria alimenticia utiliza ampliamente el propilenglicol para la transferencia de calor en la elaboración de cerveza, el procesamiento de leche y la fabricación de helados y otras bebidas. Es un buen fluido de transferencia de calor debido a que este disminuye el punto de congelación del fluido.
- Limpieza de equipos. El PG puede usarse para prevenir la contaminación de equipos de procesamiento de alimentos cuando se encuentran fuera de operación. Al limpiar tanques, tuberías, válvulas, etc, a menudo es casi imposible eliminar por completo las materias alimenticias. A menos que se tomen medidas preventivas, estos residuos podrían deteriorar y contaminar la producción futura.

## 2. Aplicaciones [8] en cosmética:

- Desodorantes y antiperspirantes. Los desodorantes roll-on dominan el mercado y la tendencia actual es hacia productos transparentes en gel. El PG ha reemplazado el alcohol etílico en muchas de las fórmulas debido a los requisitos de menos volatilidad, nulo olor, estabilidad de la fórmula y propiedades de viscosidad mejoradas.
- Productos para el cuidado de la piel. Los productos para el cuidado de la piel incluyen humectantes para manos y cuerpo, humectantes faciales, filtros solares y limpiadores. El PG puede utilizarse como solvente en productos suaves de limpieza para la piel y como estabilizador para surfactantes.
- Productos para el cuidado del cabello. El PG se encuentra en diversos productos para el cuidado del cabello incluyendo champús, acondicionadores, fijadores y jaleas.

## 3. Aplicaciones [8] en productos farmacéuticos:

- En la preparación de un producto farmacéutico, los ingredientes activos deben ser solubilizados en un ingrediente de base para el uso eficaz del producto. Debido a su afinidad tanto con compuestos hidrófilos como hidrófobos, así como su seguridad comprobada, el PG constituye una base muy eficaz para la elaboración de medicamentos orales, tópicos o inyectables. Además de su solvencia, este también sirve como emoliente y humectante, propiedades deseables para mejorar la apariencia y la aplicación de productos tópicos.

### 1.1.3. Almacenamiento y transporte del PG

El almacenamiento [8] y manejo del propilenglicol se puede decir que es bastante simple ya que este producto tiene un punto de escurrimiento menor a  $-57^{\circ}\text{C}$ , no es corrosivo, su punto de inflamación es de  $104^{\circ}\text{C}$ , y no representa ningún peligro para la salud humana o animal, ni para el medio ambiente.

El material más adecuado para almacenar el propilenglicol es el acero inoxidable; sin embargo, la FDA de Estados Unidos también considera aceptables los tanques de acero carbono recubiertos con resinas epóxicas o fenólicas. Los tanques de acero carbono no recubiertos son una fuente de coloración y contaminación por hierro y deben evitarse a fin de mantener la calidad del propilenglicol.

El propilenglicol se deteriora ligeramente cuando entra en contacto con el aire a temperaturas normales (este efecto se nota principalmente en el olor y el sabor); en consecuencia, se debe utilizar un gas inerte, como el nitrógeno seco, para llenar el espacio vacío que queda en el tanque y así eliminar el oxígeno. Dado que el propilenglicol es muy higroscópico, el uso de nitrógeno seco también evitará la acumulación de agua en el tanque.

Para ser bombeado más fácilmente, se recomienda almacenar el propilenglicol a temperaturas superiores a  $2^{\circ}\text{C}$ . Si se utilizan serpentines de calentamiento internos o calentadores eléctricos externos para mantener la facilidad de bombeado, debe tenerse cuidado para asegurar que el glicol no entre en contacto con superficies metálicas calientes más allá de los  $135^{\circ}\text{C}$ . La máxima presión de trabajo sugerida es de 2 bar.

El plazo de validez recomendado para el producto a granel o empacado en barriles originales con lacre es de 24 meses, en condiciones normales de almacenamiento. La calidad del propilenglicol almacenado puede verificarse mediante pruebas de acidez, color y olor.

En resumen el propilenglicol son materiales estables que no requieren procedimientos de manipulación especiales para su almacenamiento y transporte.

### 1.1.4. Toxicología del PG

La toxicidad [2] oral aguda de una sola dosis de propilenglicol es muy baja. La dosis LD50 para ratas de laboratorio varía entre 19800 y 33700 mg/kg. La toxicidad oral crónica es también muy baja. Los estudios han demostrado que las ratas no se han visto afectadas después de recibir 10% de propilenglicol en el agua que beben, durante 140 días. Debido a esta baja toxicidad oral, el propilenglicol es generalmente reconocido como seguro (Generally Recognized as Safe - GRAS) por la FDA para ser usado en alimentos y productos farmacéuticos, cuando se fabrica y utiliza de acuerdo con los requisitos establecidos por la propia FDA. Los datos históricos demuestran que ni los seres humanos ni los animales se han visto afectados por dosis bajas de propilenglicol. El contacto prolongado con el producto no es irritante para la piel. La exposición [8] repetida al mismo podría causar descamación y reblandecimiento de la piel. Durante una sola exposición prolongada es poco probable que el material sea absorbido por la piel en cantidades dañinas. Podría absorberse en cantidades potencialmente peligrosas si se aplica abundantemente en quemaduras severas (de segundo o tercer grado), sobre áreas extensas del cuerpo, como componente de cremas u otras aplicaciones tópicas. A temperatura ambiente, la inhalación de vapores de propilenglicol es poco probable debido a su muy baja presión de vapor. La exposición a rocíos o humos artificiales podría ser irritante para el tracto respiratorio superior y debe evitarse. Si bien la Agencia de Protección Ambiental (EPA, por sus siglas en inglés) de Estados Unidos ha determinado que no es necesario establecer un límite de exposición al propilenglicol en lugares de trabajo, la Asociación de Higiene Industrial de Estados Unidos recomienda una exposición máxima de ocho horas para una concentración total de vapor y aerosol de 50 ppm.

## 1.2. Objetivos y alcance del proyecto

El propósito de este proyecto es el modelado, simulación y análisis tecnoeconómico del proceso de producción de propilenglicol mediante la hidratación del óxido de propileno. Para ello se usará el simulador comercial Aspen Hysys. La planta se diseña para una capacidad de producción de noventa mil toneladas métricas por año de propilenglicol con una pureza mayor de 99,5% n / n.

Ya que el desempeño del reactor, y por tanto la economía del proceso, dependen del exceso de agua con la que se lleve a cabo la reacción, se estudiarán dos escenarios con diferentes excesos de agua para ver su impacto.





## 2 MERCADO DEL PG Y RUTAS DE PRODUCCIÓN

### 2.1. Introducción al mercado PG

Wurtz [2] fue el primero en preparar PG en el año 1859 por hidratación del diacetato de propilenglicol, y fue comercializado en 1931 por Carbide y Carbon Chemical Corp. La primera producción comercial utilizó el proceso de clorhidrina para la obtención de óxido de propileno, esta se hidrolizó y se obtuvo el glicol. A mediados de la década de 1930, Du Pont Co trabajaba en una planta química de hidrogenación de aceite de coco a una alta presión que formaba PG como subproducto. El PG poco a poco ganaba aceptación como sustituto del glicerol en productos farmacéuticos, y la escasez de glicerol en la Segunda Guerra Mundial conllevó a nuevas instalaciones de producción por parte de Dow Chemical Co en 1942 y Wyandotte Chemical Corp en 1948.

La producción [2] mundial de PG a mediados del 2000 fue de aproximadamente  $1,6 \times 10^6$  toneladas. La producción, como bien se muestra en la figura 6, se concentró en Estados Unidos (43%) y Europa Occidental (36%). Japón (5%) y la República de Corea (3%) formaron el siguiente grupo. Lo restante lo forman países como México, India, países de Europa del este, Singapur, China y Australia.

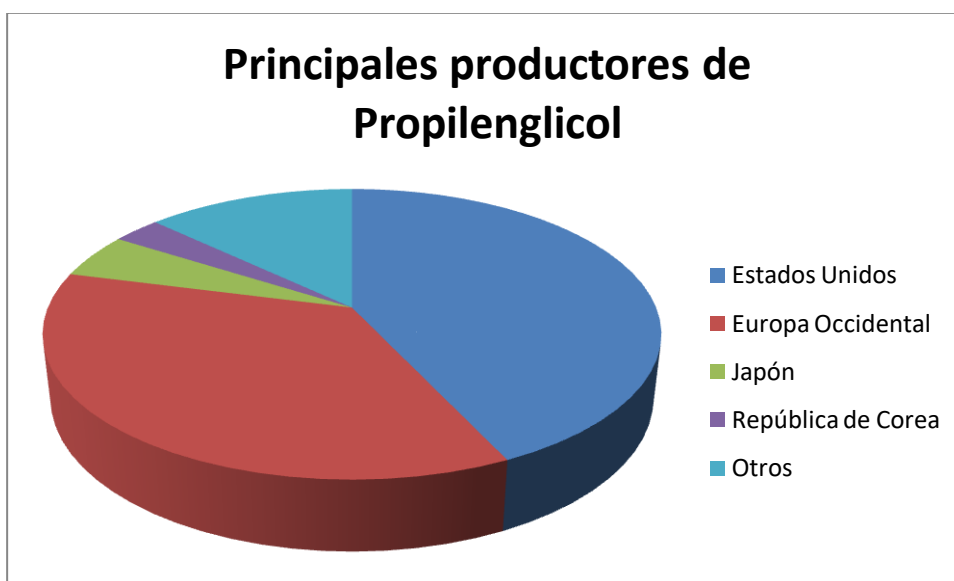


Figura 6. Principales productores de PG a mediados del 2000

En la tabla 2 [2] se muestra las empresas de Estados Unidos que más producen propilenglicol y los niveles de producción que trabajan en el año 2010.

Producer	Location	Annual capacity, 10 <sup>3</sup> t
Lyondell	Bayport, Tex.	249
Dow <sup>a</sup>	Freeport, Tex.	125
Dow <sup>a</sup>	Plaquemine, La.	118
Huntsman	Port Neches, Tex.	54
Arch Chemicals	Brandenburg, Ky.	34
<i>Total</i>		580

Tabla 2. Empresas que producen más PG

Dow Chemical [8] Company y LyondellBasell Industries son los dos actores dominantes en la industria del propilenglicol con su capacidad basada en óxido de propileno que representa aproximadamente el 29% y el 15% de la capacidad mundial, respectivamente. Dow tiene plantas de PG en Estados Unidos, Europa Occidental, Brasil, Australia y Tailandia, y pronto comenzará a operar una nueva planta de empresas conjuntas en Arabia Saudita. LyondellBasell Industries tiene plantas en los Estados Unidos y Europa Occidental.

Los tres productores más nuevos, Archer Daniels Midland Company (Estados Unidos), Global BioChem Technology Group (China) y Oleon (Bélgica), fabrican monopropilenglicol a partir de recursos renovables.

La figura 7 [7] muestra el consumo mundial de propilenglicol:

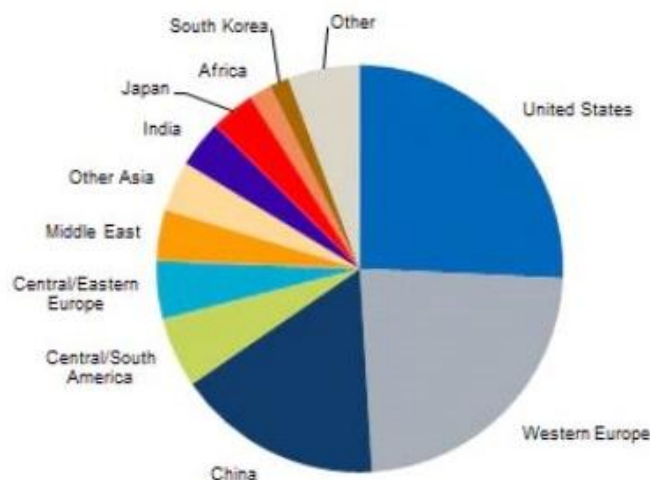


Figura 7. Consumo mundial de propilenglicol

Las resinas [7] de poliéster insaturado, cómo ya se dijo antes, son el uso final más grande para el propilenglicol, especialmente en China y otros países en desarrollo. Este segmento de mercado representó el 41% del consumo en las principales regiones del mundo en 2016. La demanda está fuertemente influenciada por las tendencias de la industria de la construcción regional y la salud general de las economías locales. El consumo de propilenglicol en este mercado crecerá a una tasa de casi 3% anual durante el período de pronóstico. Se producirán altas tasas de crecimiento, especialmente en China, en otras partes de Asia y en Europa Central y Oriental.

