

Trabajo Fin de Grado
Grado en Ingeniería Química

Ingeniería básica de una planta de producción de
fenol a partir de cumeno

Autor: Pablo Cobos Romero

Tutor: Manuel Campoy Naranjo

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

Sevilla, 2019



Trabajo de Fin de Grado
Grado en Ingeniería Química

Ingeniería básica de una planta de producción de fenol a partir de cumeno

Autor:

Pablo Cobos Romero

Tutor:

Manuel Campoy Naranjo

Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental

Escuela Técnica Superior de Ingeniería

Universidad de Sevilla

Sevilla, 2019

A Alicia.

Resumen

El objetivo de este proyecto es el estudio de la Ingeniería básica necesaria para el desarrollo de una planta industrial con producción de 100.000 toneladas anuales de fenol vía cumeno.

En el presente documento se introducirá la teoría básica para el entendimiento del proceso, así como un recorrido por los distintos métodos de obtención de fenol para terminar describiendo su producción a partir del cumeno, la forma más rentable.

Como se verá a lo largo del proyecto, es complementaria la obtención de acetona, de tal manera que se tiene en cuenta en adelante como parte imprescindible del mismo.

El objetivo es producir 100 kt anuales de fenol, equivalentes a 62 kt anuales de acetona y 6 kt anuales de alfa metil estireno.

Finalmente se realiza un análisis económico mediante correlaciones para estimar la inversión inicial necesaria requerida por la instalación.

Abstract

The objective of this project is the study of the Basic Engineering necessary for the development of an industrial plant with capacity for producing 100,000 tons of phenol per year through cumene.

The document first introduces the basic theory and concepts needed to understand the whole process. It then goes through the different methods for obtaining phenol, and closes with a description its production out of cumene, the most profitable way of doing so.

The obtaining of acetone is complementary to the process as it is stated throughout this study, hence it will be taken into account as an essential part of it.

The goal is to produce 100 kt of phenol per year, corresponding to 62 of acetone per year and 6 kt of alphas-methylstyrene per year.

Lastly, an economic analysis will be carried out through correlations to estimate the initial investment required for setting up of the facilities.

Índice

Resumen.....	i
Abstract.....	iii
Índice de Tablas.....	vi
Índice de Figuras.....	vii
Notación.....	viii
1. Introducción.....	1
1.1 Objetivos y alcance.....	1
1.2 Propiedades y uso del fenol.....	1
1.3 Propiedades y uso de la acetona.....	4
1.4 Propiedades y usos del cumeno.....	6
1.5 Localización.....	7
1.6 Métodos de obtención del fenol.....	8
1.6.1 Sulfonación del benceno.....	11
1.6.2 Cloración del benceno.....	11
1.6.3 Oxidación directa de benceno.....	13
1.6.4 Oxidación de cumeno o método Hock.....	13
1.7 Mercado de fenol.....	15
1.8 Cinética y termodinámica.....	16
1.8.1 Oxidación.....	16
1.8.2 Escisión.....	18
1.8.3 Hidrogenación del AMS.....	21
2 Memoria descriptiva y justificativa.....	22
Unidad de Oxidación:.....	23
Unidad de Concentración:.....	26
Unidad de Descomposición:.....	28
Unidad de Cambio Iónico:.....	30
Unidad de Fraccionamiento I:.....	31
Fraccionamiento de la Acetona:.....	33
Fraccionamiento del fenol:.....	34
Unidad de Fraccionamiento II:.....	36
Unidad de AMS:.....	37
3 Memoria de cálculo.....	38
3.1 Equipos de Intercambio de energía mecánica.....	38
3.1.1 Bombas.....	38

3.1.2	Compresores	39
3.2	Equipos de Intercambio de calor	40
3.2.1	Intercambiadores de calor	40
3.3	Reactores	48
3.3.1	Oxidación	48
3.3.2	Escisión.....	49
3.4	Equipos de separación	50
3.4.1	Equipos Flash.....	50
3.4.2	Columnas de destilación	52
4	Mediciones y presupuestos	54
4.1	Coste de equipos	54
4.1.1	Correlaciones de costes	54
4.1.2	Correlaciones BOEHM.....	55
4.1.3	Parámetros característicos	55
4.2	Coste Total de la planta	58
5	Resumen y conclusiones.....	59
	Anexo I: Balance de Materia y Energía	60
	Anexo II: Hojas de especificaciones de los equipos.....	65
	Bibliografía	84

Índice de Tablas

Tabla 1-1 Propiedades físicas del Fenol [1]	3
Tabla 1-2 Propiedades físicas de la acetona [1] [2].....	5
Tabla 1-3 Propiedades físicas del cumeno [3] [4].....	6
Tabla 1-4 Evolución de K_{eq} vs T.....	17
Tabla 1-5 Evolución de K_{eq} vs T.....	18
Tabla 1-6 Evolución de K_{eq} vs T.....	20
Tabla 2-1 Especificaciones de corrientes de compresión.....	24
Tabla 2-2 Propiedades físicas del Ácido sulfúrico.....	29
Tabla 3-1 Caracterización de las Bombas	39
Tabla 3-2 Lista de Intercambiadores a diseñar.....	40
Tabla 3-3 Entalpías de formación a 25°C y 1 bar.....	42
Tabla 3-4 Poderes caloríficos	42
Tabla 3-5 Distribución de Temperaturas.....	42
Tabla 3-6 Caracterización de los Intercambiadores	47
Tabla 3-7 Caracterización de los Reactores de Oxidación.....	48
Tabla 3-8 Caracterización de los Reactores de Escisión.....	49
Tabla 3-9 Caracterización de los equipos Flash.....	52
Tabla 3-10 Caracterización de las Columnas	53
Tabla 4-1 Capacidad característica de cada equipo.....	55
Tabla 4-2 Parámetros característicos de cada equipo.....	55
Tabla 4-3 Parámetros característicos de cada equipo.....	55
Tabla 4-4 F_p para tanques flash reactores y columnas.....	56
Tabla 4-5 Correlación de Costes	56
Tabla 4-6 Parámetros característicos de cada equipo.....	56
Tabla 4-7 Coste de los equipos	57
Tabla 4-8 Coste Total de la Planta	58

Índice de Figuras

Figura 1.1 Localización de la Planta	7
Figura 1.2 Obtención de fenolato de sodio.....	11
Figura 1.3 Hidrólisis alcalina	11
Figura 1.4 Hidrólisis del clorobenceno	12
Figura 1.5 Proceso de obtención cumeno.....	13
Figura 1.6 Proceso de obtención de fenol vía cumeno.....	14
Figura 1.7 Principales productores de fenol [8]	15
Figura 1.8 Evolución de K_{eq} vs T.....	17
Figura 1.9 Evolución de los compuestos a lo largo del proceso	20
Figura 2.1 Estructura Entrada-Salida	22
Figura 2.2 Diagrama de bloques	22
Figura 2.3 Diagrama PFD. Unidad de Oxidación	23
Figura 2.4 Tren de compresión del aire.....	24
Figura 2.5 Diagrama PFD. Unidad de Concentración.....	26
Figura 2.6 Diagrama PFD. Unidad de Descomposición.	28
Figura 2.7 Diagrama PFD. Unidad de Fraccionamiento I.....	32
Figura 2.8 Columna de Acetona.....	33
Figura 2.9 Columna de Alquitranes	34
Figura 2.10 Pretratamiento para el Reactor R-106.....	34
Figura 2.11 Columna de AMS	35
Figura 2.12 Columnas Terminadoras de Fenol	35
Figura 2.13 Diagrama PFD. Unidad de Fraccionamiento II.	36
Figura 2.14 Columna de AMS	37
Figura 3.1 Volumen de Control R-101.....	41
Figura 3.2 Volumen de Control Intercambiador E-103	43
Figura 3.3 Diagrama PFD reactor R-102	44
Figura 3.4 Diagrama PFD reactor R-103	44
Figura 3.5 Diagrama PFD reactor R-104	45
Figura 3.6 Esquema de diseño Flash	51

Notación

TAR	Acetofenona + Metanol
AMS	Alfametilestireno
H	Altura
A	Área
BPA	Bisfenol A
m	Caudal másico
C	Concentración
K	Conductividad térmica
K	Constante de equilibrio
h_e h_i	Coefficiente de película exterior e interior
U	Coefficiente global de transferencia
ρ	Densidad
PFD	Diagrama de Flujo de Proceso
D_v	Diámetro
DTLM	Diferencia de temperatura media logarítmica
PDMC	Dimetilfenilcarbinol
L_t	Distancia entre platos
E_a	Energía de activación
Λ	Entalpía de vaporización
H_f^0	Entalpía normal de formación
F_{si} F_{se}	Factor de ensuciamiento interior y exterior
CHP	Hidroperóxido de cumeno
L	Longitud característica
R	Numero de Arrhenius
N_{real}	Número de etapas real
Nu	Número de Nusselt
Pr	Número de Prandtl
Re	Número de Reynolds

DCP	Peróxido de dicumilo
PIPB	Poliisopropilbenceno
W	Potencia de una bomba
t_{res}	Tiempo de residencia
t	Tonelada
r	Velocidad de reacción
v	Velocidad del fluido
μ	Viscosidad dinámica
V	Volumen

1. Introducción

En primer lugar, se muestran las características de los compuestos más importantes del proceso. Se explican por tanto las propiedades y el uso del fenol, la acetona y el cumeno. Este último sirve como intermediario químico para la obtención de los primeros, por lo que sus usos no se explican más allá del proceso.

1.1 Objetivos y alcance

El objetivo de este proyecto es la realización de la Ingeniería Básica necesaria para la producción de 100.000 toneladas anuales de fenol vía oxidación de cumeno.

El alcance del Proyecto comprende:

- Elaboración de un diagrama de flujo (PFD) que comprende desde la oxidación del cumeno hasta la obtención de fenol, acetona y alfa-metilestireno. Queda fuera de este proceso la aportación del diagrama P&ID, así como la instrumentación y control de la planta.
- Resolución de balances de materia y energía a partir del PFD aportado.
- El diseño de algunos equipos de la instalación, como puede ser el reactor. Quedan fuera del estudio los equipos correspondientes a la separación de los productos.
- Hojas de especificaciones de los equipos que forman la síntesis del proceso.
- Análisis económico de la instalación.

1.2 Propiedades y uso del fenol

El fenol es un compuesto orgánico de fórmula C_6H_5OH . Es el nombre específico para el hidroxibenceno, y sirve como nombre genérico para cualquier molécula que contenga una o más grupos hidroxilos enlazados a un anillo aromático. Este compuesto fue descubierto en 1834 por Runge, de forma que se aisló del alquitrán de hulla y fue llamado ácido carbólico. En 1841 Laurent lo obtuvo de forma cristalina, y en 1858 Kekule determinó su fórmula molecular [1].

En 1897, Hoffmann fue el primero en sintetizar ácido acetilsalicílico, el principio activo de la aspirina común. A partir de 1900 y después de la Primera Guerra Mundial, la demanda de fenol creció debido a la comercialización de las resinas fenólicas, y la producción natural de fenol fue reemplazada por la síntesis. Después de la Segunda Guerra Mundial, la demanda volvió a incrementarse debido a la nueva comercialización de los bisfenoles, aunque en este campo cayó rápidamente debido a que podía causar riesgos irreversibles en la salud. Con la revolución tecnológica, se empezaron a fabricar plásticos, y con ello los policarbonatos.

Hoy en día, la principal aplicación del fenol es la producción de Bisfenol A, a partir de la cual obtenemos el policarbonato. Se trata de un plástico de altísimas prestaciones utilizado en los sectores de la automoción y de la construcción [1].

El fenol es un potente veneno si se expone en grandes cantidades. Si es ingerido, provoca quemaduras en el sistema digestivo, además de debilidad muscular, aumento del ritmo cardíaco y respiración irregular. En último momento provoca un colapso del sistema nervioso central y posiblemente la muerte.

Los principales usos del fenol son para la fabricación de BPA (Bisfenol A), que a su vez se utilizan para la fabricación de resinas Epoxi y policarbonatos. Este último material es utilizado para

infinidad de compuestos que se ven a diario, ya que posee unas características propias que pueden sustituir en ocasiones al cristal y al acero inoxidable, entre otros. Entre sus aplicaciones destaca la de la arquitectura, en forma de paneles, en ingeniería mecánica, maquinaria, automoción, etc. [8].

Otro uso importante del fenol es para fabricar resinas fenólicas. Estas las podemos ver en recubrimientos de bolas de billar o maderas, neumáticos o cintas adhesivas, entre otras. Sirve también en la fabricación de alquifenoles para aceites lubricantes.

También destaca en la industria del nylon, en la industria cosmética, resinas para la industria metalúrgica y en la industria farmacéutica.

Las propiedades físicas del fenol se muestran en la Tabla 1-1.

Tabla 1-1 Propiedades físicas del Fenol [1]

Nombre	Fenol
Fórmula	C ₆ H ₅ OH
Masa Molar	94,11 kg/kmol
Punto de fusión	40,9°C
Punto de ebullición	181,75°C
Densidad relativa	
0°C	1,092
20°C	1,071
50°C	1,050
Viscosidad dinámica	
20°C	11,41 mPa·s
50°C	3,42 mPa·s
100°C	1,5 mPa·s
150°C	0,67 mPa·s
Constante de disociación K _a (20°C)	1,28 · 10 ⁻¹⁰
Entalpía de fusión (41°C)	120,6 kJ/kg
Entalpía de vaporización (182°C)	511 kJ/kg
Entalpía de formación (20°C)	-160 kJ/kg
Calor de combustión	-32590 kJ/kg
Calor específico	
0°C	1,256 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
20°C	1,394 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
50°C	2,244 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
100°C	2,382 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
Calor específico (estado vapor)	
27°C	1,105 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
527°C	2,26 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
Punto de inflamabilidad (DIN 51 758)	82°C
Temperatura de Ignición (DIN 51 794)	595°C
Temperatura de autoignición	715°C
Presión de vapor	
20°C	0,02 kPa
36,1°C	0,1 kPa
48,5°C	0,25 kPa
58,3°C	0,5 kPa
69°C	1 kPa
84,8°C	2,5 kPa
98,7°C	5 kPa
114,5°C	10 kPa
137,3°C	25 kPa
158°C	50 kPa
181,5°C	100 kPa
207,5°C	200 kPa
247,7°C	500 kPa
283°C	1000 kPa

1.3 Propiedades y uso de la acetona

La acetona es un compuesto químico de fórmula CH_3COCH_3 . Es la más importante y primera entre la serie homóloga de cetonas alifáticas, y se puede encontrar natural en el medio ambiente. La mayor parte de producción de acetona es debido a la producción de fenol vía cumeno. Es un líquido incoloro, y es uno de los disolventes más utilizados en la industria debido a sus excelentes propiedades. Su aplicación más importante, sin embargo, es como intermediario en la síntesis de metacrilato de metilo, BPA, alcohol de diacetona y otros productos [8].

La acetona fue fabricada por primera vez a partir de la destilación seca de acetato de calcio, y luego por fermentación de etanol. En 1920 se empezaron a fermentar los carbohidratos directamente a acetona [28].

En la década de los cincuenta este método fue reemplazado por la oxidación de cumeno a fenol más acetona. Hoy en día, este último método cuenta con el 95% de toda la producción de acetona.

Las propiedades físicas de la acetona se muestran en la Tabla 1-2.