Otros usos industriales, incluidos fluidos funcionales, poliuretanos, pinturas y recubrimientos, y diversas aplicaciones han aumentado el consumo de propilenglicoles, que representan el 30% del consumo en las principales regiones del mundo en 2016. El consumo mundial de PG para esta categoría crecerá a un ritmo de alrededor del 2.0% anual durante el período de pronóstico. El crecimiento ocurrirá especialmente en China y otras regiones en desarrollo.

El mercado de anticongelantes, que incluye refrigerantes para motores y fluidos descongelantes, ha aumentado el uso de propilenglicol, aunque representa un pequeño porcentaje del mercado mundial total. En América del Norte, aunque los especialistas en marketing han promocionado los atributos ambientales y de seguridad del propilenglicol, no ha habido una penetración significativa de propilenglicol en este mercado. Otra aplicación importante en América del Norte y Europa occidental es el uso como disolvente para detergentes líquidos.

Hay grandes influencias económicas a demanda en los mercados cíclicos; por ejemplo, el consumo de propilenglicol para la producción de resinas de poliéster insaturado disminuyó en un 22% por año en los Estados Unidos y un 7% en Europa occidental como resultado de las caídas en los mercados de la construcción y la industria durante 2008-09, aunque la producción en Ambas regiones se recuperaron en cierta medida durante 2010-11.

El mercado se está consolidando y cambiando a China y otros países asiáticos (excluido Japón). El mercado está en continuo riesgo de consolidación y racionalización, lo que afectará a un número cada vez mayor de agentes globales y líneas de producción / productores pequeños y antiguos.

En general, el crecimiento en los mercados primarios de propilenglicoles -resinas de poliéster insaturado y una variedad de usos industriales- dependerá del desempeño de la economía en general; la tasa de crecimiento anual promedio mundial pronosticada será de aproximadamente 2.5% hasta 2021.

## **2.2. Rutas de producción.**

### **2.2.1. Hidratación del óxido de propileno**

A nivel industrial [1] el principal proceso para la producción de propilenglicol es la hidratación directa de óxido de propileno con agua. El dipropilenglicol y el tripropilenglicol se forman a través de la adición secuencial de óxido de propileno a 1,2-propanodiol. Estos tres compuestos se forman simultáneamente y se separan por destilación.

Dentro de la hidratación del óxido de propileno se pueden diferenciar dos procesos según si esta utiliza catalizador o no.

### 2.2.1.1. Hidratación no catalítica del óxido de propileno

El agua y el óxido de propileno [2] se combinan en la etapa inicial del proceso a una relación molar de 1:15 a una temperatura inicial de 125°C y a una presión aproximadamente de 20 bar (se puede observar la estequiometría de las reacciones en el apartado 3.2.2.). La reacción que se produce en el reactor [4] en fase líquida y es exotérmica lo que conlleva a un aumento de temperatura a la salida del reactor. La relación molar resultante de monopropilenglicol, dipropilenglicol y tripropilenglicol es aproximadamente 100:10:1.

En la figura 8 [2] se aprecia un esquema de la producción de PG siendo la a) el reactor; la b) el evaporador (típicamente 2- 4 columnas); la c) columna de destilación del monopropilenglicol; la d) columna de destilación del dipropilenglicol; la e) columna de destilación de tripropilenglicol.

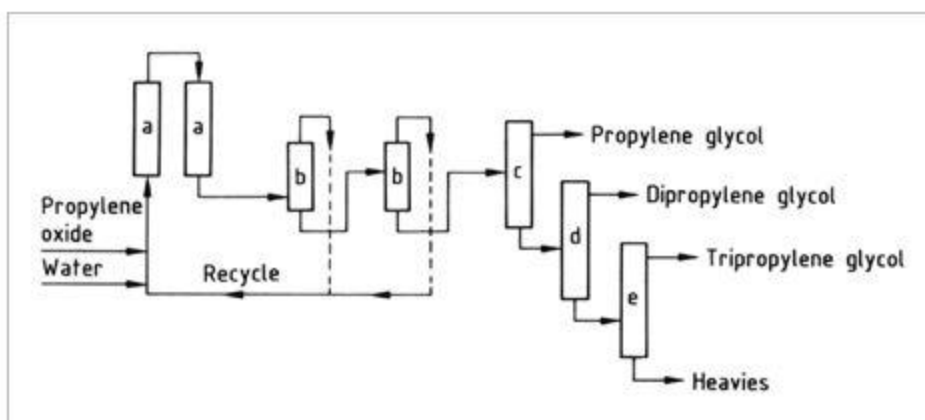


Figura 8. Esquema de la producción de PG.

La mezcla de agua-glicol [2] sale de la zona del reactor a) a aproximadamente 200°C y se retira el agua en los evaporadores (b). Tras esto se lleva a tres columnas de destilación de vacío sucesivas (c-e) que separan el 1,2-propanodiol de alta pureza, dipropilenglicol y el tripropilenglicol. El residuo representa una mezcla de glicoles superiores, que tienen algún uso comercial limitado. Los desechos de este proceso son extraordinariamente bajos. Estos glicoles tienen una toxicidad muy baja por lo que representan un riesgo mínimo para el medio ambiente, además son fácilmente biodegradables.

### 2.2.1.2. Hidratación catalítica del óxido de propileno

El esquema del proceso para la hidratación catalítica del óxido de propileno es igual que en la no catalítica, pero se trabaja con unas condiciones de reacción diferentes. El catalizador utilizado es el ácido sulfúrico el cual nos permite trabajar a una presión igual a la atmosférica y una temperatura cercana a la temperatura ambiente (se profundizará más detalladamente en la sección 3.2.2.).

La reacción exotérmica (ver figura 9) que se produce [4] entre el óxido de propileno y el agua, cuando se cataliza con ácido sulfúrico, se comporta como una reacción de primer orden con respecto al óxido de propileno y de orden cero con respecto al agua siempre que esta se encuentre en exceso.

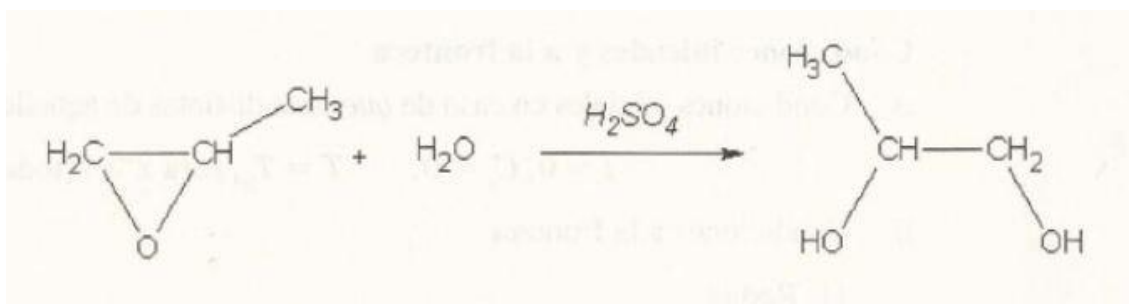


Figura 9. Reacción global para producir propilenglicol

### 2.2.1.3. Materias primas utilizadas en la hidratación de óxido de propileno

#### 2.2.1.3.1. Óxido de propileno

El óxido de 1,2-propileno (OP), es un líquido [6] incoloro, muy volátil a temperatura ambiente y presión atmosférica. En estado líquido es muy inflamable y con vapor de agua forma una mezcla explosiva en presencia de aire. Este va a ser, junto al agua, el reactivo más importante para la producción de propilenglicol y en la tabla 2 se representan algunas de sus propiedades más importantes.

Propiedad	Valor
Masa Molar	58.08 g/mol
Punto de ebullición (101.3 kPa)	34.2°C
Temperatura Crítica	209.1°C
Presión Crítica	4920 kPa
Solubilidad del Óxido de Propileno en agua a 20°C	40.5% peso
Solubilidad de agua en Óxido de Propileno a 20°C	12.8% peso
Densidad (20°C)	0.83 g/cm <sup>3</sup>

Tabla 3. Propiedades del óxido de propileno

El óxido de propileno es un compuesto químico orgánico utilizado principalmente para la producción de polioles poliéter, propilenglicol, éteres de glicol y muchos otros productos útiles. El óxido de propileno fue preparado por primera vez en 1861 por Oser y se fabrica mediante dos procesos básicos: el proceso tradicional de clorhidrina o por reacción de propileno con hidroperóxido de etilbenceno.

#### 2.2.1.3.2. Agua

El agua, en este proceso, es muy importante [4] porque se usa como reactivo en exceso en la reacción.

### 2.2.2. Producción de PG a través de glicerol

Un compuesto [2] químico interesante para producir 1,2-propanodiol es el glicerol, el cual es un subproducto de la producción de biodiesel a partir de la transesterificación de aceites vegetales. La producción de 100 Kg de biodiesel produce aproximadamente 10 kg de glicerol crudo con una concentración de 50-55%. El glicerol se hidrogena para formar el propilenglicol en presencia de catalizadores metálicos e hidrógeno puro. La reacción tiene lugar en un proceso de dos etapas a través de un intermediario de acetol. En el primer paso, el glicerol se convierte en acetol en presencia de un catalizador metálico. En el segundo paso, el acetol se hidrogena para producir el propilenglicol con presencia de unos catalizadores parecidos a los hablados antes. La selectividad puede estar influenciada por el catalizador utilizado y se encontró que el mejor catalizador era el cromito de cobre.

En la figura 10 se muestra las dos reacciones que producen el propilenglicol a través del glicerol.

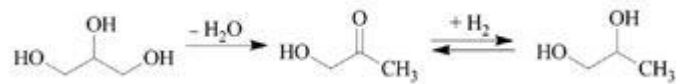


Figura 10. Reacciones para producir PG a través de glicerol

# 3 MEMORIA DESCRIPTIVA

En este capítulo, se discutirán los aspectos clave de este trabajo, principalmente la descripción del proceso, las especificaciones técnicas y los equipos utilizados. Más específicamente, este capítulo explicará con gran detalle el diagrama de flujo del proceso obtenido a través de la simulación, así como su balance de masa que se adjunta en el siguiente capítulo.

## 3.1. Descripción del proceso

El proceso [8] estudiado en este trabajo se ha diseñado para producir alrededor de 90 mil toneladas métricas anuales de propilenglicol con una pureza del 99,5%. Se han elegido estos datos ya que DOW es la empresa que más produce este compuesto con una capacidad anual de 900 millones de libras. Esta producción está repartida en cinco fábricas situadas estratégicamente alrededor del mundo.

El propilenglicol principalmente se produce por la hidratación del óxido de propileno con exceso de agua, al que se le añade metanol para que el óxido de propileno sea soluble en agua. Como se comentó anteriormente existen dos posibles rutas para este proceso, según si se utiliza catalizador o no. Para este caso se va a estudiar el proceso con ácido sulfúrico como catalizador líquido que se añade a la alimentación del reactor. El diagrama de bloques del proceso se muestra en la figura 11.

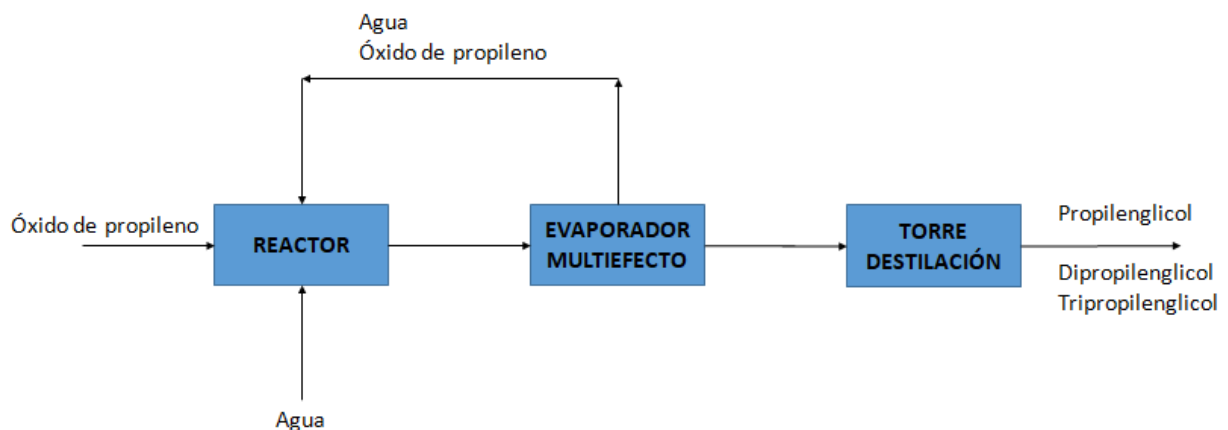


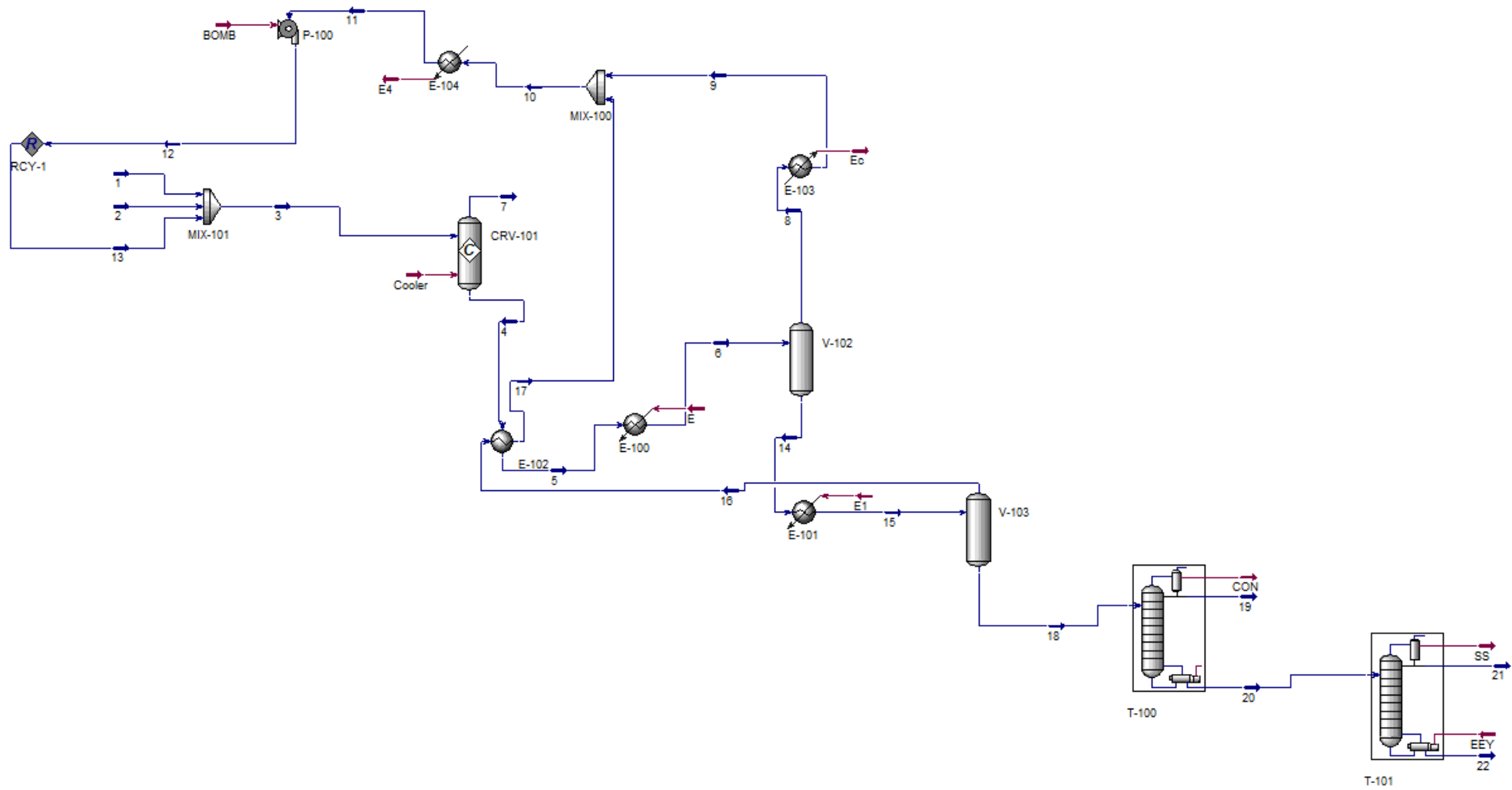
Figura 11. Diagrama de bloques del proceso

La alimentación, que está compuesta principalmente por óxido de propileno y agua en exceso, se mezclan, precalientan y se alimentan a un reactor de tanque agitado (CSTR, *continuous stirred Tank reactor*) para producir una mezcla de glicoles siendo el mayoritario el propilenglicol. A la salida del reactor se encuentra una corriente formada por óxido de propileno, propilenglicol, dipropilenglicol, tripropilenglicol y agua en exceso. El efluente del reactor se acondiciona mediante bombas e intercambiadores de calor para introducir la corriente en evaporadores para recircular el agua y el óxido de propileno que no se ha convertido y posteriormente, mediante destilación, separar la mezcla de glicoles para su purificación.

La figura 12 muestra un diagrama de flujos del proceso donde se observan las unidades de proceso. En las siguientes secciones se describirá cada parte del proceso haciendo mención a la figura 12.







CRV-101 Reactor

V-102 Primer evaporador

V-103 Segundo evaporador

T-102 Columnas destilación MPG

T-103 Columnas destilación DPG, TPG

Figura 12. Diagrama de flujo del proceso.



## 3.2. Especificaciones del diseño

En este apartado se detallarán las especificaciones de diseño del presente proyecto. Se han estudiado dos escenarios, para una posterior comparación económica, con el único cambio, en la especificación de diseño, de la relación molar de entrada al reactor lo que conllevará a un cambio en la selectividad del reactor (ver apartado 3.2.2).

### 3.2.1. Alimentación

El óxido de propileno (corriente 1) y el agua fresca (corriente 2) se introducen al proceso a una temperatura de 34°C y a una presión de 150 kPa. Esta corriente se mezcla con la corriente de recirculación de proceso (corriente 13) a esta misma temperatura y presión y se introduce al reactor. La reacción es catalizada con ácido sulfúrico, el cual introducimos con los reactivos en una proporción del 10% w/w con relación al agua [4]

### 3.2.2. Reacción

Una vez preparados los reactivos, la alimentación se lleva a un reactor agitado (CRV-101) [4] donde se produce la hidratación del óxido de propileno para producir propilenglicol con una conversión del 80% aproximadamente pero aparte se producen otras dos reacciones secundarias dando como subproducto el dipropilenglicol y el tripropilenglicol que son los productos no deseados (figura 13). Como ya se comentó anteriormente la reacción exotérmica que se produce entre el óxido de propileno y el agua, cuando se cataliza con ácido sulfúrico, tiene una cinética de primer orden con respecto al óxido de propileno y de orden cero con respecto al agua siempre que esta se encuentre en exceso.

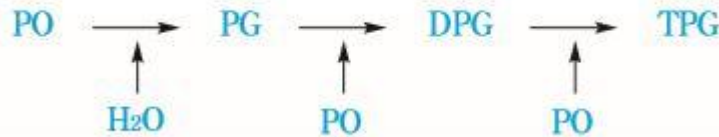
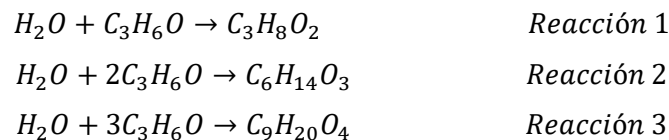


Figura 13. Hidratación del óxido de propileno

La reacción 1, 2 y 3 muestran las reacciones que se producen en el proceso siendo la reacción 1 la que produce el producto principal y las otras dos las que producen los subproductos.



La reacción principal ocurre en estado líquido y es fuertemente exotérmica al igual que las dos reacciones secundarias [5]. Fogler [4] recomienda para este proceso no exceder una temperatura de operación de 51,7°C para evitar pérdidas excesivas de óxido de propileno por vaporización a través del sistema de ventilación. Por eso la reacción se lleva a cabo a 34,2°C.

Aunque la temperatura de ebullición del óxido de propileno puro a 1 atm es 34,2°C se diseña el reactor para que la reacción ocurra a 34°C considerando que se trata de una mezcla aseguramos que el óxido de

propileno en agua se encuentre en fase líquida.

Las proporciones de PG, DPG y TPG [10] producidas varían según la relación molar de OP y agua. En la Tabla 4 se muestran diferentes relaciones molares del agua y del óxido de propileno y las proporciones de cada uno de los glicoles según esta relación, cuando la reacción se lleva a cabo a una temperatura cercana a 34 °C y una presión de 1 bar, en presencia de ácido sulfúrico. Se observa que al aumentar el exceso de agua aumenta la selectividad a PG.

En el presente proyecto se estudiarán dos escenarios, en el escenario 1 se trabaja con una relación molar de 25 mientras que en el escenario 2 la relación es de 12

H <sub>2</sub> O/PO molar ratio	Product distribution (wt%)		
	PG	DPG	TPG
5	63.5	24.0	12.5
9	76.0	19.0	5.0
12	81.0	16.5	2.5
20	88.5	10.5	1.0
25	91.0	8.0	1.0

Tabla 4. Proporciones de glicoles según ratio molar [10]

La gran cantidad de calor generado por la reacción de hidratación de OP puede ser absorbido por el exceso de agua como calor sensible. El exceso de agua en la reacción debe eliminarse posteriormente con evaporadores. Desafortunadamente, se requiere una gran cantidad de consumo de energía para la evaporación del agua debido a su gran calor latente.

Las condiciones de operación se optimizan desde el punto de vista de la fácil gestión del control de la reacción, el rendimiento para DPG y TPG, y la economía en la energía requerida para evaporar el agua que se usa en exceso.

Con la conversión fijada y con la selectividad de los productos se calculará el rendimiento de la reacción que se produce en el reactor CSTR (sección 3.4).

### 3.2.3. Separación de los productos

Una vez se tiene la corriente producto que sale del reactor (corriente 4), se lleva a dos evaporadores en serie (V-102, V-103) para intentar separar todo el agua posible de los glicoles y llevar esta agua a una corriente de recirculación hacia los reactivos tratándola para que esté en las mismas condiciones que estos.

Como ya se ha nombrado anteriormente, el propilenglicol se requiere con una pureza muy alta. En la tabla 5 se muestran las especificaciones con las que se requiere el propilenglicol tanto para el grado industrial como para el grado USP.

Propiedad	Grado industrial	Grado USP
Pureza, %	99.5	99.5
$n_{20}^{20}$	1.0377	1.035-1.037
Destilación inicial $p_b$ , ° C	185	185
punto seco, ° C	190	189
Acidez, % en peso como ácido acético.	0.005	0.002
Cloruros, ppm como Cl (máx.)	10.0	1.0
Hierro, ppm (máx.)	1.0	0.5
Metales pesados, ppm*		5.0
Arsénico, ppm como As (máx.)		3.0
Sulfato, % en peso (máx.)		0.006
Agua, % en peso (máx.)		0.2

Tabla 5. Propiedades típicas del propilenglicol industrial.

La corriente de salida del segundo evaporador, la cual está compuesta por la mezcla de glicoles y los reactivos que no se han transformado o no se han separado en los evaporadores, se lleva a dos torres de destilación consecutivas. La primera torre separa por cabeza el agua que no se ha podido quitar en los evaporadores y en la cola tendremos la mezcla de los glicoles. En la segunda torre se separa el propilenglicol de los demás glicoles, obteniendo este por cabeza debido a que es el más ligero de los glicoles.

### 3.3. Descripción de la simulación y de los equipos

#### 3.3.1. Componentes involucrados en la simulación

Como se mencionó anteriormente los reactivos involucrados son el óxido de propileno y el agua por lo que se tendrán que seleccionarse como compuestos en la simulación, así como el propilenglicol (producto principal), el dipropilenglicol y el tripropilenglicol (subproductos).

Por simplicidad el ácido sulfúrico no será un componente de la simulación ya que sólo influye en la velocidad de reacción y está en pequeña proporción con respecto al agua.

#### 3.3.2. Selección del método termodinámico

Al haber compuestos polares y ser la presión baja se favorecen los métodos basados en coeficientes de actividad. Sin embargo, al no haber datos experimentales y por tanto no disponer de parámetros de interacción binaria que se puedan calcular de ellos, es necesario estimarlos. Para ello se elige un método predictivo de coeficientes de actividad como UNIFAC.

#### 3.3.3. Equipos

En este subcapítulo se explicará la simulación de cada equipo utilizado en el presente proyecto. Se explicará más detalladamente los equipos utilizados en la simulación del escenario 1 (relación molar H<sub>2</sub>O/PG= 25) y se recogerá en un subapartado los datos más significativos de la simulación del escenario 2 (relación molar H<sub>2</sub>O/PG= 12) ya que como se comentó anteriormente todas las especificaciones van a ser iguales exceptuando la selectividad en el reactor pero todos los equipos van a ser iguales para las dos simulaciones.

### 3.3.3.1. Simulación del escenario 1

#### 3.3.3.1.1. Reactor CRV-101

El modelo de reactor utilizado para la simulación de la planta es de conversión, aunque previamente se realizaron diferentes simulaciones para determinar el volumen del reactor según la conversión de este y para ello se utilizó el reactor CSTR que es el que se utiliza en el proceso real (se hablará más específicamente de esto en el apartado de memoria de cálculo). Se fijó la conversión en un 80% como se detalló anteriormente y se especifica que el reactor es isoterma.