Tabla 1-2 Propiedades físicas de la acetona [1] [2]

Nombre	Fenol
Fórmula	CH ₃ CO CH ₃ CO
Masa Molar	58,081 kg/kmol
Punto de fusión	-94,7°C
Punto de ebullición	56,2°C
Densidad	791 kg/m ³
Densidad relativa	
0°C	0,8137
15°C	0,7970
20°C	0,7908
Viscosidad dinámica	
-80°C	1,53 mPa·s
-40°C	0,71 mPa·s
0°C	0,40 mPa·s
20°C	0,32 mPa·s
40°C	0,27 mPa·s
Entalpía de fusión (-95°C)	98,47 kJ/kg
Entalpía de vaporización (30°C)	545,2 kJ/kg
Entalpía de formación (20°C)	235,3 kJ/kg
Calor de combustión	1804 kJ/mol
Calor específico	
-80°C	1,53 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
-40°C	0,71 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
0°C	0,40 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
20°C	0,32 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
40°C	0,27 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
Calor específico (estado vapor)	
102°C	92,1 J·mol ⁻¹ ·K ⁻¹
Punto de inflamabilidad (DIN 51 758)	-20°C
Temperatura de autoignición	738°C
Presión de vapor	
20°C	24 kPa
30°C	37,3 kPa
40°C	56 kPa
50°C	82,8 kPa
60°C	114,8 kPa
80°C	214,8 kPa
100°C	372,8 kPa
140°C	929,6 kPa

1.4 Propiedades y usos del cumeno

El cumeno o isopropilbenceno es una sustancia química que en su mayoría se utiliza como intermediario para la obtención de fenol y acetona. Es un líquido incoloro de olor característico. Su fórmula molecular es C_9H_{12} . [3] [4].

Las propiedades físicas del cumeno se muestran en la Tabla 1-3.

Tabla 1-3 Propiedades físicas del cumeno [3] [4]

Nombre	Fenol
Fórmula	C_9H_{12}
Masa Molar	120,2 kg/kmol
Punto de fusión	-96°C
Punto de ebullición	152°C
Densidad	862 kg/m ³
Densidad relativa (agua=1)	0,90
Densidad relativa (aire=1)	4,2
Presión crítica	31,58 atm
Presión de vapor (20°C)	0,427 kPa
Viscosidad	
Punto de inflamabilidad	31°C
Temperatura autoignición	420°C
Temperatura crítica	631°K

1.5 Localización

Se decide situar la fábrica en el Polígono Industrial Cortijo Real, en la ciudad de Algeciras de la provincia de Cádiz. Este emplazamiento facilita el transporte de cumeno que será comprado a la fábrica de CEPSA situada en Huelva. Además, tiene una gran cantidad de vías de acceso debido a la historia del lugar, ya que se encuentran asentadas grandes empresas que reciben suministros del puerto de Algeciras, el primero en tráfico total de mercancías de España y el sexto de Europa.

También destaca la cercanía hacia varios puertos de la Comunidad Autónoma de Andalucía, no solo el situado en la misma ciudad.

El amplio terreno en el que se situará la planta atenderá prestaciones de almacenamiento de materias primas, productos finales y productos intermedios.

Cabe destacar que el clima no supone un problema de integración energética o de cualquier otro tipo en el proceso.

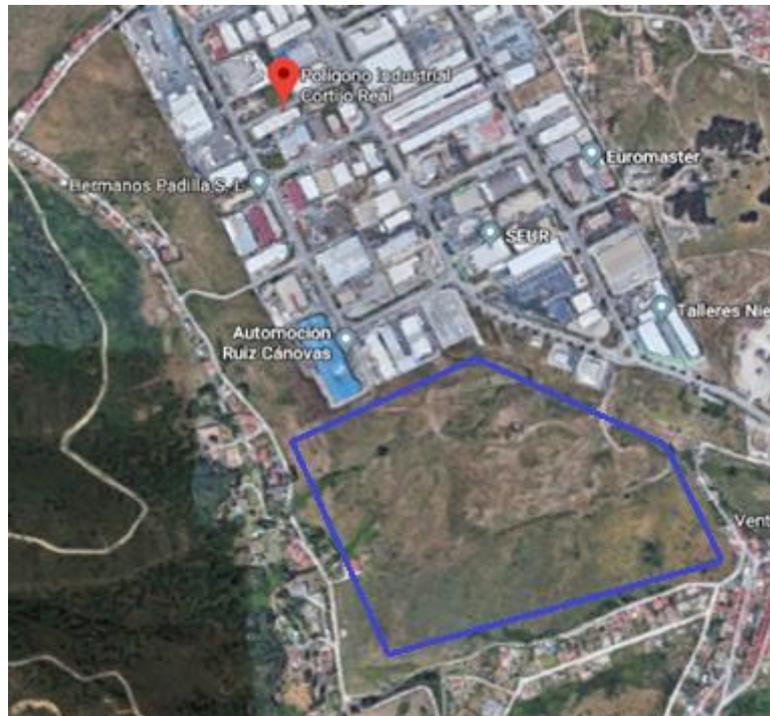


Figura 1.1 Localización de la Planta

1.6 Métodos de obtención del fenol

El objetivo principal del diseño de un proceso es la “arquitectura” o PFD (diagrama de flujo del proceso). Existen técnicas sistemáticas que permiten obtener, o al menos previsualizar, el comportamiento de una producción sin necesidad de un diseño detallado o de realizar el dimensionamiento de equipos. Para ello se desarrollan varias alternativas para finalmente seleccionar la mejor (comúnmente la más rentable) que satisfaga las restricciones.

Es común en este paso realizar simulaciones en distintas herramientas que se brindan hoy en día con fuertes programas matemáticos que permiten analizar y evaluar una determinada situación.

El diseño se desarrolla pensando en tareas dejando a un lado las operaciones unitarias.

En este caso se elige un método jerárquico como método sistemático de diseño [10]. Este consiste en descomponer un problema global en subproblemas más sencillos.

El primer paso es valorar si el proceso será continuo o discontinuo. En este caso se elige el continuo, por diversos motivos. La producción de la presente planta es de 100.000 toneladas anuales. Con este nivel de producción no es rentable hacerlo de una manera discontinua. El proceso debe estar activo durante la mayor parte del año debido a que los productos son vendidos con independencia de la temporada. Además, dichos productos pueden ser almacenados sin que sufran una degradación de sus características, por lo que el intervalo de tiempo entre la fabricación y la venta puede aumentar sin verse modificada la rentabilidad del proyecto.

El sistema ahora se puede dividir en fases o niveles. El primero es el de la recogida de información y puesta en línea de datos. Este es el paso sobre el que se estructuran los demás y en el que se centra este proyecto:

- Capacidad anual de producción (100.000 t/año a 8.000 h/año).
- Química del proceso: pueden existir varias rutas químicas. Estas se eligen según la estequiometría de las reacciones (productos intermedios, rangos de presión y temperatura), termodinámica de las reacciones (identificación de las reacciones exotérmicas y endotérmicas, reversibles o irreversibles, sensibilidad a la temperatura) y la lista de restricciones, como puede ser la relación entre reactivos a la entrada del reactor o los límites de inflamabilidad y de explosión.
- Selectividad: lista de reacciones secundarias, datos de selectividad en función de conversión, incluir reacciones que puedan sufrir las impurezas con la alimentación.
- Catálisis: lista de los posibles catalizadores y sus usos, sensibilidad de estos a la temperatura y a las impurezas, examinar la regeneración y el vertido final.
- Ingeniería del reactor: es una de las partes más importantes. Se estudian los tipos de reactores factibles, datos sobre tiempo de residencia y condiciones de operación (con sus restricciones) y datos sobre la cinética de reacción.
- Datos económicos: precio de los productos y subproductos (variación según la pureza), precio de materias primas (se incluye costes de transporte y almacenamiento), precio de los servicios (combustibles, vapor, agua de refrigeración, electricidad) y coste de vertido de residuos.
- Datos de la planta y el lugar: como se ha explicado en el punto anterior, es importante la localización de la planta (proximidad a materias primas, cercanía a estaciones de transporte, integración a un complejo ya existente), la facilidad del almacenamiento de las materias primas y de los productos, el clima, los servicios disponibles y la legislación ambiental del lugar.
- Seguridad y salud: riesgos de explosión (lista de mezclas potencialmente peligrosas, rangos de concentración y temperatura), riesgo de incendios (datos sobre la temperatura de autoignición, límites de inflamabilidad) y toxicidad.

El segundo nivel trata de seleccionar la ruta química del proceso atendiendo a diversos factores:

- Origen de la ruta: elaboración propia, patente expirada o licencia. En el caso de esta planta se elige una ruta mediante la oxidación del cumeno, que ocupa casi el 90% de las plantas que producen fenol.
- Disponibilidad de las materias primas: precio y pureza.
- Manejo y almacenamiento de productos tóxicos y peligrosos.
- Conversión y selectividad.
- Catalizadores.

A este nivel le sigue la estructura Entrada-Salida:

- Define el balance global de materia del proceso. Una vez resuelta permite calcular el consumo de materias primas y las corrientes de salida del proceso.
- Reglas básicas:
 1. Masa total de las corrientes de entrada igual a la masa total de las corrientes de salida.
 2. Masa total de impurezas no reactivas que entran igual a la masa total de impurezas no reactivas que salen.
 3. Los reactivos son componentes valiosos que deben consumirse en el proceso y no salir con las corrientes de salida.
 4. Para estimar los caudales y las composiciones de las corrientes se asumen separaciones perfectas.
- Decisiones y aspectos que atañen a la estructura entrada-salida:
 1. Purificar o no la alimentación: si la impureza es un inerte, pero está presente en grandes cantidades, es posible que sea mejor separarla, aunque suponga un gasto extra. Lo mismo ocurre con las impurezas que reaccionan y forman productos no deseados, peligrosos, o difíciles de separar.
 2. Recircular o no subproductos generados en reacciones reversibles. Un ejemplo puede ser el proceso HDA (Hidrodealquilación del tolueno) en el que la recirculación hasta la extinción de $C_{12}H_{10}$ evita una columna de destilación a costa de incrementar la recirculación y el tamaño de los equipos.
 3. Purgar o separar los componentes que se acumularían en caso de no hacerlo: las impurezas inertes que entran en un proceso deben salir. Si son difíciles de separar de las corrientes que se recirculan deben purgarse para evitar la acumulación.
 4. Adición de componentes con funciones específicas: puede ser un disolvente para absorber un componente o un inerte para alterar la composición en un determinado equilibrio.
 5. Número de corrientes de salida: conviene listar los componentes que salen del reactor y agruparlos según destino. De esta forma, se facilita la tarea de chequear que todos los productos, subproductos o inertes del proceso no se acumulan.
 6. Variables de diseño: hay determinadas variables de diseño que afectan a la estructura entrada-salida.

El cuarto nivel trata la estructura de recirculación y el sistema de reacción: se obtienen los siguientes datos:

- Número de sistemas de reacción: depende de si las reacciones involucradas pueden llevarse a cabo o no en el mismo reactor.

- Número de corrientes de recirculación: listar componentes que salen del reactor y ordenarlos según punto de ebullición o etiquetar cada componente con el destino que vaya a tener.
- Exceso de reactivo recirculando y no con alimentación fresca: solo si el reactivo es muy barato o muy difícil de separar. Favorece la conversión del reactivo limitante tanto si la reacción está limitada por el equilibrio como si no. Puede alterar la distribución de los productos.
- Recirculación de productos, subproductos e inertes: a veces conviene recircular otros componentes además de los reactivos.
- Tener en cuenta algunos aspectos con respecto al coste de la recirculación: recircular gases es más costoso que hacerlo con líquidos. También existen muchos tipos de compresores a los que hay que calcularle su potencia de compresión, la potencia de su motor, el número de etapas, etc.
- Con respecto al diseño del sistema de reacción, el tipo de reactor y las condiciones de operación dependerán de si es catalítico o no, de la fase en la que se produce la reacción, de si esta es simple o compleja, de su cinética, de las limitaciones de equilibrio, los efectos térmicos, la presión de operación y el perfil óptimo de temperatura. Existen distintos tipos de reactores que se contemplarán más adelante en la memoria descriptiva y justificativa.

Es aquí donde se centra el proyecto a la hora de estudiar la cinética de la reacción, el perfil de temperaturas, efectos térmicos y de la selección del modelo de flujo en un sistema.

El siguiente nivel, el seis, se basa en la elección de los sistemas de separación necesarios para la planta para, por último, en el nivel siete desarrollar una integración energética que optimice todo nuestro proceso. No se hace especial mención a estos niveles puesto que no es competencia del proyecto diseñarlos.

Por todo esto, en el siguiente proyecto se explican cuatro métodos para la obtención de fenol, según [5]. Siguiendo los pasos descritos para el diseño integrado del proceso y del producto se llega al método óptimo de obtención de fenol y acetona, que es por vía de la oxidación de cumeno.

1.6.1 Sulfonación del benceno

La producción del fenol a partir de la sulfonación del benceno es el proceso más antiguo para producir fenol sintético. Está basado en la investigación de Wurtz y Kekule en 1867, quienes descubrieron la siguiente reacción, que se muestra en la figura 1.2:

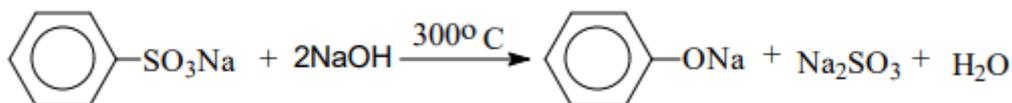


Figura 1.2 Obtención de fenolato de sodio

El bencenosulfonato de sodio se obtiene por reacción de benceno con ácido sulfúrico concentrado. De esta forma produce ácido bencenosulfónico para la posterior neutralización con sulfito de sodio o carbonato de sodio. El fenol es liberado del fenolato de sodio.

1.6.2 Cloración del benceno

Hidrólisis alcalina: Durant y Bardy descubrieron en 1872 que el tratamiento de clorobenceno con sosa cáustica acuosa produce fenolato de sodio y cloruro de sodio, tal como se muestra en la figura 1.3.

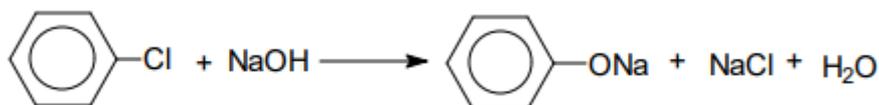
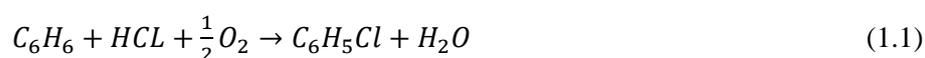


Figura 1.3 Hidrólisis alcalina

El clorobenceno se produce a partir de benceno y un ión cloruro. Por lo general, el proceso se combinó con electrólisis en la industria cloro-álcali para recuperar cloro del cloruro sódico.

Proceso Raschig-Hooker [6]: Se trata de un proceso químico para la obtención de fenol. El nombre viene del químico alemán Friedrich Raschig.

Este proceso se divide en dos etapas. La primera consiste en producir clorobenceno a partir de benceno, ácido clorhídrico y aire. A esta etapa se le denomina Oxiclорinación, y lleva a cabo en un reactor con unas condiciones para llevar a cabo la siguiente reacción:



Esta reacción se lleva a cabo mediante un catalizador. En este caso se utiliza Ca₃(PO₄)₂/SiO₂ con agua a 450-500°C.

En la segunda etapa se lleva a cabo la hidrólisis del clorobenceno. Se alimenta el reactor con el clorobenceno obtenido anteriormente y con vapor de agua, con temperaturas de aproximadamente 500°C. La reacción que se lleva a cabo es la siguiente:



La conversión del clorobenceno a fenol es del 10-15%. Esto hace que sea un proceso de bajo rendimiento.

De esta forma, el ácido clorhídrico actúa como catalizador, que puede ser una ventaja en nuestro proceso. Sin embargo, no es este el que se elige para el presente proyecto debido a su alta corrosividad, así como la alta demanda de energía implicada en el mismo.

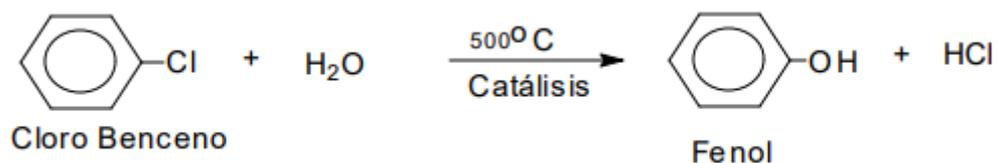


Figura 1.4 Hidrólisis del clorobenceno

1.6.3 Oxidación directa de benceno

La oxidación directa de fenol es el proceso más simple para producir fenol. El benceno se puede oxidar fácilmente en presencia de aire. Sin embargo, el fenol que se forma también se oxida, y más rápidamente aún. Por tanto, reacciona continuamente con oxígeno u otro agente oxidante de tal forma que se forma dióxido de carbono y agua. Por lo tanto, la conversión de benceno a fenol se limita a un pequeño porcentaje.

Este método, por las razones descritas, no es usado industrialmente. Sin embargo, hacia 1990 se realizaron varios intentos de comercialización usando óxido nitroso como agente oxidante en un proceso heterogéneo en fase gaseosa.

1.6.4 Oxidación de cumeno o método Hock

De los diferentes métodos de fabricación de fenol y acetona, se utiliza el basado en la oxidación de cumeno. En situaciones normales se partiría de la fabricación de cumeno pues, como se ve más adelante, resulta más económico. En este proyecto se parte de la compra del mismo. No obstante, se explica el proceso completo de manera teórica.

Este proceso consta de dos etapas, la fabricación de cumeno, y la posterior fabricación de fenol. El proceso de cumeno usa como materias primas benceno y propileno para formar mediante una reacción de alquilación cumeno y poliisopropilbenceno, PIPB, como principal subproducto. En la etapa de transalquilación el PIPB es reaccionado con benceno para formar cumeno. Tanto el reactor de alquilación como el de transalquilación utilizan zeolitas como catalizador. El cumeno producido es separado y purificado en el tren de destilación de la mezcla efluente de reacción. El esquema se muestra en la figura 1.5.

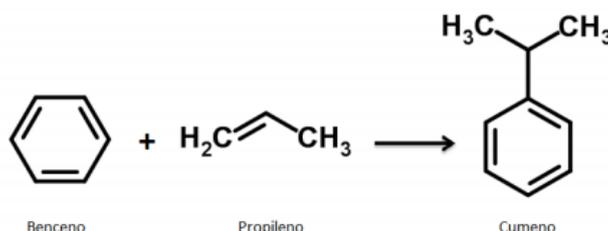


Figura 1.5 Proceso de obtención cumeno

En la segunda etapa, planta de fenol, el cumeno es oxidado con aire para obtener hidroperóxido de cumeno (CHP) en un reactor multietapa en fase líquida. La mezcla es entonces destilada en un sistema de vacío. El CHP concentrado es entonces escindido a fenol y acetona en presencia de ácido como catalizador. El fenol y la acetona son purificados por destilación.

El alfa-metilestireno, AMS, principal subproducto de la reacción de descomposición del CHP, es hidrogenado para formar de nuevo cumeno o bien purificado en la planta de alfa-metilestireno para su comercialización.

Como se ha comentado anteriormente, el alcance de este documento está referido al proceso de obtención de fenol y acetona.

La producción de fenol y acetona vía oxidación de cumeno se realiza en dos etapas: oxidación de cumeno a CHP y descomposición del CHP a fenol y acetona. Ambas reacciones son altamente

exotérmicas. Mientras que la reacción de oxidación es auto catalítica, la de descomposición necesita un agente ácido catalizador y es muy selectiva en fenol, acetona y AMS.

Después de una serie de etapas intermedias, el CHP se escinde en medio ácido para formar fenol y acetona, de forma que, en términos globales, se llega al siguiente conjunto de reacciones [7], representadas en la figura 1.6.

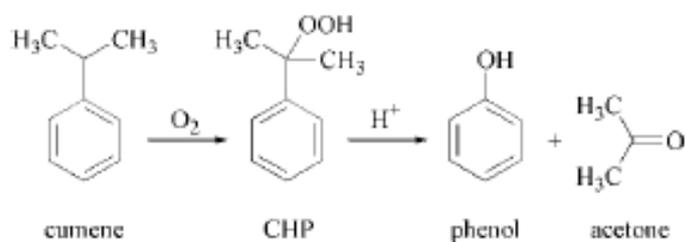


Figura 1.6 Proceso de obtención de fenol vía cumeno

1.7 Mercado de fenol

Como se ha visto anteriormente, el fenol tiene múltiples usos que hace que su comercialización sea fácil en lo que se refiere a demanda. Sin embargo, un mercado con esas características tiene grandes competidores. En la figura 1.7 se muestran los principales productores de fenol mundiales [8]:

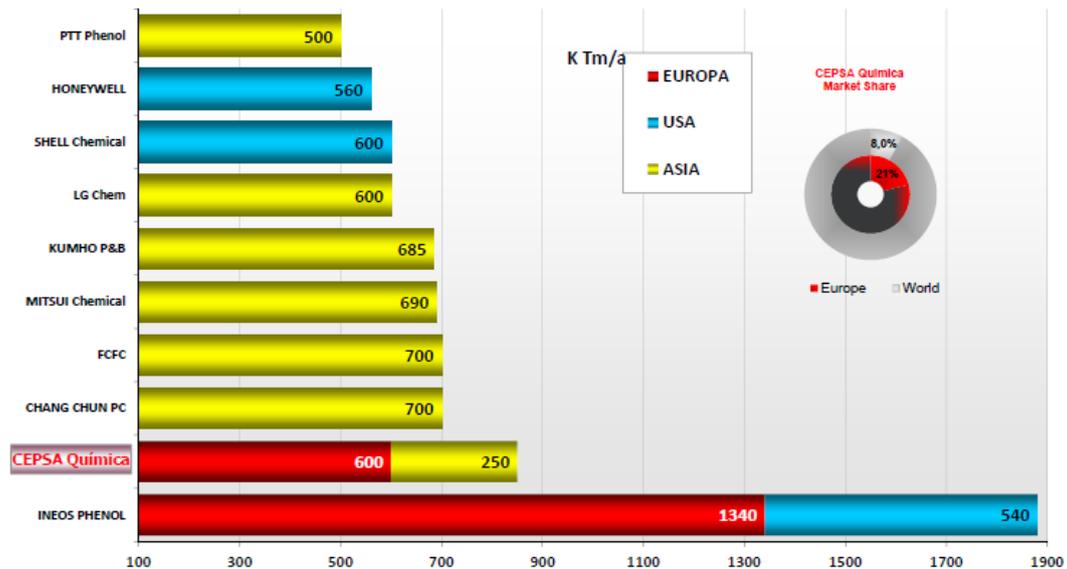


Figura 1.7 Principales productores de fenol [8]

El principal uso del fenol va dirigido a producir bisfenol A, el cual se utiliza para la automoción (entre otros). Este mercado sigue muy activo en la actualidad. Sin embargo, como se ve en la figura 1.7, las ventas y producción del fenol se han visto desplazadas de Europa a Asia. Esto se debe a fundamentalmente al precio del benceno en este continente. En los últimos años ha disminuido el precio del benceno en Asia hasta alcanzar los 150 \$/t según [11], más bajo que en Europa.

El benceno es la materia prima con la que se produce el cumeno, y a su vez este es utilizado como principal vía para la fabricación de fenol y acetona. Por tanto, si el benceno es más económico, también lo es la fabricación de estos dos compuestos. Por consiguiente, tendrán precios más competitivos en el mercado.

Esta circunstancia ha hecho disminuir la demanda de fenol en Europa, lo que ha repercutido en su producción. Lo mismo ocurre con la acetona, que está íntimamente ligada al primero debido a que la fabricación de ambos vía oxidación de cumeno sigue resultando la vía más económica para obtenerlos.

1.8 Cinética y termodinámica

Más adelante se contemplarán 5 unidades a la hora de diseñar la planta de producción de fenol. Sin embargo, para explicar la cinética y termodinámica de la reacción, nos valdremos de dos etapas principales y una secundaria: la oxidación del cumeno para producir hidroperóxido de cumeno y la escisión de este último en fenol y acetona vía ácida, con su posterior separación para la purificación de los productos según [1] y [7]. La etapa secundaria sería la hidrogenación del AMS para producir cumeno.

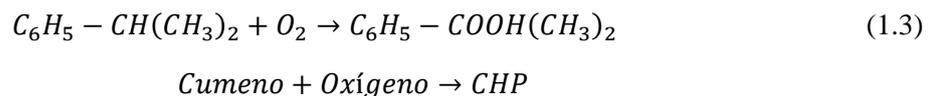
1.8.1 Oxidación

En la unidad de oxidación se lleva a cabo la oxidación de cumeno para dar CHP. La reacción se realiza en fase gas-líquido. Para ello se dispondrá de un reactor de acero inoxidable que realiza la oxidación sobre el principio de columna de burbuja. Estos reactores pueden ser de tipo tanque o columna y pueden alcanzar una altura de 20 metros. Es común que se utilicen varios dispuestos en serie para tener una distribución de tiempos de residencia óptimos.

La reacción que se lleva a cabo es exotérmica y auto-catalítica: la velocidad de reacción incrementa a medida que aumenta la concentración de CHP. Sin embargo, también disminuye la selectividad de la transformación del cumeno en fenol y acetona. Por tanto, no se desea una concentración demasiado elevada a la salida del reactor de oxidación, que en este caso es del 30%. Los valores comunes oscilan entre el 30% y el 40%.

Al tener presencia el fenol en la reacción de oxidación, se produce un efecto inhibitor en la misma. Por ello se elige un catalizador en fase acuosa como es la sosa o la sosa cáustica ya que mantiene un pH alto (8,5-10,5). De lo contrario, y con un pH bajo (medio ácido), se favorecería la descomposición de CHP a fenol y acetona (como se explicará más adelante). Así se evita la descomposición temprana del CHP y aumenta la selectividad [13].

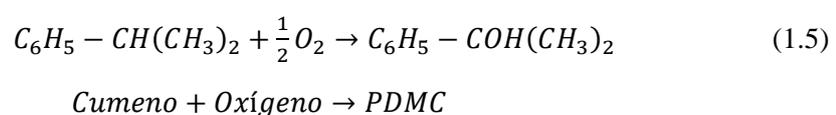
La reacción que ocurre es la siguiente:



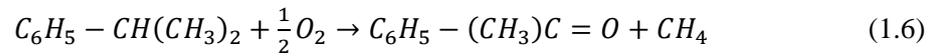
Con su respectiva velocidad de reacción:

$$r_{CHP} = \frac{d(CHP)}{dt} = k * [CHP]^{0,5} * [Cumeno] \quad (1.4)$$

Esta es la reacción principal para formar CHP. Sin embargo, existe una reacción secundaria que produce dimetilfenilcarbinol (PDMC) a partir del cumeno:



Existe también otra reacción que forma acetofenona (Reacción 1.6) a partir de cumeno. Esta no se tomará en cuenta debido a la baja selectividad sobre ella (<0,5%).



Un aspecto importante a tener en cuenta es la temperatura a la que se llevará a cabo la oxidación. Si fuera demasiado alta, se favorecería de nuevo la descomposición del CHP. Por tanto, la temperatura oscila entre los 90-120°C y presiones de 5-7 bar según [5].

Ya que no se conoce la cinética exacta de la reacción, se va a intentar un análisis lo más detallado posible para escoger las condiciones óptimas de operación.

Para un análisis termodinámico más detallado, se contemplará el equilibrio haciendo uso del ASPEN Plus. Para ello, se hace uso de un reactor REquil (equilibrio), en el que se introduce cumeno y oxígeno. Los resultados se muestran en la tabla 1-4:

Tabla 1-4 Evolución de Keq vs T

T (°C)	Keq
120	7343,46
115	10132,03
110	14099,85
105	19797,17
100	28055,56
95	40144,60
90	58023,15

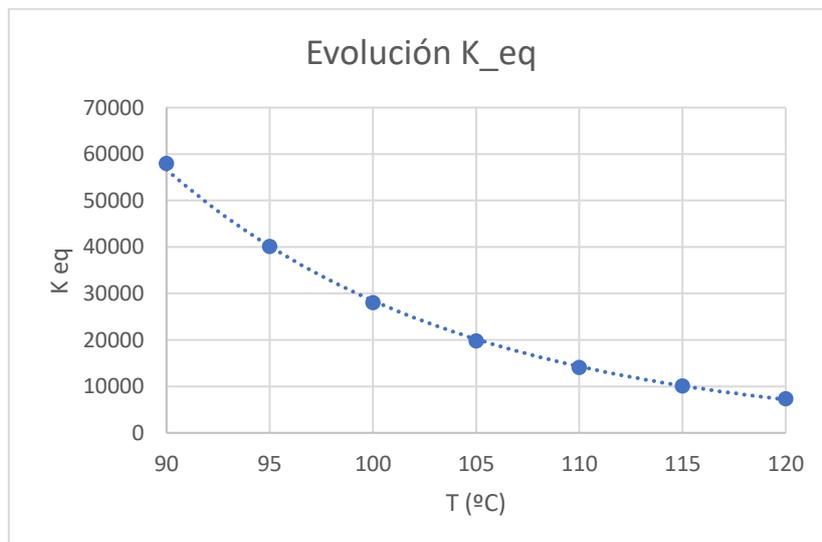


Figura 1.8 Evolución de Keq vs T

La constante de equilibrio disminuye conforme se aumenta la temperatura acorde a la Figura 1.8. Aun así, para el rango que se estudia, es suficientemente alta y se puede considerar irreversible.

La conversión de cumeno a CHP que se alcanza en estas condiciones es en torno al 30-35%.

La selectividad sobre la reacción principal en estas condiciones es del 95% según [15].

Conforme a la reacción secundaria, el estudio de equilibrio muestra que la reacción es irreversible, y la conversión del cumeno en PDMC es de más del 99%. Para simplificar, se considerará una conversión del 100%. La evolución de la constante de equilibrio con respecto a la temperatura se muestra en la tabla 1-5.

Tabla 1-5 Evolución de Keq vs T

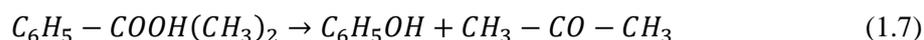
T (°C)	Keq
120	4,81E+20
115	9,86E+20
110	2,05E+21
105	4,38E+21
100	9,5E+21
95	2,11E+22
90	4,79E+22

Los tiempos de residencia para esas condiciones según los estudios [15] y [16] son de 3 a 6 horas.

Una vez se obtiene el CHP al 30%, la solución se lleva a una unidad de concentración flash que evapora el cumeno hasta lograr una concentración a la entrada del reactor de escisión del 80%.

1.8.2 Escisión

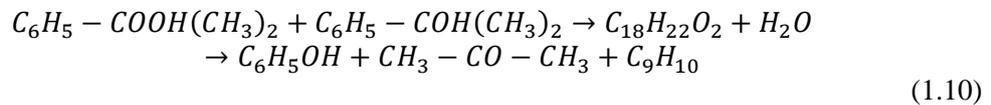
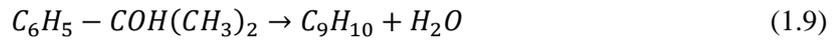
En esta etapa se producen multitud de reacciones. La escisión de CHP en fenol y acetona es la reacción principal:



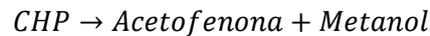
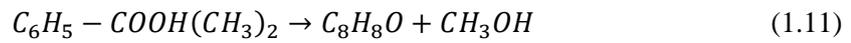
$$r_{CHP} = \frac{d(CHP)}{dt} = k * [CHP] * [H_2SO_4] \quad (1.8)$$

El catalizador que se ha utilizado es un ácido diluido (2%) [5]. Se mantiene un bajo contenido ácido para evitar reacciones indeseadas que llevan a productos como aldehídos y cetonas aromáticas. Se pretende también que casi todo el CHP reaccione. Una concentración alta de este compuesto a la salida del reactor puede provocar reacciones en cadena y terminar en una explosión. Se pretende entonces evitar puntos calientes y acumulación de este [9].