La simulación del reactor CVR-100 se llevó a cabo especificando la estequiometría de las reacciones que tienen lugar (reacción 1,2 y 3), la temperatura deseada a la que ocurre la reacción y el rendimiento de esta para el balance de materia como bien se explica en el apartado de convergencia de la planta en la sección 3.4.

Para la simulación independiente del reactor CSTR, sólo se conto con la reacción principal (reacción 1) especificando en Aspen Hysys la cinética con los parámetros de Arrhenius (la energía de activación de la reacción y el factor preexponencial), que la reacción es de orden 0 respecto el agua (exceso) y orden 1 con respecto el óxido de propileno [4] y la estequiometría (reacción 1).

La energía de activación es de 3240 Btu/lbmole y el factor preexponencial de  $16,96e+12$ . Una vez que se define la cinética de la reacción, se especifica que el reactivo limitante es el óxido de propileno, que el reactor es isoterma y que se requiere una conversión del 80%.

#### 3.3.3.1.2. Cooler/Heater

La función del refrigerador o calentador es la de aportar o quitar calor al fluido en un solo lado del intercambiador. La corriente de entrada se enfría (o calienta) a la condiciones de salida requeridas, y la corriente de energía absorbe (o proporciona) la diferencia de entalpía entre las dos corrientes.

Estas operaciones son útiles cuando solo se está interesado en cómo se requiere energía para enfriar o calentar una corriente de proceso con una utilidad, pero no se está interesado en las condiciones de la utilidad en sí.

A lo largo de este trabajo, se han utilizado cinco intercambiadores de calor. La Tabla 6 refleja, para cada uno de estos equipos, su nombre, configuración, flujos involucrados, temperatura de entrada y salida en grados Celsius y una breve explicación (se supone que la pérdida de carga en estos equipos es 0).

Nombre	Configuración	Corrientes involucradas	T entrada (°C)	Breve explicación
E-100		5 y 6	100,4	Este Heater junto al tanque flash V-102 simulan un evaporador y dicho intercambiador se encarga de llevar la corriente producto a la temperatura deseada para la separación en el flash. Se especifica que el título de vapor a la salida del heater sea del 60%.
E-101		14 y 15	101,8	Tiene la misma función que el Heater E-100 pero para el segundo tanque Flash V-103. Se especifica el título de vapor a la salida del heater.
E-103		8 y 9	101,8	La función de este Cooler va a ser la de enfriar la corriente de vapor que sale del primer Flash (V-102) para que haya una mezcla isoterma con la corriente 17 y así disponer de una corriente de recirculación a la misma temperatura. Se especifica que la temperatura de salida del cooler sea la misma que la temperatura de la corriente 17.
E-104		10 y 11	99,66	Se utiliza para condensar la corriente de recirculación, facilitar la impulsión y enviarla a la alimentación a la temperatura que requiere esta. Se especifica que la temperatura de salida del cooler sea la misma que la de alimentación a la planta.

Tabla 6. Características más importantes de los Heater/Cooler del proceso





### 3.3.3.1.3. Mixer

La operación del mezclador combina dos o más flujos de entrada para producir un corriente de salida única. Si se conocen las propiedades de todas las corrientes de entrada al mezclador (temperatura, presión, y composición), las propiedades de la corriente de salida se calcula automáticamente.

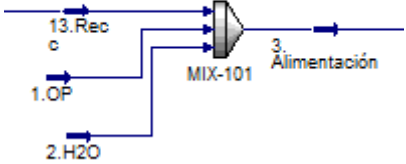
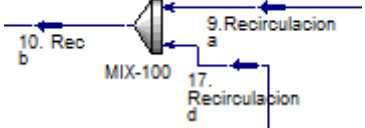
Nombre	Configuración	Corrientes involucradas	Breve explicación
MIX-101		1,2,13 y 3	Se encarga de mezclar los reactivos que entran en la planta y la recirculación de agua para su posterior entrada al reactor.
MIX-100		9,17 y 10	Se encarga de mezclar las dos corrientes de agua que salen del flash para su posterior recirculación hacia la alimentación.

Tabla 7. Características más importantes de los mixers del proceso



### 3.3.3.1.4. Tanque Flash

La función que tiene un tanque Flash es la de separar una corriente que se encuentra en equilibrio líquido-vapor en dos corrientes dónde en una solo existan los compuestos en estado líquido y en la otra los compuestos en estado vapor.

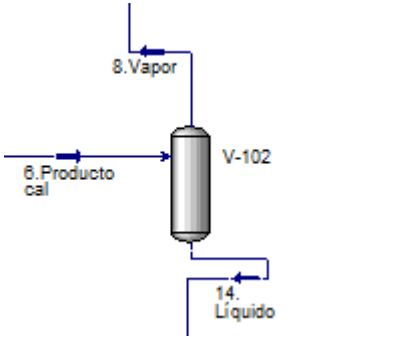
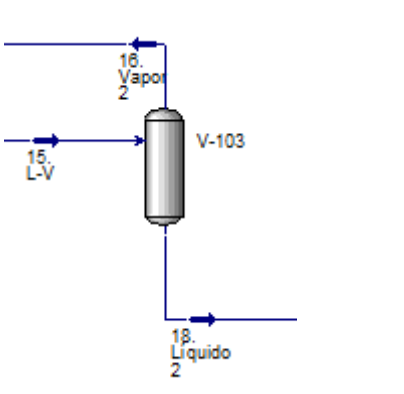
Nombre	Configuración	Corrientes involucradas	Breve explicación
V-102	 <p>The diagram shows a vertical cylindrical tank labeled V-102. An inlet stream labeled '6. Producto cal' enters from the left side. Two outlet streams exit from the top: '8. Vapor' exits to the left, and '14. Líquido' exits to the right.</p>	6,8 y 14	<p>Junto al intercambiador E-100 simulan un evaporador encargado de separar el máximo agua posible de la mezcla de glicoles. Se especifica que a la entrada del Flash haya una fracción de vapor del 60% para perder la mínima cantidad de producto principal posible (menos de un 1%) y para que todo lo que se recircule sea reactivo de la reacción.</p>
V-103	 <p>The diagram shows a vertical cylindrical tank labeled V-103. An inlet stream labeled '15. L-V' enters from the left side. Two outlet streams exit from the top: '16. Vapor 2' exits to the left, and '18. Líquido 2' exits to the right.</p>	15,16 y 18	<p>Junto al intercambiador E-101 simulan un evaporador encargado de separar toda el agua posible que no se ha podido separar con el primer evaporador. Se especifica de la misma forma que el Flash V-102 para que se pierda menos del 1% en la recirculación.</p>

Tabla 8. Características más importantes de los tanques flash del proceso



### 3.3.3.1.5. Columnas de destilación

Para realizar la simulación rigurosa de una torre de destilación primero se tiene que realizar un prediseño con métodos aproximados con el fin de obtener estimaciones simplificadas de número de etapas teóricas requeridas en una separación, relación de reflujo y etapa de alimentación óptima. Es necesario especificar la presión a la que va a trabajar el condensador con su respectiva pérdida de carga con respecto al reboiler además de que compuestos van a actuar de clave ligero y clave pesado y con que composición van a salir por cabeza y por colas. La metodología de cálculo de este tipo de simulación se explicará más detalladamente en la sección Anexo 1.

El prediseño se realiza con un modelo que implementa el método aproximado de Fenske-Gilliland-Underwood. El prediseño se refina mediante la simulación rigurosa de la columna de destilación.

#### 3.3.3.1.5.1. T-102

En esta torre hay tres corrientes involucradas como se puede observar en la figura 14. La corriente 18 es una mezcla de agua y de todos los glicoles involucrados y lo que se persigue es separar esa agua por la corriente 19 y el resto de glicoles por la corriente 20. El compuesto clave ligero es el agua y el compuesto clave pesado el propilenglicol.

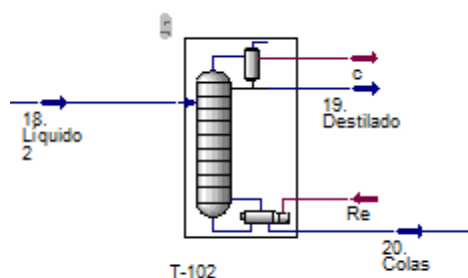


Figura 14. Torre T-102

En la tabla 9 se muestran las especificaciones introducidas en el modelo para prediseño.

Parámetros iniciales	
Fracción molar clave ligero en colas	0,005
Fracción molar clave pesado en destilado	0,005
Presión en el condensador (kPa)	100
Presión en el reboiler (kPa)	100
Relación de reflujo	$R=1,2 \times R_{mín}$

Tabla 9. Parámetros de diseño del escenario 1 para el modelo aproximado de la columna de destilación T-102.

### 3.3.3.1.5.2. T-103

En esta torre también hay tres corrientes involucradas como se muestra en la figura 15.

La corriente 20 está compuesta por la mezcla de glicoles y se pretende separar el producto principal (propilenglicol) por la corriente 21 y el resto de glicoles (dipropilenglicol y tripropilenglicol) por la corriente 22. El compuesto clave ligero es el propilenglicol y el clave pesado el dipropilenglicol.

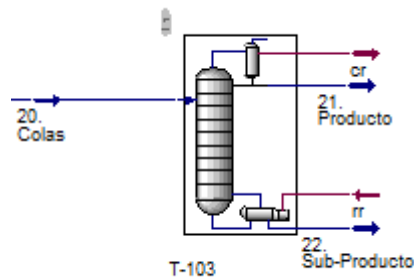


Figura 15. Torre T-103

En la tabla 10 se muestran las especificaciones introducidas en el modelo para prediseño.

Parámetros iniciales	
Fración molar clave ligero en colas	0,005
Fración molar clave pesado en destilado	0,005
Presión en el condensador (kPa)	100
Presión en el reboiler (kPa)	100
Relación de reflujo	$R=1,2 \times R_{mín}$

Tabla 10. Especificaciones iniciales para el escenario 1 del modelo aproximado de la columna de destilación T-103.

### 3.3.3.1.6. Bomba

Si la alimentación está completamente definida, sólo haría falta especificar dos de las siguientes variables para poder calcular todas las incógnitas de la bomba:

- Presión de salida o caída de presión
- Eficiencia de la bomba
- Energía de la bomba

En el caso del presente proyecto se utiliza dicho equipo para bombear todo el agua que se recircula a la

alimentación e introducirla a 150 kPa, que es la presión que con la que entran los reactivos a la planta.

Las corrientes involucradas (cómo se observa en la figura 12 son la 10 que se encuentra a una presión de 99,78 kPa y la corriente 11 que se especificaría que saliera a una presión de 150 kPa.

### 3.3.3.1.7. Heat Exchanger

Los cálculos de intercambiadores de calor se basan en balances energéticos para los fluidos fríos y calientes. El intercambiador de calor es muy flexible y puede calcular temperaturas, presiones, flujos de calor, los flujos de materia o el UA.

El intercambiador de calor tiene la configuración que se observa en la figura 16 e intervienen las corrientes que se muestran en dicha figura.

Se conocen las temperaturas de entrada (de la corriente 4 y 16) al intercambiador y se especifica que el título de vapor de la corriente de salida 17 sea 0 (que condense completamente) y así consiga precalentar la corriente 4 que es dónde se encuentra nuestro producto principal. Se comentará más detalladamente a continuación en este apartado.

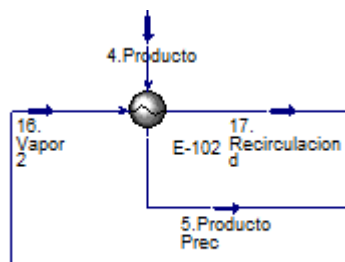


Figura 16. Intercambiador E-102

La corriente 4 es la que sale del reactor con el producto principal, los subproductos y los reactivos que no se han convertido. Dicha corriente se pretende calentar para introducirla al primer tanque flash y separar la máxima cantidad de agua posible. Para ello se va a aprovechar la corriente de vapor que sale del segundo flash (corriente 16), la cual sale con una temperatura alta y requiere condensarse para su recirculación ya que está compuesta mayoritariamente. Por lo que se aprovecha la alta temperatura de la corriente 16 para precalentar la corriente 4 hasta que la fracción de vapor de la corriente 16 sea cero (que se haya condensado completamente).

La corriente 4 entra al intercambiador por dentro de los tubos y la corriente 16 por la carcasa.

En la tabla 11 se muestran las temperaturas de entrada al intercambiador E-102.