Aunque la selectividad con este ácido es alta, no puede evitarse la formación de algunos subproductos. El principal es el AMS, que podrá recuperarse como cumeno mediante una hidrogenación. El proceso obtiene AMS mediante dos reacciones, que se muestran a continuación:



Otra reacción secundaria, la cual produce Acetofenona y Metanol (TAR) es la siguiente:



Esta última no se tomará en cuenta debido a su baja selectividad.

Un esquema simplificado sería el que se muestra en la figura 1.9:

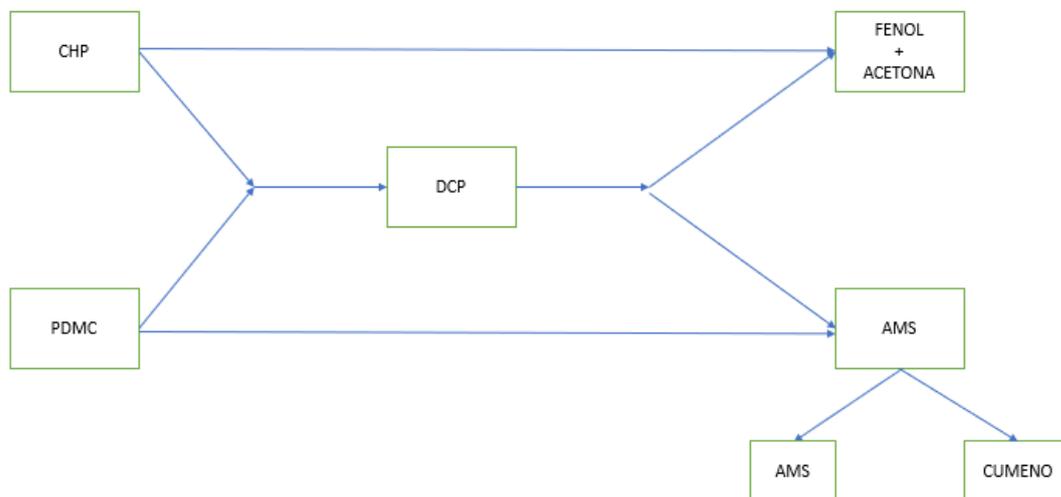


Figura 1.9 Evolución de los compuestos a lo largo del proceso

Por tanto, el CHP se descompone por completo para dar cantidades equimolares de fenol y acetona. Además, se producen pequeñas cantidades de AMS.

Este proceso no se lleva a cabo en un único reactor. Los pasos son los siguientes:

Reactor Agitado CSTR

Al igual que en la etapa de oxidación, no se conoce la cinética de las reacciones.

Se realiza un estudio del equilibrio para conocer las posibles condiciones del reactor. De la misma forma, se realiza un diseño en ASPEN con un reactor REquil para la reacción principal a 8 bar. Los resultados se muestran en la tabla 1-6.

Tabla 1-6 Evolución de K_{eq} vs T

T (°C)	K_{eq}
50	7,50E+45
60	5,49E+44
70	4,69E+43
80	4,59E+42
90	5,11E+41

En el rango de temperatura de estudio la reacción se considera irreversible.

Debido a la alta selectividad sobre la reacción principal, se estima que todo el CHP se convierte en fenol y acetona. Sin embargo, esto se realiza en varias etapas: en este primer reactor se escinde el 85% del CHP a fenol y acetona y a continuación se termina de descomponer por completo, alcanzando más del 99% de conversión.

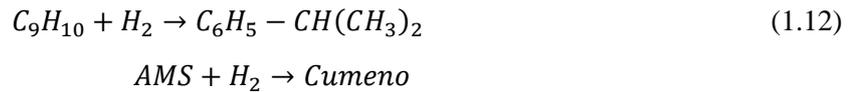
El tiempo de residencia en el reactor oscila entre 30-120 minutos [17].

Reactor FPR

Una vez la mezcla sale del primer reactor, se acondiciona a una temperatura aproximada de 125 °C y se somete a condiciones de flujo tapón por un tiempo suficiente para que todo el CHP se descomponga. También los subproductos forman fenol, acetona y AMS.

1.8.3 Hidrogenación del AMS

El proceso de hidrogenación se basa en la siguiente reacción:



Con su respectiva velocidad de reacción [14]:

$$\begin{aligned} -r_{AMS} &= k_{AMS} * \frac{k_H C_H}{(1 + \sqrt{k_H C_H})^2} = k_o * \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) * \frac{k_H C_H}{(1 + \sqrt{k_H C_H})^2} \left(\frac{mol}{s * g_{cat}}\right) \\ C_H &= \frac{mol}{m^3} \end{aligned} \quad (1.13)$$

La reacción se lleva a cabo con un catalizador de paladio Pd/Al_2O_3 . Este compuesto, con respecto a otros como el níquel, hace que únicamente se forme cumeno.

Esta reacción tiene una constante de equilibrio muy elevada, lo que hace que se considere como irreversible.

2 Memoria descriptiva y justificativa

En este apartado se explica el proceso de obtención de fenol vía cumeno. Se estudia cada etapa del proceso.

En la figura 2.1 se muestra un diagrama de bloques de la estructura Entrada-Salida:

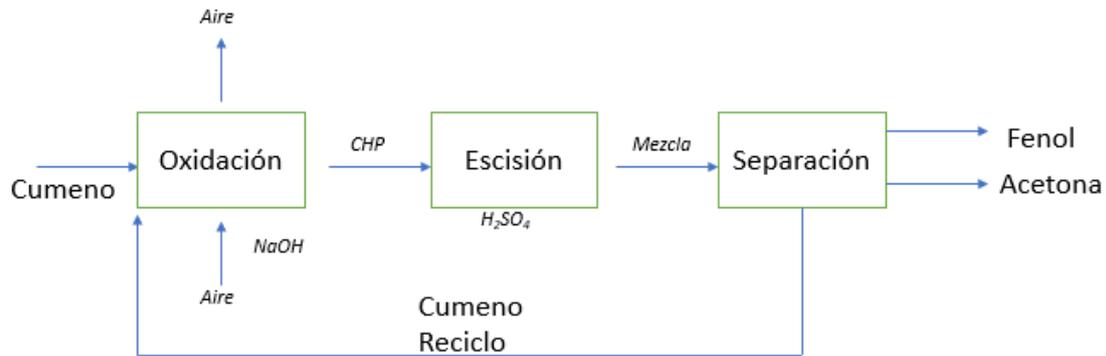


Figura 2.1 Estructura Entrada-Salida

El proceso de obtención de fenol se divide en cuatro partes. Se tienen pues las siguientes etapas: oxidación, concentración, descomposición y fraccionamiento, de acuerdo con [8] y [12].

Por tanto, se tiene el siguiente diagrama de bloques simplificado de la instalación, que se muestra en la figura 2.2.

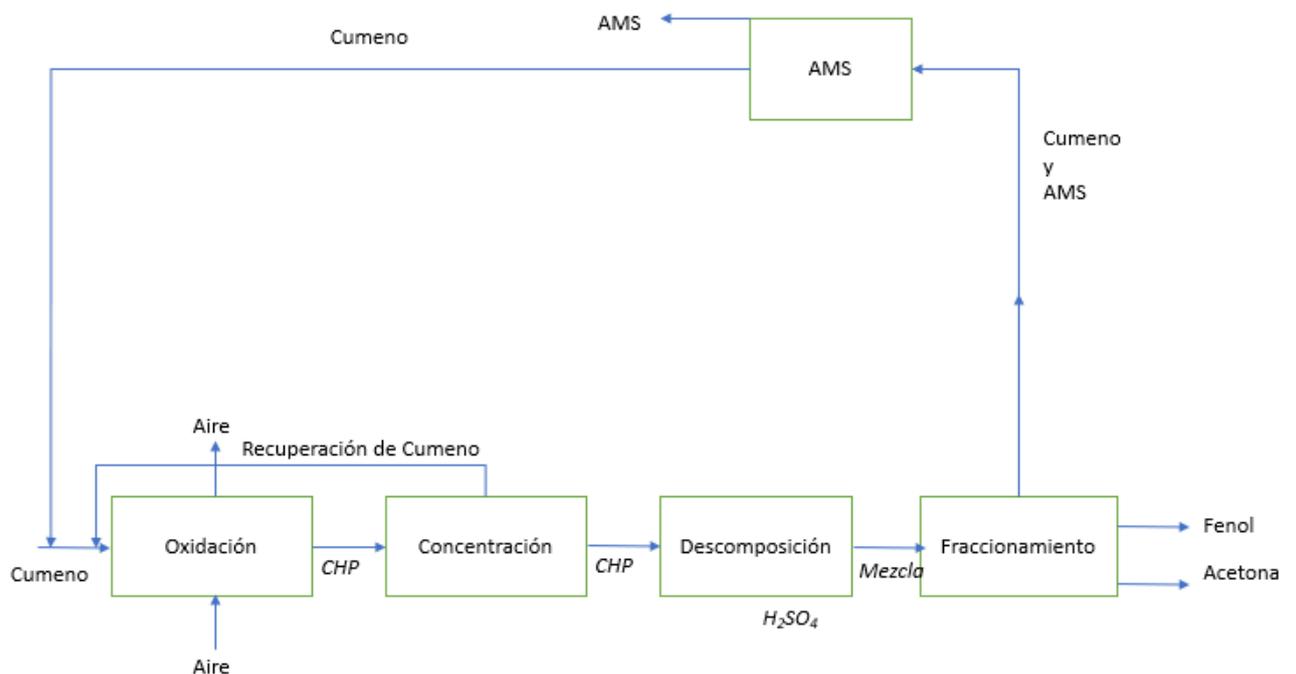


Figura 2.2 Diagrama de bloques

Unidad de Oxidación:

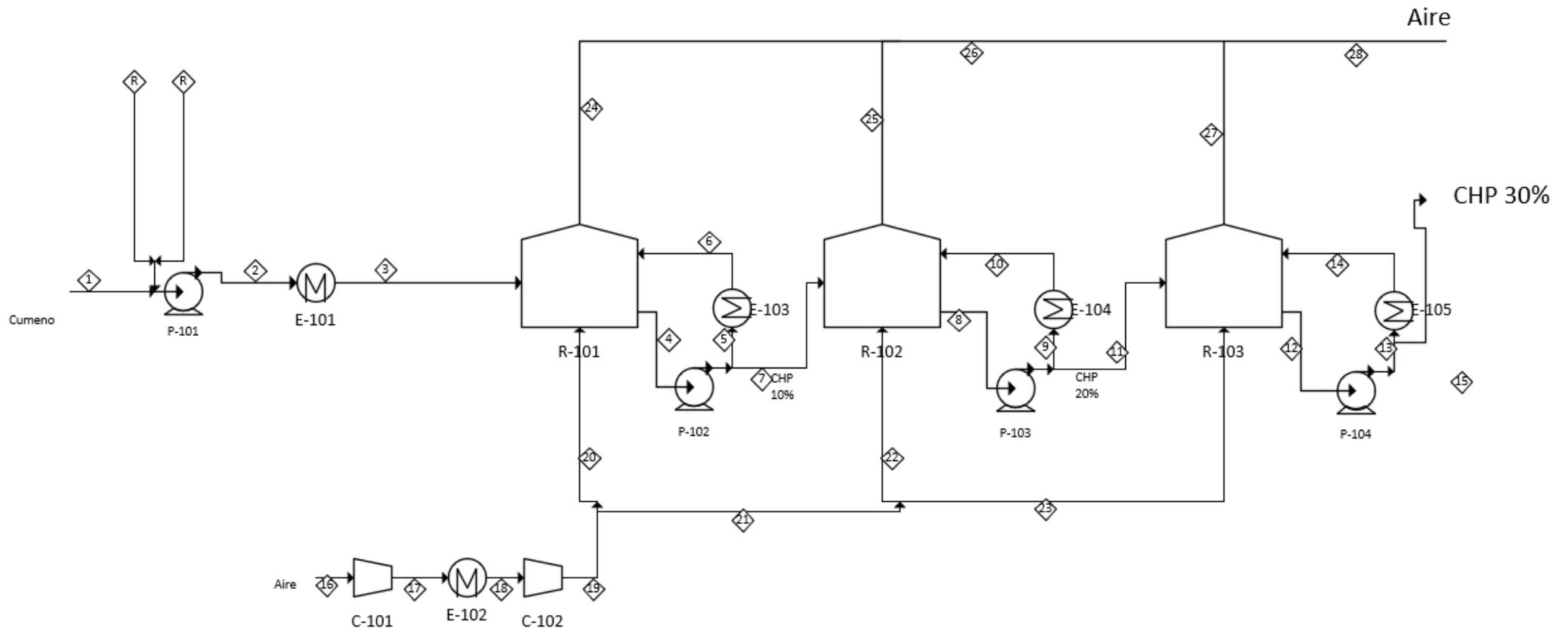


Figura 2.3 Diagrama PFD. Unidad de Oxidación

El diagrama PFD de la Unidad de Oxidación se muestra en la figura 2.3.

En este paso se oxida el cumeno para obtener CHP. El cumeno procede de una alimentación externa, así como de las dos recirculaciones provenientes de la torre de concentración y de la corriente de almacenamiento de AMS.

El proceso de oxidación se realiza a 5 bar y en un rango de temperaturas de 90 a 120 °C. De esta forma se consiguen altos rendimientos en la reacción al ser esta muy selectiva. Desde un punto de vista de la seguridad, estas dos características aportan un beneficio añadido.

Como se explica anteriormente, la conversión de cumeno a CHP que se alcanza en estas condiciones es del 30%, y la selectividad sobre la reacción principal es del 95%.

El cumeno fresco se bombea desde el tanque hasta la Unidad de Oxidación. También aquí se produce un reciclo de las corrientes de cumeno que se originan como producto en las etapas antes mencionadas.

Cabe destacar que no se diseña el tanque de almacenamiento de cumeno, ya que en el proceso original el cumeno es fabricado en una unidad anterior a esta.

El cumeno es enviado a un intercambiador, de forma que, si llegara con un exceso de temperatura de aguas arriba, este podría enfriar la corriente. En este caso, el reciclo viene a 155°C, y se ha supuesto que el cumeno procede de un tanque a 25°C. Ya que la reacción en el primer reactor se produce a 120°C, el intercambiador queda sin consumo.

El oxígeno necesario es suministrado en forma de aire por un compresor. El aire proveniente del exterior llega a 25 grados y 1 atmósfera. Se realiza un tren de compresión acorde a la figura 2.4 donde existe un intercambiador en el centro para enfriar la corriente.

Los resultados se muestran en la tabla 2-1.

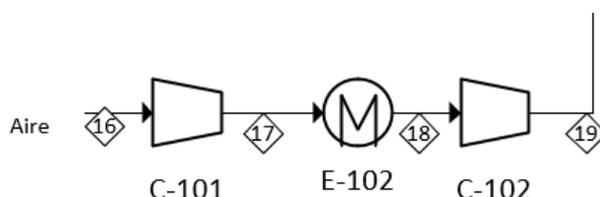


Figura 2.4 Tren de compresión del aire

Tabla 2-1 Especificaciones de corrientes de compresión

Corriente	Presión (bar)	Temperatura (°C)	m O ₂ (kmol/h)	m N ₂ (kmol/h)
16	1	25	283	1065
17	5	239,37		
18	5	23		
19	5,1	25,09		

La simulación de la línea se realiza con Aspen Plus. Se considera una eficiencia isentrópica de los compresores C-101 y C-102 de 0,8 y se desprecia la pérdida de carga en el intercambiador E-102. La cantidad de aire introducido es la estequiométrica resuelta en el balance de materia.

En este punto es importante eliminar el calor de la reacción ya que esta es altamente exotérmica ($\Delta H = -117$ kJ/mol) [5]. Se hace mediante intercambiadores externos con recirculación interna. Para saber la cantidad de producto que hay que recircular, se hacen varios balances de energía, tomando diferentes volúmenes de control. La resolución detallada se encuentra en la memoria de cálculo más adelante descrita.