Corriente entrada	T entrada (°C)
4	34
16	105

Tabla 11. Temperaturas de entrada al equipo E-102 en el escenario 1

### 3.3.3.2. Simulación del escenario 2

#### 3.3.3.2.1. Reactor CRV-101

Como se mencionó anteriormente se utilizará el mismo tipo de reactor que en el escenario 1, por lo que se utilizará un reactor de conversión, habiéndose calculado previamente su volumen (cómo en el escenario 1) con un reactor CSTR fijando la conversión en un 80%.

#### 3.3.3.2.2. Heater/Cooler

A continuación en la tabla 12 se muestran los datos recogidos por la segunda simulación para todos los Heaters y Coolers los cuales tienen la misma función y diseño que en el escenario 1 (tienen las mismas especificaciones que el escenario 1).

Nombre	T entrada (°C)
E-100	95,96
E-101	102,3
E-103	102,3
E-104	99,2

Tabla 12. Temperaturas de entrada para los Heater/Cooler del escenario 2.

#### 3.3.3.2.3. Mixer

Se utilizarán los mismos Mixers que para el primer escenario pero las corrientes introducidas tendrán otras composiciones debido a la diferencia de selectividad con respecto a este.

#### 3.3.3.2.4. Tanque Flash

Para la segunda simulación se utilizarán los dos mismos tanques Flash que para el primer escenario.

#### 3.3.3.2.5. Columnas de destilación

Al igual que en el primer escenario se realizó un método aproximado para estimar los datos más relevantes en las torres de destilación. Los clave ligeros y los pesados de ambas columnas no cambian con respecto al primer escenario.

##### 3.3.3.2.5.1. T- 102

En la tabla 13 se mostrarán los parámetros introducidos al método aproximado para la torre T-102.



<b>Parámetros iniciales</b>	
<b>Fracción molar clave ligero en colas</b>	0,005
<b>Fracción molar clave pesado en destilado</b>	0,005
<b>Presión en el condensador (kPa)</b>	100
<b>Presión en el reboiler (kPa)</b>	100
<b>Relación de reflujo</b>	R=1,2 x Rmín

Tabla 13. Especificaciones iniciales para el escenario 2 del modelo aproximado de la columna de destilación T-102.

#### 3.3.3.2.5.1. T- 103

En la tabla 14 se muestran las especificaciones introducidas en el modelo para prediseño.

<b>Parámetros iniciales</b>	
<b>Fracción molar clave ligero en colas</b>	0,005
<b>Fracción molar clave pesado en destilado</b>	0,005
<b>Presión en el condensador (kPa)</b>	100
<b>Presión en el reboiler (kPa)</b>	100
<b>Relación de reflujo</b>	R=1,2 x Rmín

Tabla 14. Especificaciones iniciales para el escenario 2 del modelo aproximado de la columna de destilación T-103.

#### 3.3.3.2.6. Bomba

Para el segundo escenario se especifica la misma presión de salida que en el primero.

Presión de salida= 150 kPa.

#### 3.3.3.2.7. Heat Exchanger

En la tabla 15 se muestran las temperaturas de entrada y de salida de las corrientes involucradas en el intercambiador de calor E-102 para el segundo escenario. Como se indicó anteriormente el intercambiador de calor tendrá la misma configuración que el escenario 1.

Corriente entrada	T entrada (°C)
4	34
16	107,7

Tabla 15. Temperaturas de entrada al equipo E-102.

### 3.4. Convergencia de la planta

#### 3.4.1. Rendimiento de la reacción

Para la simulación de la planta completa se utilizó un modelo de reactor de conversión pues se conocía la estequiometría de las reacciones, la conversión y la selectividad hacia los productos. Los datos de conversión y selectividad corresponderán experimentalmente a un reactor con una geometría dada operando en unas condiciones específicas de presión, temperatura y relación molar de reactivos. A efectos del cálculo del balance de materia al existir tres reacciones en paralelo es necesario calcular el rendimiento de dichas reacciones para saber cuánto reactivo se consume en cada una de ellas y así poder calcular la cantidad de producto que sale del reactor.

Cuando se disponen de los datos de conversión y selectividad es conveniente expresar las reacciones es conveniente expresar las reacciones de formación de cada producto (ver reacción 1,2 y 3 en sección 3.2.2.) de manera que en el término de la izquierda sólo aparezcan los reactivos que entran al reactor (es decir, la reacción global para cada producto).

Las reacciones (1) (2) y (3) permiten calcular fácilmente los moles de productos a partir de los datos de conversión, selectividad y moles de reactivos alimentados al reactor. La conversión y selectividad están dadas en base al óxido de propileno, que es el reactivo limitante:

$$\text{Conversión} = \frac{n_{C_3H_6O_{reac}}}{n_{C_3H_6O_{in}}} \quad \text{Ecuación 1}$$

$$\text{Selectividad} = \frac{n_{Producto}}{n_{C_3H_6O_{reac}}} \quad \text{Ecuación 2}$$

- La conversión de agua (ecuación 1) es la fracción de los moles de agua alimentados al reactor que se han reaccionado.
- La selectividad de agua (ecuación 2) a un producto es la fracción de los moles totales de agua que han reaccionado que acaban como producto. El sumatorio de todas las selectividades tiene que dar obviamente 100%.

Para saber cuántos moles de reactivo acaban en un producto P por mol de reactivo que entra al reactor (ecuación 3) se multiplica la conversión por la selectividad a cada producto:

$$\text{Rendimiento} = \text{Conversión} * \text{Selectividad} \quad \text{Ecuación 3}$$

En el caso de la simulación 1 el rendimiento de las tres reacciones (Rendimiento del propilenglicol, dipropilenglicol y tripropilenglicol respectivamente) queda marcado y definido por las ecuaciones 4,5 y 6. La conversión como ya se ha comentado anteriormente se fija en 80% y la selectividad viene marcada por la tabla 4 (en la simulación 1 el ratio H<sub>2</sub>O/OP=25).

$$\text{Rendimiento}_{PG} = 0,80 * 0,91 = 0,728 \frac{\text{mol } C_3H_8O \text{ a PG}}{\text{mol } C_3H_8O \text{ a la entrada}} \quad \text{Ecuación 4}$$

$$\text{Rendimiento}_{DPG} = 0,80 * 0,08 = 0,064 \frac{\text{mol } C_3H_8O \text{ a DPG}}{\text{mol } C_3H_8O \text{ a la entrada}} \quad \text{Ecuación 5}$$

$$\text{Rendimiento}_{TPG} = 0,80 * 0,01 = 0,008 \frac{\text{mol } C_3H_8O \text{ a PG}}{\text{mol } C_3H_8O \text{ a la entrada}} \quad \text{Ecuación 6}$$

En el caso del segundo escenario el rendimiento de las tres reacciones (Rendimiento del propilenglicol, dipropilenglicol y tripropilenglicol respectivamente) queda marcado y definido por las ecuaciones 7, 8 y 9. Al igual que en la simulación 1 la conversión es del 95% pero esta vez la selectividad cambia ya que el ratio H<sub>2</sub>O/OP para la alimentación en el reactor es de 12 (ver tabla 4).

$$\text{Rendimiento}_{PG} = 0,80 * 0,81 = 0,648 \frac{\text{mol } C_3H_8O \text{ a PG}}{\text{mol } C_3H_8O \text{ a la entrada}} \quad \text{Ecuación 7}$$

$$\text{Rendimiento}_{DPG} = 0,80 * 0,165 = 0,132 \frac{\text{mol } C_3H_8O \text{ a DPG}}{\text{mol } C_3H_8O \text{ a la entrada}} \quad \text{Ecuación 8}$$

$$\text{Rendimiento}_{TPG} = 0,80 * 0,025 = 0,02 \frac{\text{mol } C_3H_8O \text{ a PG}}{\text{mol } C_3H_8O \text{ a la entrada}} \quad \text{Ecuación 9}$$

El balance de materia en el reactor para el escenario 1 queda:

$$n_{C_3H_6O_{out}} = n_{C_3H_6O_{in}} * (1 - \text{Conversión}) = 206,22 * (1 - 0,8) = 41,244 \text{ kmol/h OP}$$

$$n_{C_3H_8O_{2, out}} = n_{C_3H_6O_{in}} * \text{Rendimiento}_{PG} * 1 = 206,22 * 0,728 = 150,128 \text{ kmol/h PG}$$

$$n_{C_6H_{14}O_{3, out}} = n_{C_3H_6O_{in}} * \text{Rendimiento}_{DPG} * 1/2 = 206,22 * 0,064 * 0,5 = 6,6 \text{ kmol/h DPG}$$

$$n_{C_9H_{20}O_{4, out}} = n_{C_3H_6O_{in}} * \text{Rendimiento}_{TPG} * 1/3 = 206,22 * 0,008 * 1/3 = 0,55 \text{ kmol/h TPG}$$

$$n_{H_2O_{out}} = n_{H_2O_{in}} - n_{C_3H_8O_{2, out}} - n_{C_6H_{14}O_{3, out}} - n_{C_9H_{20}O_{4, out}} = 5011,146 - 150,128 - 6,6 - 0,55 = 4853,87 \text{ kmol/h H}_2\text{O}.$$

El balance de materia en el reactor para el escenario 2 queda:

$$n_{C_3H_6O_{out}} = n_{C_3H_6O_{in}} * (1 - \text{Conversión}) = 204,33 * (1 - 0,8) = 40,87 \text{ kmol/h OP}$$

$$n_{C_3H_8O_{2, out}} = n_{C_3H_6O_{in}} * \text{Rendimiento}_{PG} * 1 = 204,33 * 0,648 = 132,41 \text{ kmol/h PG}$$

$$n_{C_6H_{14}O_{3, out}} = n_{C_3H_6O_{in}} * \text{Rendimiento}_{DPG} * 1/2 = 204,33 * 0,132 * 0,5 = 13,49 \text{ kmol/h DPG}$$

$$n_{C_9H_{20}O_{4, out}} = n_{C_3H_6O_{in}} * \text{Rendimiento}_{TPG} * 1/3 = 204,33 * 0,02 * 1/3 = 1,362 \text{ kmol/h TPG}$$

$$n_{H_2O_{out}} = n_{H_2O_{in}} - n_{C_3H_8O_{2, out}} - n_{C_6H_{14}O_{3, out}} - n_{C_9H_{20}O_{4, out}} = 2382,49 - 132,41 - 13,49 - 1,362 = 2235,23 \text{ kmol/h H}_2\text{O}.$$

### 3.4.2. Caudal de recirculación y alimentación a la planta

El caudal de recirculación está compuesto mayoritariamente por los reactivos que no se han formado gracias a los dos evaporadores que hay en serie. Para el caso de la simulación 1 el primer evaporador consigue separar 3041 kmol/h de agua mayoritariamente pero también contiene el óxido de propileno que no ha reaccionado y el segundo evaporador 1209 kmol/h (esta vez se puede considerar que todo es agua) por lo que tendríamos 4193,6 kmol/h de agua en recirculación y todo el óxido de propileno que no reacciona.

El caudal de agua de alimentación a la planta (que es el reactivo que está en exceso) se puede calcular fácilmente, ya que sabemos el ratio H<sub>2</sub>O/OP con el que se entra al reactor, la producción de propilenglicol deseada y el rendimiento de las reacciones. Entonces, sabiendo lo que se consume en el reactor de agua y lo que no se consigue recircular se conoce la alimentación de agua a la planta (la suma de ambas).

El mismo caso se tiene para el óxido de propileno pero al recircularse completamente lo que no reacciona

solamente se introduce a la planta ese dicho valor.

Para el caso de la simulación 1 se introducen a la planta 163,6 kmol/h de óxido de propileno y 820 kmol/h de agua.

Para el caso de la simulación 2 se calcula exactamente igual solamente variando el ratio a 12. Se introducen a la planta 163,6 kmol/h de óxido de propileno y 500 kmol/h de agua.

# 4 MEMORIA DE CÁLCULO

---

## 4.1. Balance de materia

En las tablas 16 y 17 se muestran todas las corrientes involucradas en el proceso para la primera solución con los datos de temperatura, presión, flujo molar, flujo másico y composición molar individualmente. Para la simulación 2, todo el balance de materia queda recogido en las tablas 18 y 19 por corrientes. Cabe destacar que para el escenario 1 (relación molar 25 H<sub>2</sub>O/OP) se tiene 91 mil toneladas de propilenglicol y para el escenario 2 (relación molar 12 H<sub>2</sub>O/OP) se obtienen 80 mil toneladas de propilenglicol. La alimentación fresca a la planta y la recirculación queda descrita en el apartado 3.4. Convergencia de la planta.