Como se puede observar en el balance de materia y energía del Anexo I, los efluentes de los reactores de oxidación contienen cada vez más concentración de CHP, llegando hasta el 30% en el último.

Unidad de Concentración:

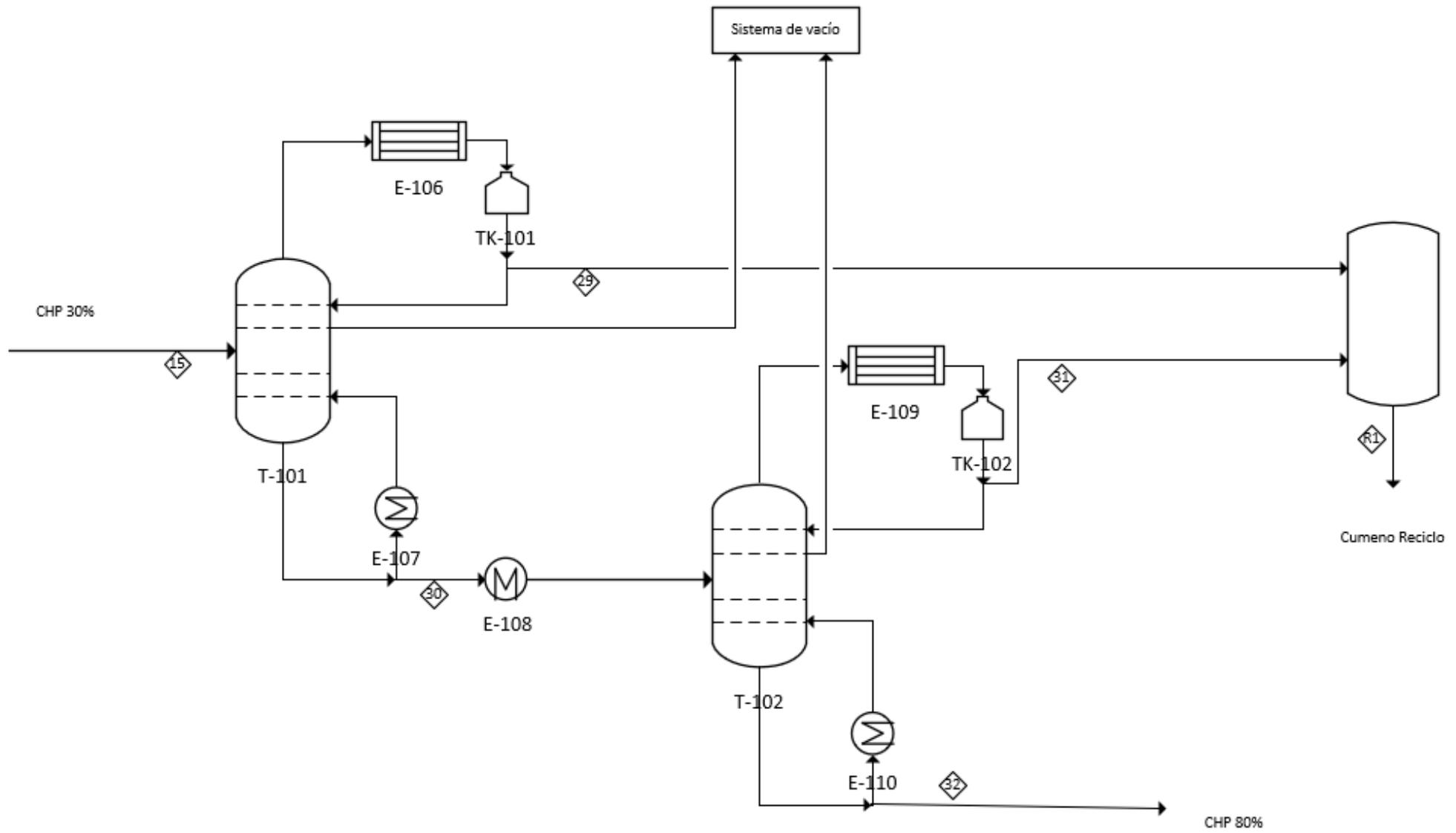


Figura 2.5 Diagrama PFD. Unidad de Concentración.

El diagrama PFD de la Unidad de Concentración se muestra en la figura 2.5.

La corriente es llevada hacia la unidad de concentración de CHP. En esta etapa, la concentración del efluente se incrementa rápida y eficientemente hasta el 80% requerido.

Para alcanzar esta cantidad de CHP concentrado, haciendo uso del balance de materia, se conoce que se debe separar 289 kmol/h de cumeno, equivalentes a 34704 kg/h. El resto de cumeno avanza con el reactivo.

Esta sección incluye la columna flash y los equipos de preparación de la alimentación. También se cuenta con una unidad de distribución de cumeno para diluir en caso de parada o emergencia de acuerdo con [18].

Las columnas preflash y flash trabajan a vacío de acuerdo con [8]. El vacío se realiza mediante eyectores de vapor, y separan el cumeno del CHP por vaporización.

La primera columna preflash se encarga de vaporizar pequeñas trazas de cumeno. Un enfriador interno colocado en el fondo de la columna minimiza la cantidad de CHP concentrado por seguridad antes de ser enviado a la columna flash.

El punto de ebullición del cumeno es de 152°C según [19]. Por tanto, para eliminar el primer 10% de cumeno sobre el total del vaporizado es necesario un aporte de energía en la unidad flash.

La segunda y última columna evapora todo el cumeno necesario para alcanzar la concentración deseada del 80%.

Los condensadores de ambas columnas son internos, por lo que se minimiza la pérdida de carga y se aporta seguridad al sistema.

El cumeno vaporizado sale por la cabeza de columna mientras que el CHP cada vez más concentrado sale por el fondo para ser recibido por los siguientes equipos.

La cantidad de cumeno que avanza con los reactivos es de 130 kmol/h, mientras que el que se recircula es de 289 kmol/h.

Unidad de Descomposición:

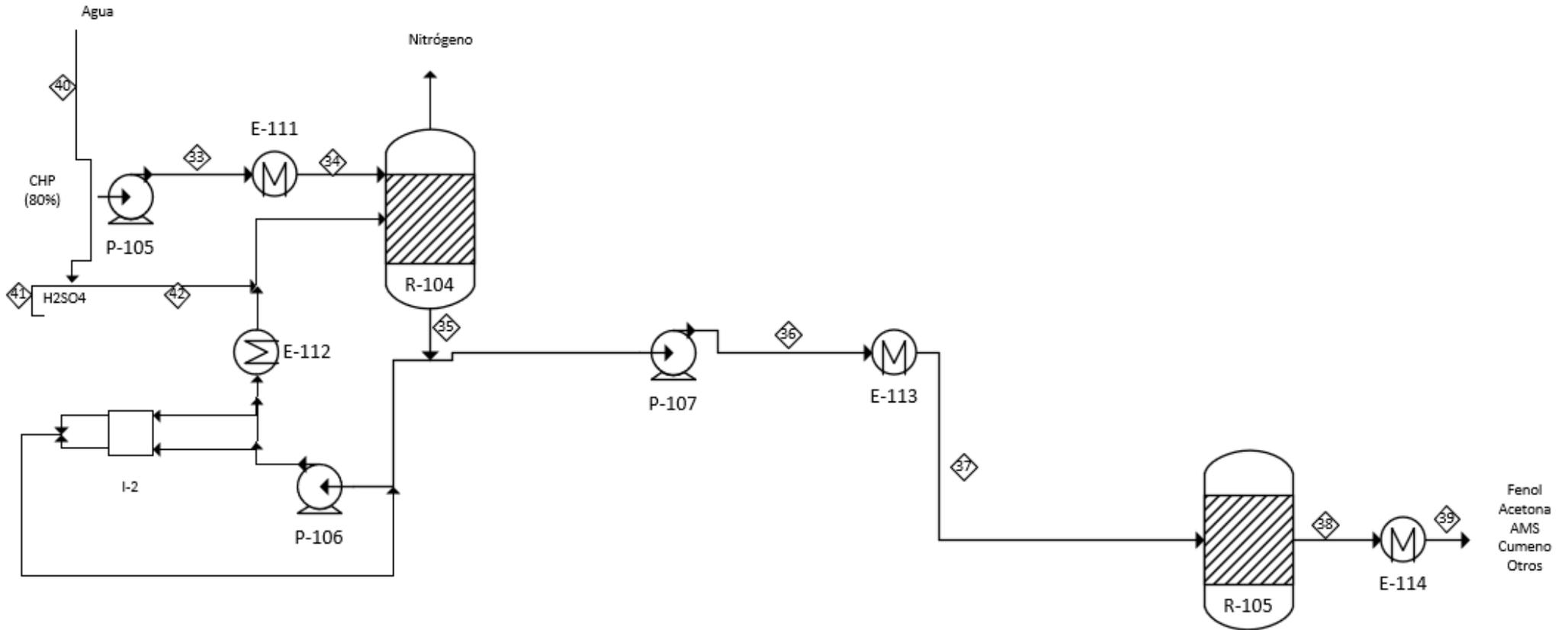


Figura 2.6 Diagrama PFD. Unidad de Descomposición.

El diagrama PFD de la Unidad de Descomposición se muestra en la figura 2.6.

El efluente de la unidad de concentración es llevado a la sección de descomposición. Aquí se realiza la escisión del CHP concentrado en fenol y acetona, así como AMS, cumeno y otros productos.

Antes de ser tratado en el reactor, se hace pasar por el intercambiador E-111 para disminuir su temperatura hasta los 25°C.

Este proceso, como se ha dicho anteriormente, se lleva a cabo con ácido sulfúrico. Este compuesto se inyecta concentrado. Sin embargo, también se añade agua al reactor de forma que el ácido quede al 2%.

Algunas de las propiedades físicas de este compuesto aparecen en la tabla 2-2 [1]:

Tabla 2-2 Propiedades físicas del Ácido sulfúrico

Nombre	Fenol
Fórmula	H ₂ SO ₄
Masa Molar	98,08 kg/kmol
Punto de fusión	10,31°C
Punto de ebullición	336,85°C
Densidad	1840 kg/m ³
Densidad relativa (aire=1)	3,4
Presión crítica	63,16 atm
Presión de vapor (20°C)	0,001 kPa
Temperatura crítica	650°C

El ácido sulfúrico se usa casi en forma exclusiva como catalizador en esta industria. El rompimiento por ácido se puede realizar de dos maneras, en proceso homogéneo o heterogéneo. En este caso se utilizará el primero, de forma que se emplea un 10% en peso de ácido sulfúrico diluido al 2%, que se eyecta directamente en el reactor. La reacción se lleva a cabo a unos 90°C con una conversión del CHP en torno al 85%.

La reacción, al igual que la de oxidación, es altamente exotérmica ($\Delta H = -252$ kJ/mol) [5]. Por ello, existe un lazo de refrigeración junto con unos sistemas de seguridad en el equipo. Estos actúan de tal forma que dejen pasar la máxima cantidad de agua de refrigeración en caso de fallo o parada. Existiría un calorímetro con un sistema de control de forma que se estableciera dicha seguridad. Aun así, dichos sistemas de control quedan fuera del alcance del proyecto.

La concentración de ácido sulfúrico en el descomponedor es otra variable que afecta a la velocidad de reacción y a los rendimientos. La influencia de este catalizador es la de donar iones H⁺ para la formación del fenol de acuerdo con [5].

El efluente del reactor de escisión es bombeado por P-107 al siguiente reactor R-105 para permitir la descomposición completa del CHP: en el reactor alcanza una conversión del 85% mientras que en este equipo se descompone por completo. Este equipo alcanza una temperatura de 125°C, por lo que es capaz de descomponer el DCP y el PDMC selectivamente a AMS. El tiempo de residencia oscila entre los 10 y 15 minutos según [20].

Se alcanza, como se muestra en el balance de materia del Anexo I, un alto rendimiento en fenol, acetona y AMS. Hay poco consumo de cumeno y baja formación de pesados (Acetofenona y metanol: TAR).

El producto es enfriado de nuevo antes de ser enviado a la unidad de cambio iónico.

Unidad de Cambio Iónico:

Antes de entrar en la unidad de fraccionamiento, es necesario decir que existe un enfriamiento en el intercambiador E-114 antes del tren de separación en el que se eliminan los residuos de ácido sulfúrico provenientes de la etapa de escisión (descomposición). El ácido sulfúrico se retira o se neutraliza para evitar la corrosión de los equipos posteriores y para impedir la catálisis ácida de la condensación de los productos de la ruptura. Se lleva a cabo en unas cámaras de intercambio iónico cargadas con resinas o bien neutralizando con hidróxido sódico.

Esta unidad no entra dentro del alcance del proyecto, por lo que se considerará como una caja negra en la que se elimina el contenido ácido del efluente proveniente de la unidad de descomposición.

Unidad de Fraccionamiento I:

Aunque más adelante se suponen separaciones perfectas, la Unidad de Fraccionamiento se explica detalladamente tal y cómo funciona la Fábrica de Cepsa Química de Palos de la Frontera, acorde a la visita que realicé para conocer el proceso que ellos desempeñan de la forma más detallada posible. CEPESA Química es la empresa con mayor producción de cumeno, y la segunda mayor productora de fenol. La fábrica de Palos de la Frontera es la 5 planta más grande en la producción de este compuesto.

Su proceso ha sido la guía para la realización del presente proyecto, con el cual se ha intentado realizar de la manera más exacta posible este documento.

La sección de fraccionamiento, en términos de Entrada-Salida, separa y purifica los dos coproductos: fenol y acetona. En el tren de columnas, se separan también las distintas trazas de otros compuestos que se acumulan en el proceso. Se separa, por tanto, el cumeno y AMS que son reciclados a la sección de oxidación o hidrogenación. También son separados otra cantidad de pesados (TAR) que se forman en el reactor de escisión.

El fenol es purificado haciendo reaccionar los carbonilos a compuestos de distintos puntos de ebullición, para más tarde separarlos en una columna de destilación.

El proceso se lleva a cabo mediante un tren de columnas de destilación en serie. Se utilizan seis columnas.

Este tren de destilación se divide en dos etapas:

1. Fraccionamiento de la Acetona: se realiza la separación entre la acetona terminada y el fenol crudo.
2. Fraccionamiento del Fenol: se purifica el compuesto separándolo de los subproductos que se forman y arrastran del proceso.

El cumeno estará presente tanto en la extracción de cabeza como en la de fondo.

El diagrama PFD de esta Unidad de Fraccionamiento se muestra en la figura 2.7.