	Unidades	1	2	3	4	5	6
Temperatura	C	34	34	34	34	99,36	101,8
Presión	kPa	150	150	150	100	100	100
Flujo molar	kmol/h	163,6	820	5234	5069	5069	5069
Flujo másico	kg/h	9500	14770	103400	103400	103400	103400
Fracción de vapor	%	0	0	0	0	0,1125	0,6
Composición molar	%						
Agua		0	1	0,9577	0,9578	0,9578	0,9578
Óxido de propileno		1	0	0,0394	0,0081	0,0081	0,0081
Propilenglicol		0	0	0,0029	0,0326	0,0326	0,0326
Dipropilenglicol		0	0	0	0,0014	0,0014	0,0014
Tripropilenglicol		0	0	0	0,0001	0,0001	0,0001
	Unidades	7	8	9	10	11	12
Temperatura	C	34	101,8	99,64	99,66	34	34
Presión	kPa	100	100	100	100	100	150
Flujo molar	kmol/h	0	3041	3041	4250	4250	4250
Flujo másico	kg/h	0	56880	56880	79110	79110	79110
Fracción de vapor	%	1	1	0,4829	0,3453	0	0
Composición molar	%						
Agua		0	0,984	0,984	0,9867	0,9867	0,9867
Óxido de propileno		0	0,0134	0,0134	0,0097	0,0097	0,0097
Propilenglicol		0	0,0025	0,0025	0,0035	0,0035	0,0035
Dipropilenglicol		0	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
Tripropilenglicol		0	0	0	0	0	0

Tabla 16. Balance materia escenario 1

	Unidades	13	14	15	16	17	18
Temperatura	C	34	101,8	105	105	99,38	105
Presión	kPa	150	100	100	100	100	100
Flujo molar	kmol/h	4250	2027	2027	1209	1209	818,2
Flujo másico	kg/h	79110	46570	46570	22230	22230	24330
Fracción de vapor	%	0	0	0,6	1	0	0
Composición molar	%						
Agua		0,9867	0,9185	0,9185	0,9936	0,9936	0,8075
Óxido de propileno		0,0097	0,0003	0,0003	0,0004	0,0004	0
Propilenglicol		0,0035	0,0777	0,0777	0,0059	0,0059	0,1837
Dipropilenglicol		0,0001	0,0033	0,0033	0,0001	0,0001	0,0081
Tripropilenglicol		0	0,0003	0,0003	0	0	0,0007
	Unidades	19	20	21	22		
Temperatura	C	99,64	187,16	186	231,515		
Presión	kPa	100	100	100	100		
Flujo molar	kmol/h	660,2	158	150,656	7,343		
Flujo másico	kg/h	11893,7	12445,7	11436,3	1009,47		
Fracción de vapor	%	0	0	0	0		
Composición molar	%						
Agua		0,9999	0,00314	0,0033	0		
Óxido de propileno		0	0	0	0		
Propilenglicol		0,00001	0,9512	0,9966	0,0215		
Dipropilenglicol		0	0,042	0,000092	0,9		
Tripropilenglicol		0	0,0036	0	0,078		

Tabla 17. Balance de materia escenario 1



	Unidades	1	2	3	4	5	6
Temperatura	C	34	34	34	34	95,96	102,3
Presión	kPa	150	150	150	100	100	100
Flujo molar	kmol/h	163,6	500	2664	2501	2501	2501
Flujo másico	kg/h	9500	9008	56810	56810	56810	56810
Fracción de vapor	%	0	0	0	0	0,0765	0,6
Composición molar	%						
Agua		0	1	0,9193	0,9205	0,9205	0,9205
Óxido de propileno		1	0	0,0767	0,0165	0,0165	0,0165
Propilenglicol		0	0	0,0039	0,057	0,057	0,057
Dipropilenglicol		0	0	0,0001	0,0054	0,0054	0,0054
Tripropilenglicol		0	0	0	0,0005	0,0005	0,0005
	Unidades	7	8	9	10	11	12
Temperatura	C	34	102,3	99,64	99,64	34	34
Presión	kPa	100	100	100	100	99,38	150
Flujo molar	kmol/h	0	1501	1501	2001	2001	2001
Flujo másico	kg/h	0	29020	29020	38360	38360	38360
Fracción de vapor	%	1	1	0,9116	0,6831	0	0
Composición molar	%						
Agua		0	0,9689	0,9689	0,9738	0,9738	0,9738
Óxido de propileno		0	0,027	0,027	0,0206	0,0206	0,0206
Propilenglicol		0	0,004	0,004	0,0054	0,0054	0,0054
Dipropilenglicol		0	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0002
Tripropilenglicol		0	0	0	0	0	0

Tabla 18. Balance de materia escenario 2



	Unidades	13	14	15	16	17	18
Temperatura	C	34	102,3	107,7	107,7	96,37	107,7
Presión	kPa	150	100	100	100	100	100
Flujo molar	kmol/h	2001	1000	1000	500,2	500,2	500,2
Flujo másico	kg/h	38360	27790	27790	9335	9335	18450
Fracción de vapor	%	0	0	0,5	1	0	0
Composición molar	%						
Agua		0,9738	0,8478	0,8478	0,9886	0,9886	0,707
Óxido de propileno		0,0206	0,0007	0,0007	0,0014	0,0014	0
Propilenglicol		0,0054	0,1366	0,1366	0,0097	0,0097	0,2636
Dipropilenglicol		0,0002	0,0134	0,0134	0,0002	0,0002	0,0266
Tripropilenglicol		0	0,0014	0,0014	0	0	0,0027
	Unidades	19	20	21	22		
Temperatura	C	99,65	188,607	185,97	229,825		
Presión	kPa	100	100	100	100		
Flujo molar	kmol/h	353,2	147	131,7	15,3		
Flujo másico	kg/h	6363,02	12095,8	10000,2	2095,59		
Fracción de vapor	%	0	0	0	0		
Composición molar	%						
Agua		0,99999	0,0003	0,0033	0		
Óxido de propileno		0	0	0	0		
Propilenglicol		0,00001	0,897	0,996	0,0435		
Dipropilenglicol		0	0,091	0,00054	0,865		
Tripropilenglicol		0	0,0095	0	0,092		

Tabla 19. Balance de materia escenario 2



## 4.2. Diseño de las dimensiones básicas de los equipos y resultados de la simulación

### 4.2.1. Volumen del reactor

El volumen del reactor se ha calculado con un modelo de reactor cinético CSTR (mezcla perfecta) en una simulación independiente aparte con Aspen Hysys. Para el cálculo del volumen se fijó una conversión por paso en el reactor de un 80%, dato que se había impuesto para la simulación de la planta completa, una vez especificada la estequiometría de la reacción, la cinética (queda descrito en el apartado 3.2.2) y temperatura (34°C).

Cabe señalar que se ha supuesto un nivel de llenado del reactor de un 80% y una pérdida de carga en el reactor de 50 kPa.

Ratio H <sub>2</sub> O/PG	Volumen reactor (m <sup>3</sup> )
25	160
12	90

Tabla 20. Cálculo del volumen del reactor según ratio H<sub>2</sub>O/PG.

### 4.2.2. Área de transferencia de los intercambiadores.

Para el cálculo de una estimación económica (sección 5) de un intercambiador de calor es necesario conocer el área de transferencia de calor de estos. Cabe destacar que primeramente se calcula la temperatura de salida de todos los intercambiadores con la simulación y después se realiza el diseño de estos. Para el cálculo del área se va a suponer que todos los intercambiadores son carcasa y tubo y que disponemos de dos utilities [11]:

- Agua de refrigeración: Con temperatura de entrada de 25°C, temperatura de salida de 35°C y un coeficiente de transferencia de 1000 W/m<sup>2</sup>K.
- Vapor de baja (2 bar): Se produce un cambio de fase pero se va a suponer que hay una diferencia de temperatura de 1°C entre la temperatura de entrada y de salida para poder calcular el DTLM. La temperatura de entrada es de 120°C, la temperatura de salida 119°C y un coeficiente de transferencia de 4500 W/m<sup>2</sup>K.

Una vez que se disponen de los datos anteriores, con las ecuaciones 14 y 15 y suponiendo un factor de corrección en los equipos de 0,85 (para los coolers y heaters); se puede calcular el área de transferencia.

$$DTLM = \frac{dT_c - dt_f}{\ln \frac{dT_c}{dt_f}} \quad \text{Ecuación 14}$$

$$Q = F * DTLM * U * A \quad \text{Ecuación 15}$$

Dónde:

- dT<sub>c</sub>= es la diferencia de temperaturas calientes de las corrientes.
- dt<sub>f</sub>= es la diferencia de temperaturas frías de las corrientes.
- Q (kW)= El flujo de calor en el equipo.
- F=Factor de corrección.
- U (kW/m<sup>2</sup>K)= Coeficiente de transferencia.
- A (m<sup>2</sup>)= Área de transferencia.

A continuación en las tablas 21 y 22 se mostrarán los resultados más importantes calculados de los cooler E-103 y E-104 para el escenario 1.

<b>Equipo</b>	E-103
<b>Q (MW)</b>	16,75
<b>DTLM (K)</b>	70,64
<b>A (m2)</b>	278,96
<b>T salida (°C)</b>	99,64

Tabla 21. Diseño del equipo E-103.

<b>Equipo</b>	E-104
<b>Q (MW)</b>	18,17
<b>DTLM (K)</b>	28,31
<b>A (m2)</b>	755,08
<b>T salida (°C)</b>	34

Tabla 22. Diseño del equipo E-104.

A continuación en las tablas 23 y 24 se mostrarán los resultados más importantes calculados de los coolers E-103 y E-104 para el escenario 2.

<b>Equipo</b>	E-103
<b>Q (MW)</b>	1,572
<b>DTLM (K)</b>	70,9
<b>A (m2)</b>	26,08
<b>T salida (°C)</b>	99,64

Tabla 23. Diseño del equipo E-103.

<b>Equipo</b>	E-104
<b>Q (MW)</b>	18,09
<b>DTLM (K)</b>	28,22
<b>A (m<sup>2</sup>)</b>	754,16
<b>T (°C)</b>	34

Tabla 24. Diseño del equipo E-104.

Como bien se explico anteriormente, el heater E-100 más el tanque flash V-102 simulan un evaporador al igual que el heater E-101 y el tanque flash V-103. Para una posterior estimación económica de este equipo se necesita el área de transferencia de calor. Gracias a la simulación se disponen los datos del calor intercambiado y del DTLM.

Se han elegido los evaporadores de tipo tubo largo vertical, con acero al carbono como material, ya que industrialmente son los más utilizados. El coeficiente de transferencia [11] es de 2269,78 W/m<sup>2</sup>K.

En las tablas 25 y 26 se recogen los resultados más importantes de los evaporadores para el escenario 1.

<b>Equipo</b>	E-100+V-102
<b>Q (MW)</b>	25,23
<b>DTLM (K)</b>	18,4
<b>A (m<sup>2</sup>)</b>	604,05
<b>Tentrada al flash (°C)</b>	101,8

Tabla 25. Diseño del equipo E-100+V-102.

<b>Equipo</b>	E-101+V-103
<b>Q (MW)</b>	11,34
<b>DTLM (K)</b>	16
<b>A (m<sup>2</sup>)</b>	312,22
<b>T entrada al flash (°C)</b>	105

Tabla 26. Diseño del equipo E-101+V-103.

En las tablas 27 y 28 se recogen los resultados más importantes de los evaporadores del escenario 2.

<b>Equipo</b>	E-100+V-102
<b>Q (MW)</b>	15,13
<b>DTLM (K)</b>	17,56
<b>A (m2)</b>	381,24
<b>T entrada al flash (°C)</b>	102,3

Tabla 27. Diseño del equipo E-100-102.

<b>Equipo</b>	E-101+V-103
<b>Q (MW)</b>	5,79
<b>DTLM (K)</b>	12,12
<b>A (m2)</b>	211,38
<b>T entrada al flash (°C)</b>	107,7

Tabla 28. Diseño del equipo E-101+V.103.

Para el intercambiador E-102 no es necesario utilities ya que se aprovecha la corriente 16 que es vapor de proceso de recirculación para precalentar la corriente 4. Se calculará las temperaturas de salida del intercambiador (temperatura de la corriente 5 y 17).

A continuación en la tabla 29 se muestran los resultados más importantes para el intercambiador E-102 en el escenario 1. En este caso la propia simulación da como resultado también el coeficiente de transferencia, DTLM y el factor de corrección Ft.

<b>Equipo</b>	E-102
<b>Q (MW)</b>	11,31
<b>DTLM (K)</b>	23
<b>Factor Ft</b>	0,797
<b>U (kJ/h*m2*C)</b>	3,678e+04
<b>A (m2)</b>	60
<b>T corriente 5 (°C)</b>	100,4
<b>T corriente 17 (°C)</b>	99,64

Tabla 29. Diseño del equipo E-102.



A continuación en la tabla 30 se muestran los resultados más importantes para el intercambiador E-102 en el escenario 2.

<b>Equipo</b>	E-102
<b>Q (MW)</b>	5,76
<b>DTLM (K)</b>	30,29
<b>Factor Ft</b>	0,827
<b>U (kJ/h*m2*C)</b>	1,372e+04
<b>A (m2)</b>	60,5
<b>T corriente 5 (°C)</b>	95,96
<b>T corriente 17 (°C)</b>	96,37

Tabla 30. Diseño del equipo E-102.

#### 4.2.3. Diseño básico y resultados de la simulación para las torres de destilación.

A continuación en la tabla 31 se muestran los resultados proporcionados por el modelo en el escenario 1 para la torre T-102.

<b>Resultados de la simulación</b>	
<b>Número de etapas</b>	34
<b>Etapas de alimentación</b>	18
<b>Temperatura del condensador (°C)</b>	99,65
<b>Temperatura del reboiler (°C)</b>	187,16
<b>Relación de reflujo</b>	0,1

Tabla 31. Resultados para el escenario 1 del modelo aproximado de la columna de destilación T-102.



A continuación en la tabla 32 se muestran los resultados proporcionados por el modelo en el escenario 1 para la torre T-103.

<b>Resultados de la simulación</b>	
<b>Número de etapas</b>	31
<b>Etapas de alimentación</b>	16
<b>Temperatura del condensador (°C)</b>	185,966
<b>Temperatura del reboiler (°C)</b>	231,515
<b>Relación de reflujo</b>	0,5

Tabla 32. Resultados para el escenario 1 del modelo aproximado de la columna de destilación T-103.

En la tabla 33 y 34 se mostrará los resultados del modelo aproximado para la torre de destilación T-102 y T-103 respectivamente para el escenario 2.

<b>Resultados de la simulación</b>	
<b>Número de etapas</b>	31
<b>Etapas de alimentación</b>	16
<b>Temperatura del condensador (°C)</b>	99,65
<b>Temperatura del reboiler (°C)</b>	188,607
<b>Relación de reflujo</b>	0,1

Tabla 33. Resultados para el escenario 2 del modelo aproximado de la columna de destilación T-102.

Resultados de la simulación	
Número de etapas	24
Etapas de alimentación	13
Temperatura del condensador (°C)	186
Temperatura del reboiler (°C)	229.825
Relación de reflujo	0,5

Tabla 34. Resultados para el escenario 2 del modelo aproximado de la columna de destilación T-103

El peso,  $W$  para un recipiente o torre a presión depende del grosor de la pared de la carcasa y de las dos cabezas. Se asume que los espesores de las dos cabezas son iguales por lo que el peso de la cubierta y las dos cabezas es aproximadamente [11]:

$$W = \pi * (Di + ts)(L + 0,8 * Di) * \rho * ts \quad \text{Ecuación 18}$$

Donde el término en  $L$  representa el cilindro, el término en  $0,8 Di$  representa las dos cabezas,  $\rho$  es la densidad del acero al carbono, que se puede tomar como  $490 \text{ lb} / \text{ft}^3$  y  $ts$  un factor que introduce el espesor de la pared, el cual está tabulado en bibliografía y adquiere un valor de 1,25 pulgadas (0,1041 ft) para el material acero al carbono.

Para el cálculo de los diámetros y de la altura de las torres se ha supuesto que entre plato y plato hay un espacio de 0,55 metros por lo que la altura total será la multiplicación del número de platos total por dicho espacio. Para el diámetro de las torres se utiliza la ecuación 19 [14]:

$$D = \sqrt{\frac{4 * V_w}{\pi * \rho_v * u_v}} \quad \text{Ecuación 19}$$

Donde:

- $H$  y  $D$  son la altura y el diámetro de la torre (m).
- $V_w$  es el caudal de vapor (kg/s), se coge del balance de materia.
- $\rho_v$  es la densidad del vapor (kg/m<sup>3</sup>), es calculada con el programa EES.
- $u_v$  es la velocidad del vapor, se ha tomado un valor típico de 2m/s [14].

Para el escenario 1, en la tabla 35, se muestran los diámetros y las alturas de las torres T-102 y T-103 y para el escenario 2 se encuentran en la tabla 36.

Equipo	Diámetro de la torre (m)	Altura de la torre (m)
T-102	1,89	18,7
T-103	1,15	17,05

Tabla 35. Diámetros y alturas de las torres de destilación del escenario 1

Equipo	Diámetro de la torre (m)	Altura de la torre (m)
T-102	1,38	17,05
T-103	1,07	13,2

Tabla 36. Diámetros y alturas de las torres de destilación del escenario 2

Una vez se tienen los diámetros y las alturas de las torres de destilación se procede a calcular el peso de estas aplicando la ecuación 18 en las unidades correspondientes. En la tabla 37 se muestra el peso de las torres del primer escenario y en la tabla 38 las del segundo escenario.

Equipo	W (lb)
T-102	66988,28
T-103	36601,22

Tabla 37. Diámetros y alturas de las torres de destilación del escenario 1

<b>Equipo</b>	<b>W (lb)</b>
T-102	44232,95
T-103	26709,6

Tabla 38. Diámetros y alturas de las torres de destilación del escenario 2

## 5 ANÁLISIS ECONÓMICO

### 5.1. Intercambiadores de calor.

Una vez que se ha calculado el área de transferencia (sección 4.2.2.), se puede estimar el coste de los intercambiadores por medio de correlaciones sacadas de bibliografía [11] cómo se muestra a continuación:

$$C_p = FM * FP * FL * exp[11,147 - 0,9186[\ln(A)] + 0,09790[\ln(A)]^2] \quad \text{Ecuación 16}$$

Donde:

- Cp=Coste de inversión del intercambiador de calor.
- FM= factor de corrección por el material. Se supone que el material del que está compuesto el equipo es acero al carbono por lo que FM=1.
- FP= factor de corrección por presión. Al no tener que soportar altas presiones FP es igual a 1.
- FL= factor de corrección por longitud del tubo. Se supone que los tubos son lo suficientemente largo para que no tenga que existir un factor de corrección. FL=1.
- A (ft<sup>2</sup>)= Área de transferencia del intercambiador

A continuación en las tablas 39,40 y 41 se mostrarán los costes de inversión de los intercambiadores para el escenario 1.

<b>Equipo</b>	E-103
<b>Cp (\$)</b>	23590

Tabla 39. Diseño y coste de inversión del equipo E-103.

<b>Equipo</b>	E-104
<b>Cp (\$)</b>	49615,11

Tabla 40. Diseño y coste de inversión del equipo E-104.

<b>Equipo</b>	E-102
<b>Cp (\$)</b>	10960.21

Tabla 41. Diseño y coste de inversión del equipo E-102.

A continuación en las tablas 42,43 y 44 se mostrarán los costes de inversión de los intercambiadores para el escenario 2.

<b>Equipo</b>	E-103
<b>Cp (\$)</b>	8775,92

Tabla 42. Coste de inversión del equipo E-103.

<b>Equipo</b>	E-104
<b>Cp (\$)</b>	49561,86

Tabla 43. Coste de inversión del equipo E-104.

<b>Equipo</b>	E-102
<b>Cp (\$)</b>	11540,33

Tabla 44. Coste de inversión del equipo E-102.

## 5.2. Evaporadores.

Para la estimación económica de este equipo se necesita el área de transferencia de calor calculada en la sección 4.2.2. Por bibliografía [11] se dispone de la correlación de coste (ecuación 17).

$$C_p = 4500 * A^{0,55} \quad \text{Ecuación 17}$$

En las tablas 45 y 46 se recogen los costes de inversión de los evaporadores del escenario 1.

<b>Equipo</b>	E-100+V-102
<b>Cp (\$)</b>	562841,53

Tabla 45. Coste de inversión del equipo E-100+V-102.

<b>Equipo</b>	E-101+V-103
<b>Cp (\$)</b>	391515,42

Tabla 46. Coste de inversión del equipo E-101+V-103.

En las tablas 47 y 48 se recogen los costes de inversión de los evaporadores del escenario 2.



<b>Equipo</b>	E-100+V-102
<b>C<sub>p</sub> (\$)</b>	436973,59

Tabla 47. Diseño y coste de inversión del equipo E-100-102.

<b>Equipo</b>	E-101+V-103
<b>C<sub>p</sub> (\$)</b>	315922,94

Tabla 48. Diseño y coste de inversión del equipo E-101+V.103.

### 5.3. Torres de destilación.

Gracias a la bibliografía [11] se llega a la correlación de coste de inversión de una torre de destilación representada en la ecuación 21.

$$C_p = F_M * C_V + C_{PL} \quad \text{Ecuación 21}$$

Dónde  $F_M$  es el factor de corrección del material, al ser acero al carbono adquiere un valor de 1.  $C_V$  representa el coste de compra de la torre vertical y  $C_{PL}$  es el coste añadido de las plataformas y de las escaleras.

Para torres verticales de diámetro ( $D_i$ ) entre 3-21 ft y altura ( $L$ ) comprendida entre 12 y 70 ft se tiene que [11]:

$$C_{PL} = 237,1 * D_i^{0,63316} * L^{0,80161} \quad \text{Ecuación 22}$$

Y para torres con un peso entre 9000 y 2500000 lb [11]:

$$C_V = \exp(7,0374 + 0,18255 * \ln(W) + 0,02297 * (\ln(W))^2) \quad \text{Ecuación 23}$$

A continuación en las tablas 49 y 50 se muestran los resultados económicos más importantes de la torres de destilación del escenario 1.

<b>Equipo</b>	T-102
<b>C<sub>PL</sub> (\$)</b>	20406,68
<b>C<sub>V</sub> (\$)</b>	147611,78
<b>C<sub>P</sub> (\$)</b>	168018,46

Tabla 49. Coste de inversión torre de destilación T-102.

<b>Equipo</b>	T-103
<b>C<sub>PL</sub> (\$)</b>	13830,56
<b>C<sub>V</sub>(\$)</b>	97912,53
<b>C<sub>P</sub> (\$)</b>	111743,06

Tabla 50. Coste de inversión torre de destilación T-103.

A continuación en las tablas 51 y 52 se muestran los resultados económicos más importantes de la torres de destilación del escenario 2.

<b>Equipo</b>	T-102
<b>C<sub>PL</sub> (\$)</b>	15535,97
<b>C<sub>V</sub>(\$)</b>	111151,57
<b>C<sub>P</sub> (\$)</b>	126687,54

Tabla 51. Coste de inversión torre de destilación T-102.

<b>Equipo</b>	T-103
<b>C<sub>PL</sub> (\$)</b>	10767,22
<b>C<sub>V</sub>(\$)</b>	79579,17
<b>C<sub>P</sub> (\$)</b>	90346,39

Tabla 52. Coste de inversión torre de destilación T-103.

#### 5.4. Reactor CSTR.

El coste del reactor se ha estimado por medio de correlaciones [12]. Para calcular el coste de dicho equipo a través de su capacidad, se utiliza la correlación mostrada en la ecuación 24.

$$\log_{10} C_{equipo} = K1 + K2 * \log_{10} A + K3 * (\log_{10}(A))^2 \quad \text{Ecuación 24}$$

Donde:

- $C_{equipo}$  es el coste del reactor a presión atmosférica, temperatura ambiente y construida con acero al carbono.
- $A$  es la capacidad o tamaño del equipo. Para el reactor la capacidad será el volumen en  $m^3$

- $K_1$ ,  $K_2$  y  $K_3$  son parámetros característicos de cada equipo y en el caso del reactor tienen un valor de 3,4974; 0,4485 y 0,1074 respectivamente [12].

Para calcular el coste total de inversión del reactor se aplica la ecuación 25, donde  $B_i$  son parámetros característicos para cada equipo y para los reactores tienen un valor de  $B_1=2,25$  y  $B_2=1,82$  [15].

$$C_P = C_{equipo} * (B_1 + B_2 * F_M * F_P) \quad \text{Ecuación 25}$$

Cómo el reactor trabaja a presión atmosférica y el material, del cual está compuesto, es acero al carbono los factores  $F_M$  y  $F_P$  adquieren un valor de 1.

En la tabla 53 se muestra el coste estimado del reactor para el primer escenario y en la tabla 54 para el segundo escenario.

<b>Equipo</b>	CRV-101
<b><math>C_P</math> (\$)</b>	414292,42

Tabla 53. Coste de inversión Reactor CRV-101 escenario 1.

<b>Equipo</b>	CRV-101
<b><math>C_P</math> (\$)</b>	247536,71

Tabla 54. Coste de inversión Reactor CRV-101 escenario 2.

## 5.5. Costes totales de inversión de los equipos

En la tabla 55 se muestra la suma del precio de inversión total ( $C_{PT}$ ) de todos los equipos para la simulación 1 y para la simulación 2.