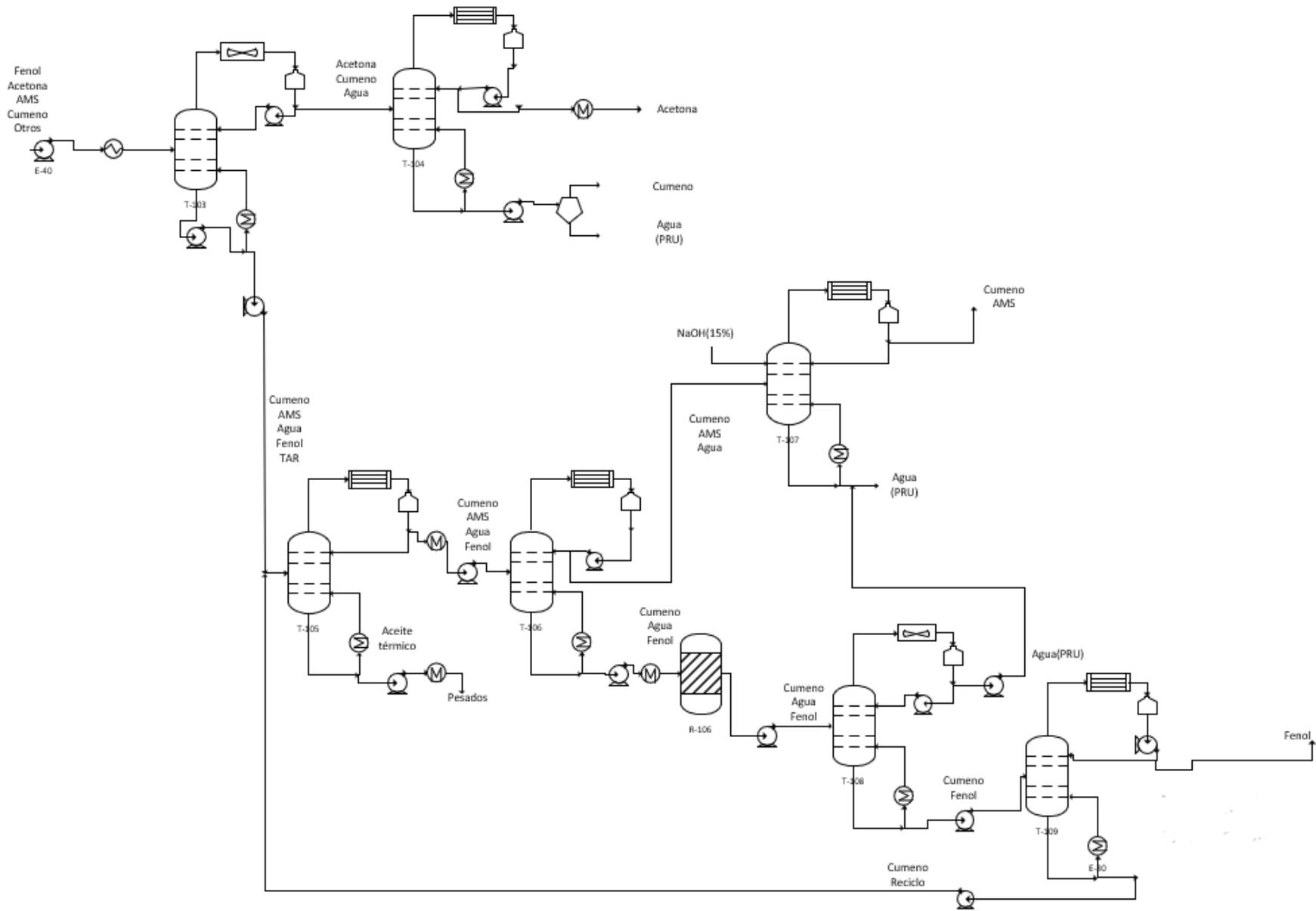


Figura 2.7 Diagrama PFD. Unidad de Fraccionamiento I

Fraccionamiento de la Acetona:

El diagrama PFD de esta sección es el de la figura 2.8.

El objetivo de la columna T-103 es separar por cabeza toda la acetona posible y por fondos el resto de los componentes que forman la mezcla de salida de la sección anterior.

El efluente proveniente de la unidad de cambio iónico se encuentra con la primera columna de destilación, que como se ha dicho anteriormente separa la acetona terminada y el fenol crudo. La primera sale por la cabeza mientras que el resto de los componentes salen por cola.

Una vez se tiene la mezcla de acetona con cumeno, se pasa a otra columna de destilación T-104 en la que separaremos la acetona finalizada por la cabeza y una mezcla de cumeno y agua por el fondo, que es reconducida a un sistema para separar el cumeno del agua. El primero es llevado a la sección de recuperación de fenol mientras que el agua es llevada al sistema de recuperación de efluentes.

La acetona es enfriada antes de su almacenamiento.

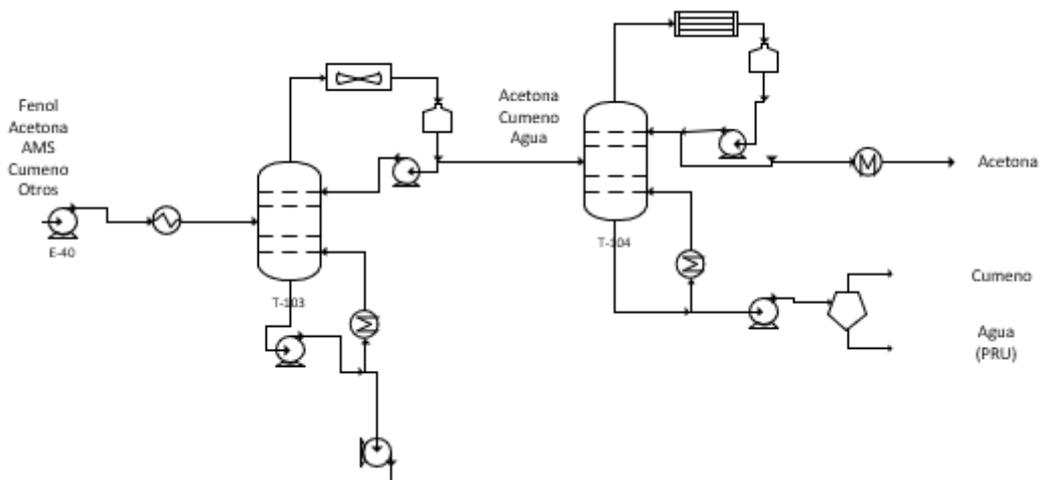


Figura 2.8 Columna de Acetona

Fraccionamiento del fenol:

En este caso, tal como se muestra en la figura 2.9, se parte del efluente proveniente de la unidad de cambio iónico que sale por el fondo de la primera columna de destilación del primer fraccionamiento.

Dicho efluente se encuentra con una columna de alquitrán T-105 que está diseñada para eliminar los productos pesados libres de acetona, que salen por el fondo. Desde la cabeza sale un efluente que se envía a la columna de AMS T-106.

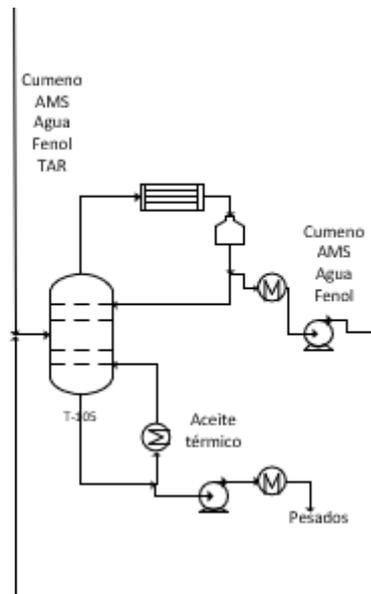


Figura 2.9 Columna de Alquitranes

En este momento se tiene una mezcla de AMS con cumeno y fenol. El primer objetivo es separar el cumeno y AMS del fenol. De esta manera y en una primera destilación sale el producto principal por el fondo que es enviado al reactor de tratamiento R-106 donde es purificado, como se muestra en la figura 2.10.

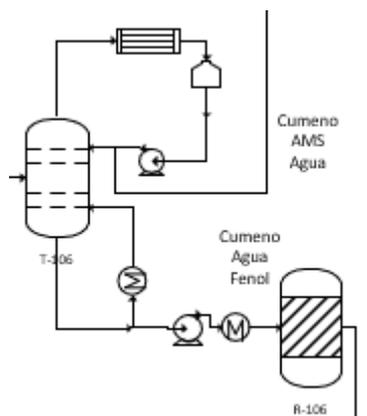


Figura 2.10 Pretratamiento para el Reactor R-106

El efluente del destilado se lleva a otra columna T-107 en la que se separa el cumeno y el AMS del agua, tal como aparece en la figura 2.11.

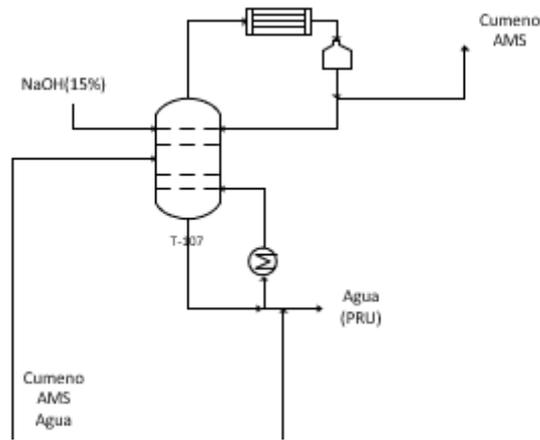


Figura 2.11 Columna de AMS

Por cola de la columna T-106, una vez sale el fenol del reactor, es enviado a la columna de fenol T-108. Esta columna tiene como objetivo principal la eliminación del 2-metilbenzofurano, 2-MBF del fenol y otros componentes residuales como pueden ser restos de agua, cumeno o acetona.

El fondo de esta columna, ya con una pureza del 99.9% en fenol, es enviado a la columna rectificadora T-109, en donde se reciclan los últimos contenidos en ligeros hacia la columna de alquitrán [8]. Esta última sección se muestra en la figura 2.12.

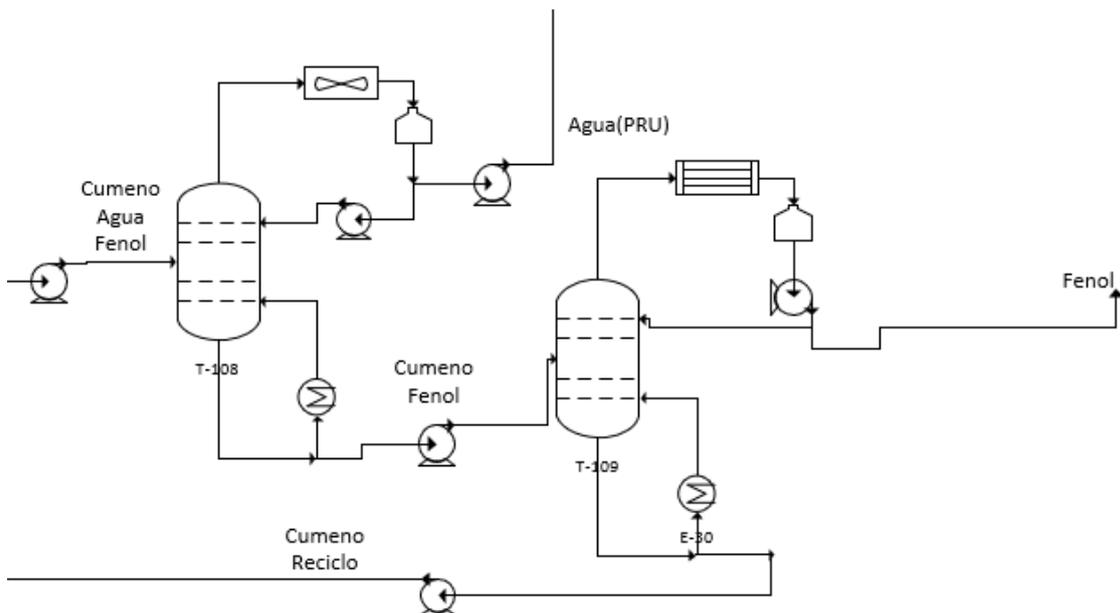


Figura 2.12 Columnas Terminadoras de Fenol

Unidad de Fraccionamiento II:

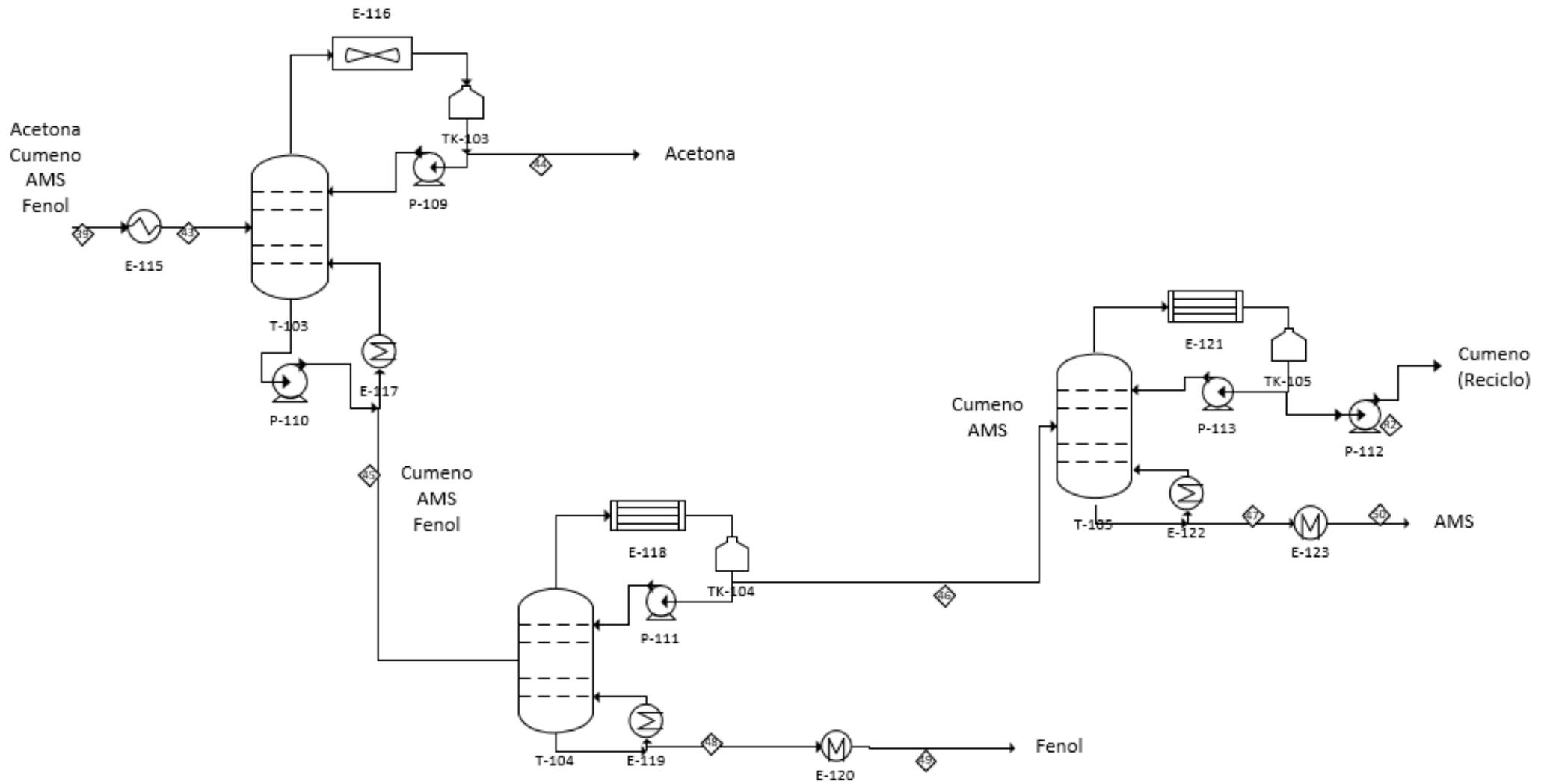


Figura 2.13 Diagrama PFD. Unidad de Fraccionamiento II.

Como se ha dicho anteriormente, las separaciones se consideran perfectas. Por tanto, y a la hora de realizar el balance, el tren de columnas finalmente quedaría como se indica en la Figura 2.13.

El efluente de la Unidad de Intercambio Iónico es calentado hasta 60°C y enviado a la columna de acetona cruda T-103.

En esta primera columna se separa la acetona por cabeza y el resto de los componentes por colas.

Esta columna tendrá una temperatura en cabeza en torno a 40-60°C, mientras que en fondo oscilará entre 40-110°C. Dichas temperaturas permiten la separación entre los componentes.

En la segunda columna T-104 se separa el cumeno y el AMS del fenol. Esta columna tendrá una temperatura en cabeza en torno a 40-170°C, mientras que en fondo oscilará entre 110-180°C. Dichas temperaturas permiten la separación entre los componentes.

Unidad de AMS:

Aunque en el proceso real la mezcla de cumeno y AMS es enviada a la unidad de hidrogenación, en este proyecto se separará dicha mezcla en una columna para, posteriormente, almacenar el AMS y recircular el cumeno, tal como se muestra en la figura 2.14.

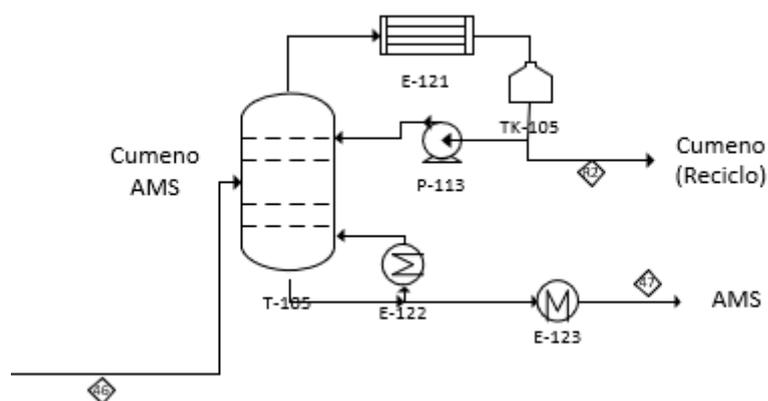


Figura 2.14 Columna de AMS

En cabeza existe una temperatura de 155°C, mientras que en el fondo será de 165°C. El AMS es enfriado con E-123 para su almacenamiento.

3 Memoria de cálculo

Esta memoria de cálculo incluye el balance de materia y energía de toda la instalación. Por tanto, las corrientes del proceso son especificadas en el Anexo I de este documento.

La instalación está diseñada para la producción de 100 kt de fenol anuales, equivalentes a 62 kt de acetona. La planta opera 8000 horas al año.

En el Anexo I se muestra la temperatura, presión, composición y caudal de cada corriente. Los cálculos se han realizado simultáneamente en EES (Engineering Equation Solver) y Microsoft Excel.

3.1 Equipos de Intercambio de energía mecánica

Los equipos de intercambio de energía mecánica presentes en este proyecto serán las bombas y los compresores. Las pérdidas de carga que tendrán que vencer serán los correspondientes a los equipos del proceso, despreciando las equivalentes a las líneas ya que no se ha realizado una implantación.

3.1.1 Bombas

Las bombas se definen los siguientes parámetros fundamentales: caudal, potencia consumida, altura que son capaces de dar al fluido y rendimiento.

El caudal volumétrico será el resultado de la siguiente expresión:

$$Q = \frac{\dot{m}}{\rho} \quad (3.1)$$

Donde \dot{m} es caudal másico en kg/s y ρ la densidad del fluido.

Para calcular la altura de la bomba se emplea la ecuación de Bernouilli:

$$Hb = \frac{(P_{out}-P_{in})}{\rho} + \frac{v_{out}^2-v_{in}^2}{2} \quad (3.2)$$

Siendo:

- Hb = altura de la bomba expresado en m^2/s^2 . Se divide entre el valor de la gravedad para obtener el resultado en metros.
- P_{in} = presión de aspiración en Pascales.
- P_{out} = presión de impulsión en Pascales.
- v_{in} = Velocidad del fluido en la zona de aspiración.
- v_{out} = Velocidad del fluido en la zona de impulsión.

La velocidad de aspiración y de impulsión se supondrán 1 y 2 m/s respectivamente de acuerdo con [22].

Para calcular la potencia se usa la siguiente expresión:

$$W = \rho * g * Q * H_b \quad (3.3)$$

Donde la potencia real viene dada por el cociente entre la potencia ideal y el rendimiento dado por el fabricante:

$$W_{real} = \frac{W}{\eta} \quad (3.4)$$

Los detalles de las bombas calculadas se muestran en la tabla 3-1.

Tabla 3-1 Caracterización de las Bombas

Bomba	Caudal (m ³ /h)	Altura (m)	Potencia (kW)	Modelo
P-101	98	50,42	10,92	NBE 50-250/222 AF2ABQQE
P-102	127,7	6,25	1,81	NBE 80-200/164 AF2ABQQE
P-103	112,9	6,13	1,61	NBE 80-200/164 AF2ABQQE
P-104	97,6	6,03	1,38	NBE 80-200/164 AF2ABQQE
P-105	25,6	79,62	5,35	NBE 32-250/262 AF2ABQQE
P-107	31,1	5,7	0,44	NBE 80-200/164 AF2ABQQE
P-112	2,2	6,43	0,03	NBE 32- 160.1/177 AF2ABQQE

Los cálculos se han realizado en el Software EES.

3.1.2 Compresores

Para calcular la potencia consumida por los compresores se utilizará la siguiente expresión:

$$W = F(H_{out} - H_{in}) \quad (3.5)$$

Donde:

- W: Potencia consumida por el compresor (kW).
- F: Caudal másico (kg/s).
- H: entalpía de la corriente

Para conocer la entalpía de una corriente esta debe estar completamente especificada. Para ello se debe saber la temperatura y la presión. La corriente de aire entra a temperatura ambiente a 25 grados y 1 bar. En este caso, se ha realizado una simulación en Aspen suponiendo una eficiencia isentrópica igual a 0,8 [23]. De esta forma, se consigue la temperatura intermedia y con ella la potencia necesaria para la impulsión del aire a 5 bar y 25 grados.

Para los compresores C-101 y C-102, las potencias resultan ser las siguientes:

- W C-101: 1110 kW.
- W C-102: 10,74 kW.

3.2 Equipos de Intercambio de calor

3.2.1 Intercambiadores de calor

Se realiza el cálculo y diseño de los intercambiadores que se muestran en la Tabla 3-2:

Tabla 3-2 Lista de Intercambiadores a diseñar

Intercambiador	Corriente
E-102	17/18
E-103	5/6
E-104	9/10
E-105	13/14
E-111	33/34
E-113	36/37
E-114	38/39
E-115	39/43
E-120	48/49
E-123	47/50

Para ello, se va a seguir la siguiente metodología:

- Calcular la potencia transferida (kW).
- Calcular los saltos de temperatura y con ello el DTLM.
- Calcular la U de transferencia.
- Calcular el área requerida.

3.2.1.1 Caracterización de las corrientes

En primer lugar, se deben definir las corrientes implicadas en la refrigeración de los reactores de oxidación y de escisión.

Para calcular la potencia transferida de los intercambiadores E-103, E-104 y E-105, hay que saber la cantidad de producto que se va a recircular. Por tanto, se realizan varios balances de energía, tomando diferentes volúmenes de control.

Para conseguir la cantidad de agua de refrigeración necesaria, se realiza el siguiente balance de energía correspondiente al volumen de control de la figura 3.1:

$$H_{entrada} = H_{salida} \quad (3.6)$$

De tal forma que:

$$H_i = \sum F_i(\Delta H_f^0 + cp_{medio}(T_i - T_{ref})) \quad (3.7)$$

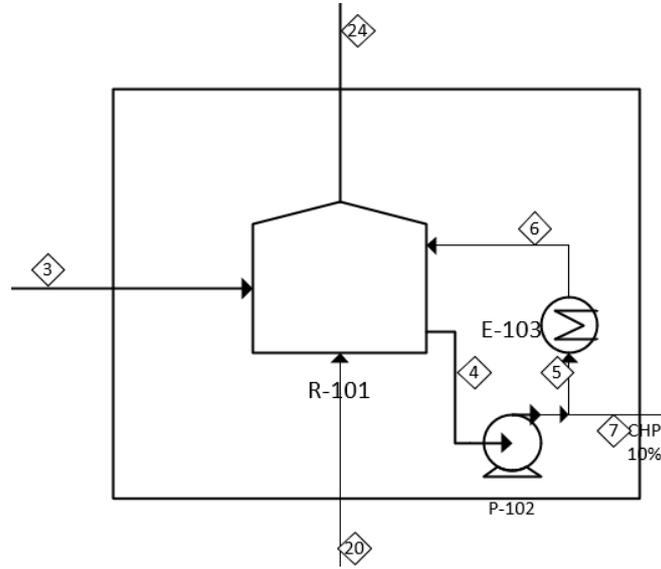


Figura 3.1 Volumen de Control R-101

Por lo tanto,

$$H_3 + H_{20} + H_{cw} = H_{24} + H_7 + H_{cw} \quad (3.8)$$

Siendo:

$$H_3 = F_{cum_3}(\Delta H_f^0_{cum} + cp_{medio}(T_{ent} - T_{ref})) \quad (3.9)$$

$$H_{20} = F_{O_2}(\Delta H_f^0_{O_2} + cp_{medio}(T_{ent_{O_2}} - T_{ref})) \quad (3.10)$$

$$H_{cw} = F_{H_2O}(\Delta H_f^0_{H_2O} + cp_{medio}(T_{cw_{ent}} - T_{ref})) \quad (3.11)$$

$$H_{24} = F_{O_2}(\Delta H_f^0_{O_2} + cp_{medio}(T_{sal} - T_{ref})) \quad (3.12)$$

$$H_7 = F_{cum_7}(\Delta H_f^0_{cum} + cp_{medio}(T_{sal} - T_{ref})) + F_{CHP}(\Delta H_f^0_{CHP} + cp_{medio}(T_{sal} - T_{ref})) + F_{PDMC}(\Delta H_f^0_{PDMC} + cp_{medio}(T_{sal} - T_{ref})) \quad (3.13)$$

$$H_{cw} = F_{H_2O}(\Delta H_f^0_{H_2O} + cp_{medio}(T_{cw_{sal}} - T_{ref})) \quad (3.14)$$

Las entalpías de formación de los compuestos se muestran en la siguiente tabla 3-3 [19]:

Tabla 3-3 Entalpías de formación a 25°C y 1 bar

Compuesto	ΔH^0_f (kJ/kmol)
Cumeno	-41230
Oxígeno	0
Agua	-285840
CHP	-149000
PDMC	-54900

Los poderes caloríficos son los mostrados en la tabla 3-4 [19]:

Tabla 3-4 Poderes caloríficos

Compuesto	C_p (kJ/kmol K)
Cumeno	235
Oxígeno	29,6
Agua	78,5
CHP	210
PDMC	234

Las temperaturas, que también aparecen en el balance de materia y energía global, son las que aparecen en la tabla 3-5 en grados centígrados:

Tabla 3-5 Distribución de Temperaturas

T_{ref}	25
T_{ent}	120
$T_{ent_{O_2}}$	25
T_{sal}	120
$T_{cw_{ent}}$	25
$T_{cw_{sal}}$	80

De esta forma, e imponiendo una temperatura de entrada y salida para el fluido refrigerante, se tendrá un solo grado de libertad, de tal forma que se calcule el caudal refrigerante F_{H_2O} para esas condiciones. Para los cálculos se utiliza el programa EES.

$$F_{H_2O} = 1459 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 26.262 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

Una vez se consigue el caudal de refrigerante, se hace uso de otro volumen de control para calcular o bien la temperatura de salida del intercambiador E-103 o bien el caudal que se recircula. En este caso, se impone el caudal de reciclo, teniendo los siguientes datos y el volumen de control mostrado en la figura 3.2:

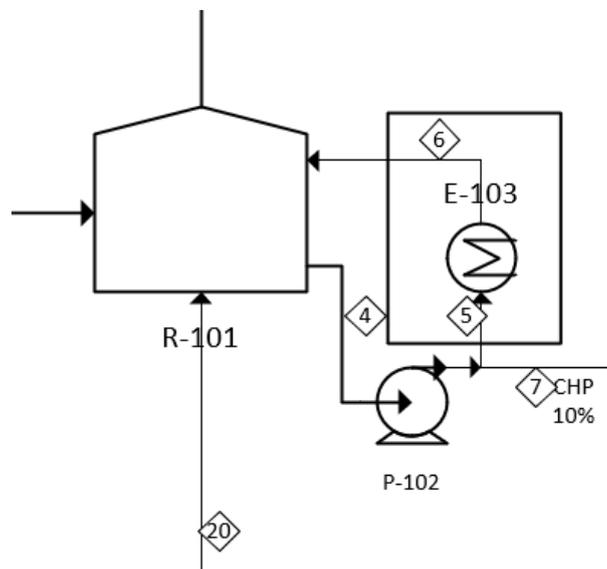


Figura 3.2 Volumen de Control Intercambiador E-103

Se tiene el siguiente balance:

$$Q_{int} = m_{cw} C p_{cw} (T_{cw_{ent}} - T_{cw_{sal}}) = m_{reciclo} C p_{medio} (T_6 - T_5) \quad (3.15)$$

Se impone el caudal de reciclo, igual a 300 kmol/h y siendo su composición el resultado de multiplicar dicho caudal por las fracciones molares de la corriente 4. Se hace lo mismo para calcular el Cp medio. La temperatura de entrada al intercambiador (T_5) es la misma que la de salida del reactor T_5 igual a 120°C.

De esta forma, se obtiene una temperatura $T_6=30,16^\circ\text{C}$.

Para el oxidador R-102 y R-103 se sigue la misma metodología. Sin embargo, como se muestra en el balance de materia del Anexo I, las composiciones de las corrientes al igual que las temperaturas son distintas. Fijándonos en la Figura 3.3 y Figura 3.4:

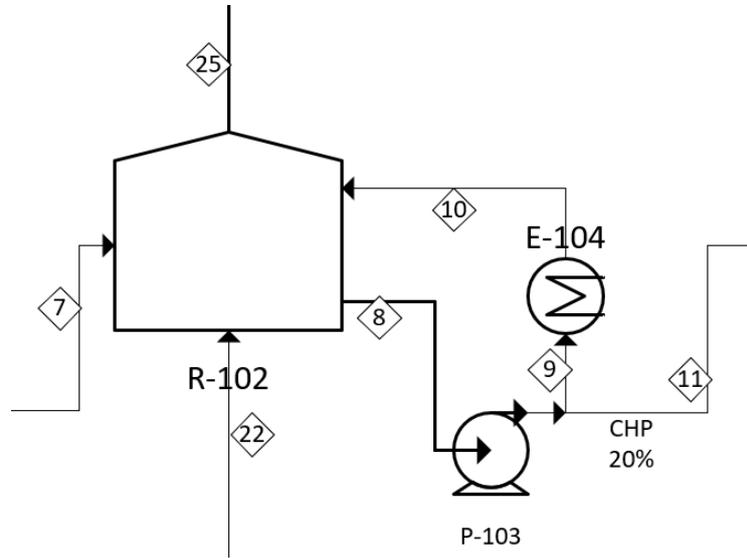


Figura 3.3 Diagrama PFD reactor R-102

$$F_{H_2O} = 933,7 \frac{kmol}{h} = 16806 \frac{kg}{h}$$

$$T_{10} = 49,2 \text{ } ^\circ C$$

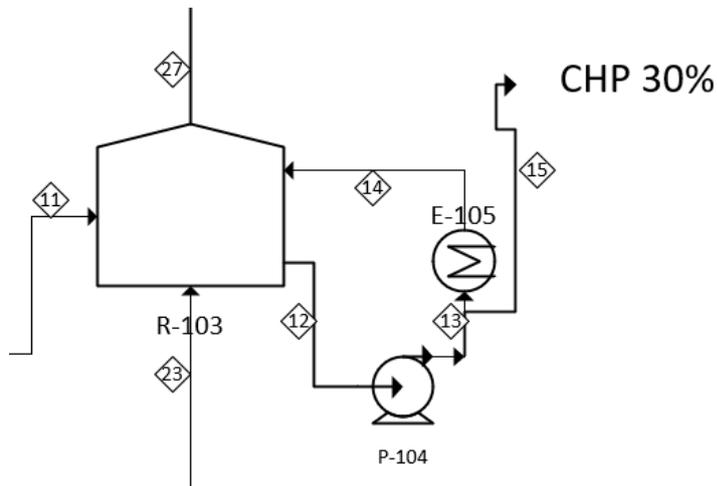


Figura 3.4 Diagrama PFD reactor R-103

$$F_{H_2O} = 254,7 \frac{kmol}{h} = 4584,6 \frac{kg}{h}$$

$$T_{10} = 74,56 \text{ } ^\circ C$$

De la misma forma que se ha calculado el lazo de refrigeración para los reactores de oxidación R-101, R-102 y R-103, se establece un volumen de control que permita calcular el caudal de refrigeración del intercambiador que se necesita en el lazo del reactor R-104. Los cálculos se hacen con el software EES. El balance es el siguiente referido a la figura 3.5.