<b>Escenario 1</b>	<b>Escenario 2</b>
$C_{PT1} = 1732575,79 \$$	$C_{PT2} = 1287345,28 \$$

Tabla 55. Coste total de inversión de los equipos para los dos escenarios

## 5.6. Costes totales de la planta

Una vez se conoce el coste de adquisición de todos los equipos, se procede a calcular el coste total de inversión de la planta. Se va a utilizar el método de Chilton, donde el coste de los equipos se pondera por unos factores medios para obtener el resto de costes.

En la Tabla 56 aparecen los costes de cada concepto, además del coste total de inversión para construir la planta para el escenario 1 y en la tabla 57 para el escenario 2. Cada concepto se ha multiplicado por el valor medio de cada factor.

Concepto	Factor	Concepto	Coste (\$)
1. Coste equipos principales	1	1	1732575,79
2. Coste equipos instalados	1,40-2,20	1	3118636,42
3. Tuberías (Planta de fluidos)	0,30-0,60	2	1403386,39
4. Instrumentación (Completa automatización)	0,10-0,15	2	389829,55
5. Edificios y preparación del terreno	0,60-1,00	2	2494909,14
6. Auxiliares (Nueva extensión)	0,25-1,00	2	1949147,76
7. Líneas exteriores (Unidad integrada)	0,00-0,05	2	77965,91
8. Coste directo total	Suma	2-7	9433875,171
9. Ingeniería y construcción	0,35-0,50	8	4009396,947
10. Contingencia y beneficio contratista	0,10-0,20	8	1415081,276
11. Factor del tamaño	0,00-0,15	8	707540,64
12. Coste indirecto total	Suma	9-11	6132018,861
<b>13. Coste total</b>	<b>Suma</b>	<b>8+11</b>	<b>15565894,03</b>

Tabla 56. Factores Método de Chilton para el escenario 1 [15]

Concepto	Factor	Concepto	Coste (\$)
1. Coste equipos principales	1	1	1287345,28
2. Coste equipos instalados	1,40-2,20	1	2317221,50
3. Tuberías (Planta de fluidos)	0,30-0,60	2	1042749,68
4. Instrumentación (Completa automatización)	0,10-0,15	2	289652,69
5. Edificios y preparación del terreno	0,60-1,00	2	1853777,20
6. Auxiliares (Nueva extensión)	0,25-1,00	2	1448263,44
7. Líneas exteriores (Unidad integrada)	0,00-0,05	2	57930,54
8. Coste directo total	Suma	2-7	7009595,05
9. Ingeniería y construcción	0,35-0,50	8	2979077,89
10. Contingencia y beneficio contratista	0,10-0,20	8	1051439,26
11. Factor del tamaño	0,00-0,15	8	525719,63
12. Coste indirecto total	Suma	9-11	4556236,78
<b>13. Coste total</b>	<b>Suma</b>	<b>8+11</b>	<b>11565831,83</b>

Tabla 57. Factores Método de Chilton para el escenario 2 [15]

## 5.7. Potencial económico de la planta

El potencial económico (PE) queda definido por la ecuación 26, donde se considera como costes de operación únicamente el consumo de servicios y el de las materias primas. Se supone que la planta trabaja 800 horas al año y que la planta tiene una vida media de 15 años.

$$PE \left( \frac{M\$}{año} \right) = \text{venta productos} - \text{coste operación} - \text{coste inversión anualizado} \quad \text{ecuación 26}$$

Para el cálculo de los costes de operación, primeramente se va a calcular los costes de las materias primas. Por bibliografía se fija que el precio del óxido de propileno es de 1,5\$/kg [17] y el del agua 2\$/m<sup>3</sup> [16].

En la tabla Z se representa los caudales anuales de agua y óxido de propileno que entran a la planta y su coste para el escenario 1 y en la tabla Y para el escenario 2.

Caudal anual	Precio	Coste anual
76mil toneladas de óxido propileno	0,65\$/kg	49400000\$
118160 m <sup>3</sup> de agua	2\$/m <sup>3</sup>	236320\$

Tabla 58. Coste anual de las materias primas para el escenario 1.

Caudal anual	Precio	Coste anual
76mil toneladas de óxido propileno	0,65\$/kg	49400000\$
72064 m <sup>3</sup> de agua	2\$/m <sup>3</sup>	144128\$

Tabla 59. Coste anual de las materias primas para el escenario 1.

A continuación se va a proceder a calcular los costes de servicio. Para ello se tiene un coste del agua de refrigeración utilizada en los intercambiadores de 0,35\$ por GJ de calor retirado y para el vapor de baja un precio de 7,5\$ por cada tonelada utilizada [9]. En la tabla 60 se muestran los GJ utilizados anualmente en la planta, los caudales de vapor anual utilizados y sus respectivos costes anualizados para el escenario 1 y en la tabla 61 para el escenario 2. Para el cálculo del caudal de vapor, se ha utilizado el EES para obtener el calor latente de este que toma un valor de 2202 kJ/kg.

<b>GJ de calor retirado anualmente</b>	1005696
<b>Coste anual del agua de refrigeración</b>	351993,6 \$
<b>Caudal de vapor</b>	475553,13 toneladas al año
<b>Coste anual del vapor</b>	3566648,50 \$
<b>Coste de servicio anual</b>	3918642,01 \$

Tabla 60. Coste de servicios anuales para el escenario 1.

<b>GJ de calor retirado anualmente</b>	566265,6
<b>Coste anual del agua de refrigeración</b>	198192,96 \$
<b>Caudal de vapor</b>	273613,08 toneladas al año
<b>Coste anual del vapor</b>	2052098,09 \$
<b>Coste de servicio anual</b>	2250291,05 \$

Tabla 61. Coste de servicios anuales para el escenario 2.

Por último se va a calcular las ventas del producto. El propilenglicol tiene un precio de venta en el mercado de 1\$/kg [13]. Para el escenario 1 se tiene una producción anual de 91mil toneladas anuales y para el escenario 2 de 80mil toneladas anuales (ver sección 4.1). En la tabla 57 se muestran las ventas anuales del propilenglicol.

<b>Ventas propilenglicol escenario 1</b>	91000000\$
<b>Ventas propilenglicol escenario 2</b>	80000000\$

Tabla 62. Venta de propilenglicol para los dos escenarios

Una vez calculadas las ventas de propilenglicol para los dos escenarios y anualizando los costes totales de la planta de la sección 5.6. (15 años) se procede a calcular los potenciales económicos de los dos escenarios.

$$PE_1 \text{ (M$/año)} = 91 - 3,92 - 49,4 - 0,24 - 15,56/15 = 36,40 \text{ M$/año}$$

$$PE_2 \text{ (M$/año)} = 80 - 2,25 - 49,4 - 0,14 - 11,57/15 = 27,44 \text{ M$/año}$$





## 6 CONCLUSIONES

---

Para ambos escenarios el potencial económico es positivo por lo que el proceso a primera vista es viable. No obstante en el cálculo del potencial hay varios factores que no se tienen en cuenta:

- El valor temporal del dinero
- No se han tenido en cuenta factores como los impuestos ni la depreciación
- No se han tenido en cuenta costes de producción fijos ni otros variables como salarios, consumibles auxiliares, etc.

Por tanto, es necesario un análisis de flujo de caja riguroso para determinar finalmente si el proceso es prometedor, como inicialmente señala el potencial económico.

Cabe destacar que aunque el coste en servicios anuales en el primer escenario con respecto al segundo es el doble, debido a que hay que evaporar mucha más agua para llevarla a recirculación, saldría mucho más rentable a primera vista el escenario uno al tener una mayor producción de propilenglicol y un potencial económico mucho mayor.

## 7. ANEXO 1

### 7.1. Método de cálculo para la separación en la torre de destilación

Cómo ya se explicó en apartados anteriores, para el pre diseño de las columnas de destilación se utilizó en ASPEN una destilación corta que se basa en el modelo DSTWU.

El modelo DSTWU se basa en un diseño aproximado de columnas simples de destilación basado en el método propuesto por Fenske, Underwood y Gililand. Por columna de destilación simple se refiere a una que tiene una alimentación y dos productos, destilado y colas, y posee un condensador y un hervidor.

A continuación se va a describir las correlaciones que utiliza ASPEN para la estimación de número el número mínimo de platos, para la relación de reflujo mínimo y para el número de etapas teóricas requeridas para la separación por destilación simple.

#### 7.1.1. Correlación de Gililand

En la ecuación 10 se muestra la correlación de Gililand que estima el número de etapas:

$$\frac{N - N_m}{N + 1} = 0,75 * \left[ 1 - \left( \frac{R - R_m}{R + 1} \right)^{0,5688} \right] \quad \text{Ecuación 10}$$

Donde:

- $N_m$  es el número de etapas a reflujo total
- $R_m$  es la relación de reflujo mínimo
- $R$  es la relación de reflujo de operación

#### 7.1.2. Ecuación de Fenske

La ecuación de Fenske (ecuación 11) se utiliza para el cálculo del número mínimo de platos.

$$N_m = \frac{\ln \left[ \left( \frac{X_{D,LK}}{X_{D,HK}} \right) \left( \frac{X_{B,HK}}{X_{B,LK}} \right) \right]}{\ln \alpha_{LK,HK}} \quad \text{Ecuación 11}$$

Donde:

- D: destilado
- B: Fondos
- LK: componente clave ligero
- HK: componente clave pesado
- $\alpha$ : Volatilidad

### 7.1.3. Ecuación de Underwood para calcular la relación de reflujo mínimo

Para mezclas multicomponente con volatilidad relativa constante, la relación de reflujo mínimo en una columna de destilación puede calcularse mediante la ecuación 12 y 13.

$$\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i * X_{i,F}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad \text{Ecuación 12}$$

Donde:

- n: número de componentes
- q: fracción molar de líquido en la alimentación

En la ecuación 13 se utiliza el valor de  $\theta$ , calculado en la ecuación 12, para estimar la relación de reflujo mínimo.

$$\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i * X_{i,D}}{\alpha_i - \theta} = 1 + R_m \quad \text{Ecuación 13}$$

### 7.1.4. Relación de reflujo

La experiencia ha demostrado que el valor óptimo de la relación de reflujo se encuentra en un intervalo dado por:

$$1.03 < R/R_m < 1.3$$

## REFERENCIAS

- [1] Carl J.Sullivan, Anja kuenz, Klaus-Dieter Vorlop. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry
- [2] David L. Trent. Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology
- [3] Propiedades físicas y químicas del propilenglicol, último acceso: 8 de Junio de 2019 a las 20:00. <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=57-55-6> (NIST)
- [4] Fogler, H.S., 2008. Elementos de Ingeniería de las Reacciones. Ed., Pearson Prentice Hall, Cuarta edición. México
- [5] Levenspiel, O., 1987. Ingeniería de las Reacciones Químicas. Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Oregón. Ediciones REPLA. S.A. México. D.F.
- [6] Perry, J.H., 1974. Manual del Ingeniero Químico. Ed., McGraw Hill. México.
- [7] Demanda del propilenglicol. Último acceso: 3 de junio de 2019 a las 12:00. <https://ihsmarkit.com/products/propylene-glycols-chemical-economics-handbook.html>
- [8] Mercado del propilenglicol. Último acceso: 3 de Abril de 2019 a las 12:00. Dow Propylene Glycol USP/EP - Dow Chemical
- [9] G.D. Ulrich y P.T. Vasudevan. How to estimate utility costs
- [10] Shinjiro Ishihara, Masayuki Yoshii, Shoko Ikeda, Koji Shinohara. Development of new dipropylene glycol and tripropylene glycol. Último acceso: 20 de Mayo de 2019 a las 19:00. [https://www.sumitomo-chem.co.jp/english/rd/report/files/docs/2014E\\_2.pdf](https://www.sumitomo-chem.co.jp/english/rd/report/files/docs/2014E_2.pdf)
- [11] Warren D.Seider, J.D.Seader, Daniel R. Levin. Product & Process Design Principles.
- [12] Turton, Richard, Shaejwitz, Joseph y Bhattacharyya. Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes. 2008.
- [13] Precio de mercado del propilenglicol. Último acceso: 9 de Julio de 2019 a las 12:30. <https://www.quiminet.com/productos/propilenglicol-268264536/precios.htm>
- [14] Coulson & Richardson's. Chemical Engineering Design. Volume 6. Fourth edition. R.K. Sinnott (2005).
- [15] Esmeralda Portillo. Tema 9 Ingeniería de procesos: Análisis económico de procesos químicos.
- [16] Precio del agua. Último acceso: 9 de Julio de 2019. <https://www.iagua.es/noticias/locken/precio-agua-espana>
- [17] Precio del óxido de propileno. Último acceso: 9 de Julio de 2019. <https://www.elconfidencialquimico.com/precio-oxidodepropileno-eleva-diciembre/>