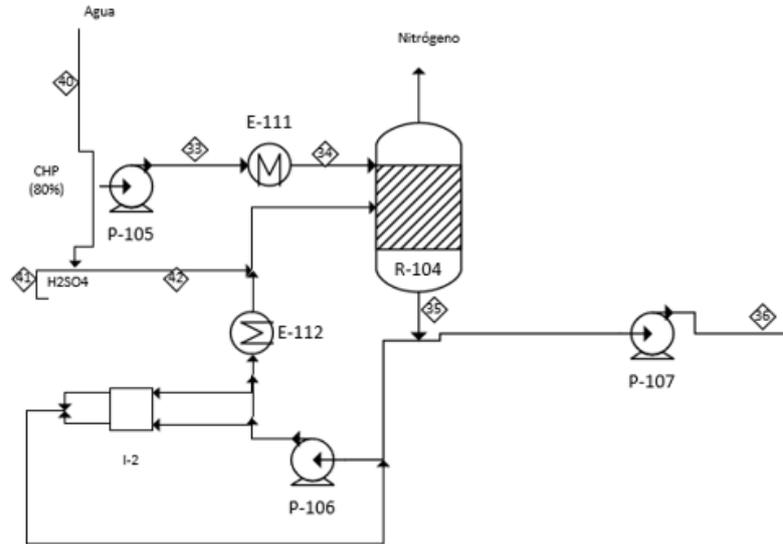


Figura 3.5 Diagrama PFD reactor R-104

$$H_{entrada} = H_{salida} \quad (3.16)$$

$$H_{34} + H_{H_2SO_4} + H_{cw_{ent}} = H_{36} + H_{cw_{sal}} \quad (3.17)$$

- Para H_{34} se tienen en cuenta todos los compuestos que forman la corriente: cumeno, CHP y PDMC.
- Para $H_{H_2SO_4}$ se tiene en cuenta la composición en peso antes mencionada, siendo el 10% de la corriente y con un 2% de ácido diluido:

$$F_{H_2SO_4} = 77,04 \text{ kg/h}$$

$$F_{H_2O} = 3775,06 \text{ kg/h}$$

- Para H_{36} se tienen en cuenta todos los compuestos que forman la corriente: cumeno, CHP, fenol, acetona, agua, AMS, DCP y H_2SO_4 diluido.

El grueso de las fórmulas queda explicado para el reactor de oxidación, por lo que no se vuelven a mostrar. Los datos de entalpías, así como de los poderes caloríficos han sido sacados de [19] y [21].

Finalmente, se obtiene el caudal de agua de refrigeración necesario:

$$F_{cw} = 10.252 \frac{kmol}{h} = 184.536 \frac{kg}{h}$$

La temperatura de entrada y salida del fluido refrigerante son 25 y 50°C respectivamente.

Se observa que el caudal de agua refrigerante sería demasiado elevado, siendo 51,26 kg/s. Es por ello por lo que no se diseña el intercambiador E-112, dando por sentado que existe otro lazo de refrigeración en el reactor para la industria.

Un dato desfasado cambiaría los datos económicos que se detallan más adelante.

3.2.1.2 Diseño de los intercambiadores

Las ecuaciones de diseño se muestran a continuación.

$$P(kW) = m * Cp * (\Delta T) \quad (3.18)$$

Siendo:

- m: Caudal de la corriente en kg/s
- Cp: Poder calorífico en kJ/kg K

$$DTLM = \frac{(\Delta T_{ent} - \Delta T_{sal})}{\ln\left(\frac{\Delta T_{ent}}{\Delta T_{sal}}\right)} \quad (3.19)$$

$$U = \frac{1}{A_e \left(\frac{1}{h_i A_i} + \frac{f_{si}}{A_i} + \frac{1}{h_e A_e} + \frac{f_{se}}{A_e} \right)} \quad (3.20)$$

Siendo

- $\frac{A_e}{A_i} = \frac{D_e}{D_i}$
- U es el coeficiente global de transferencia medido en kW/m²K
- h_e y h_i son los coeficientes de película de los fluidos que van por el exterior y el interior del intercambiador, respectivamente.
- A_e y A_i son el área exterior e interior de los tubos.
- F_{si} y F_{se} son los factores de ensuciamiento interior y exterior (m²K/W). El valor se supondrá 0,0002 de acuerdo con los valores medios vistos en clase.

Siendo D_e y D_i el diámetro exterior e interior de los tubos, cuyo cociente se ha elegido en función de [24].

H_e y h_i se calculan mediante la siguiente expresión:

$$h = Nu * \frac{k}{L} \quad (3.21)$$

Donde L es la longitud característica que en este caso es el diámetro interior, k la conductividad térmica de los fluidos medido en W/m*K y Un el número adimensional Nusselt que se calcula por medio de correlaciones. A su vez, depende de otros dos parámetros, Reynolds y Prandtl, que se definen como:

$$Re = \frac{\rho \cdot v \cdot L}{\mu} \quad (3.22)$$

$$Pr = \frac{c_p \cdot \mu}{K} \quad (3.23)$$

Siendo:

- v: velocidad del fluido (m/s)
- μ : viscosidad dinámica del fluido(m²/s)
- K: conductividad térmica (W/mK)

Por último, se relaciona la potencia con el área de transferencia, donde se utiliza un factor de corrección F que en este caso es igual a la unidad.

$$Q = F \cdot A \cdot U \cdot DTLM \quad (3.24)$$

Una vez se conocen las ecuaciones, se pueden diseñar los intercambiadores. Dicho diseño se muestra en la tabla 3-6.

Tabla 3-6 Caracterización de los Intercambiadores

Intercambiador	Corriente	Potencia (kW)	U(kW/m²K)	A (m²)
E-102	17/18	1121	0,54	46,17
E-103	5/6	1750	0,97	105,1
E-104	9/10	704,5	0,97	21,48
E-105	13/14	192,2	0,97	5,042
E-111	33/34	1328	0,97	37,28
E-113	36/37	714,6	0,54	58,12
E-114	38/39	1726	0,97	66,84
E-115	39/43	604	0,54	13,38
E-120	48/49	661	0,97	29,87
E-123	47/50	87,84	0,97	5,9

Por último, hay que destacar que no se considera pérdida de carga en estos equipos.

3.3 Reactores

3.3.1 Oxidación

Para el diseño de los reactores, al no conocerse la cinética exacta del conjunto de reacciones, se hace mediante un análisis de tiempo de residencia y de caudal a tratar en el reactor. Además, como se explica anteriormente, se han considerado unas condiciones concretas para cada uno, optimizando la conversión y la selectividad en cada uno de ellos.

Por tanto, la primera unidad que hay que diseñar es la de oxidación. Aquí se encuentran tres reactores R-101, R-102 y R-103 que se encargan de oxidar el cumeno.

El tiempo de residencia para las condiciones buscadas son de 4 a 6 horas según [15] y [16] para un único reactor. Teniendo en cuenta que se tienen 3 equipos para no tener un volumen demasiado grande, se tomará un valor de 2 horas en cada uno. De esta forma, como se explica en la memoria descriptiva, se alcanzarán concentraciones de CHP crecientes del 10%, 20% y 30% respectivamente.

$$V = t_{res} * Q_{tratado} \quad (3.25)$$

En cuanto a la temperatura en el interior de las reacciones, se considera isoterma debido al lazo de refrigeración del reciclo.

La presión dentro de los reactores es de 5 bar. La pérdida de carga se considera 0,5 bar en cada uno, incrementándose a la salida debido a las bombas P-102, P-103 y P-104.

Como se detalla en apartados anteriores, la selectividad de la reacción principal es del 95%, y la concentración de CHP a la salida de cada reactor se incrementa en un 10%, alcanzando el 30% requerido a la salida del último.

La conversión en cada reactor, al ser la selectividad cercana al 100%, oscila entre el 10-12% en cada uno.

El consumo de cada reactor es el equivalente al lazo de refrigeración del mismo para mantener la temperatura constante.

El material, debido a que no tenemos elementos corrosivos, será de acero al carbono, en lugar de acero inoxidable.

Algunas de las características se muestran en la tabla 3-7:

Tabla 3-7 Caracterización de los Reactores de Oxidación

Reactor	Q (m ³ /h)	Composición	V (m ³)
R-101	127,7	Cumeno+CHP+PDMC	255,4
R-102	112,9	Cumeno+CHP+PDMC	225,8
R-103	97,6	Cumeno+CHP+PDMC	195,4

3.3.2 Escisión

Para el Reactor de Escisión R-104 CSTR y para el R-105 en condiciones de FPR se seguirá la misma metodología. El tiempo de residencia oscila entre 30-120 minutos para el primero y 10-15 minutos para el segundo.

La temperatura dentro del reactor se mantiene en 90°C gracias al lazo de refrigeración diseñado, mientras que en el segundo se acondiciona para 125°C.

La presión es de 8 bar y se considera una pérdida de carga de 0,5 bar en cada uno de los reactores.

Algunas de las características se muestran en la tabla 3-8:

Tabla 3-8 Caracterización de los Reactores de Escisión

Reactor	Q (m³/h)	Composición	V (m³)
R-104	31,1	Cumeno+CHP+PDMC+DCP+H ₂ SO ₄ +Fenol+Acetona+AMS+H ₂ O	46,6
R-105	31,1	Cumeno+CHP+PDMC+DCP+H ₂ SO ₄ +Fenol+Acetona+AMS+H ₂ O	7,8

3.4 Equipos de separación

3.4.1 Equipos Flash

En la unidad de concentración existen dos equipos flash T-101 y T-102. Estos se encargan de separar el cumeno necesario para alcanzar concentraciones de 80% de CHP en la línea.

La primera columna preflash se encarga de vaporizar pequeñas trazas de cumeno. Un enfriador interno colocado en el fondo de la columna minimiza la cantidad de CHP concentrado por seguridad antes de ser enviado a la columna flash.

El punto de ebullición del cumeno es de 152°C según [19]. Por tanto, para eliminar el primer 10% de cumeno sobre el total del vaporizado es necesario un aporte de energía en la unidad flash. Para ello, se utilizará la siguiente expresión:

$$Q_{preflash} = m_{cumeno} C_{p_{cumeno}} (T_{eb} - T_{entrada}) + m_{cumeno} \lambda \quad (3.26)$$

Siendo:

- λ = Entalpía de vaporización del cumeno = 37100 kJ/kmol
- m_{cumeno} = 10% de 289 = 28,9 kmol/h

$$Q_{preflash} = 412,8 \text{ kW}$$

La segunda y última columna evapora todo el cumeno necesario para alcanzar la concentración deseada del 80%.

En este caso, y suponiendo que no se tienen pérdidas de temperatura en la corriente:

$$Q_{flash} = m_{cumeno} \lambda \quad (3.27)$$

Siendo:

- λ = Entalpía de vaporización del cumeno = 37100 kJ/kmol
- m_{cumeno} = 90% de 289 = 260,1 kmol/h

$$Q_{flash} = 2680 \text{ kW}$$

Para el dimensionamiento del equipo, se ha de tener en cuenta [25]:

$$D_v = \sqrt{\frac{4 \cdot Q_g}{\pi \cdot u_t}} \quad (3.28)$$

Donde:

- D_v : Diámetro mínimo del flash (m).
- Q_g : Caudal volumétrico del flash (m^3/s)
- U_t : velocidad de asentamiento de gotas líquidas (m/s), que viene definido como:

$$u_t = 0,07 * \left(\frac{\rho_L - \rho_g}{\rho_g} \right)^{0,5} \quad (3.29)$$

- P_L : Densidad del líquido (kg/m^3).
- P_g : Densidad del gas (kg/m^3).

Siguiendo el esquema de la figura 3.6, y sabiendo que el tiempo de residencia en la primera columna es menor a cinco minutos y en la segunda de 15 minutos, se podrán diseñar las columnas [25]:

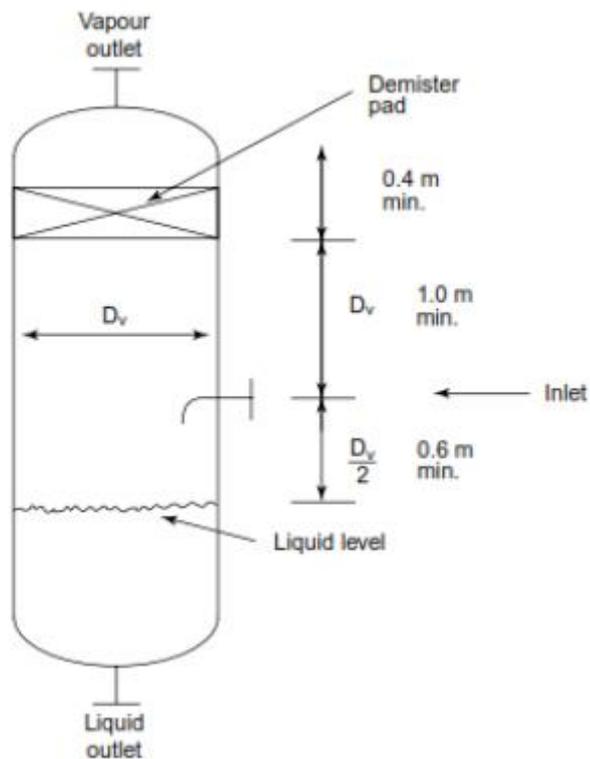


Figura 3.6 Esquema de diseño Flash

La altura del líquido dependerá del tiempo de residencia, por tanto, del caudal de líquido, de la densidad y del diámetro del cilindro.

Los resultados de ambos equipos se muestran en la tabla 3-9:

Tabla 3-9 Caracterización de los equipos Flash

Equipo	$Q_g(\text{m}^3/\text{s})$	$P_L(\text{kg}/\text{m}^3)$	$P_g(\text{kg}/\text{m}^3)$	$U_t(\text{m}/\text{s})$	$D_v(\text{m})$	Altura gas (m)	Altura líquido (m)	Volumen (m^3)
T-101	0,201	871,2	4,8	0,94	0,52	2	5	1,49
T-102	1,8	963,0	4,8	0,98	1,52	2	3,51	10,04

Los cálculos referidos a los equipos preflash y flash se han hecho con el software EES.

3.4.2 Columnas de destilación

El diseño detallado de las columnas de destilación es muy complejo, ya que existen multitud de variables que afectan al sistema. Por ello, para la simplificación de los cálculos, se ha determinado el número de etapas reales para luego obtener los datos necesarios para el cálculo de los costes.

El diseño se ha realizado con Aspen Plus mediante columnas DSTWU. Con ello, se obtiene el número de etapas reales, dato que hará falta a la hora del dimensionamiento.

El tren de separación se ha explicado anteriormente, siendo la acetona, cumeno, AMS y fenol el orden de separación de los productos.

Para el diseño en Aspen se han supuesto separaciones del 0,99 en composición del clave ligero y del 0,01 del clave pesado por cabeza.

Por tanto, se diseñan 3 columnas para la obtención de acetona, cumeno, AMS y fenol.

Para el dimensionamiento de las torres, se han utilizado ecuaciones X e Y:

$$H = N_{real} * L_t \quad (3.30)$$

Siendo:

- H: altura de la torre (m).
- N_{real} : número de etapas reales proporcionadas por Aspen Plus.
- L_t : distancia entre platos. Se ha tomado 0,5 m según [25].

$$D = \sqrt{\frac{4 * V_w}{\pi * \rho_v * u_v}} \quad (3.31)$$

Siendo:

- D: diámetro de la torre (m).
- V_w : caudal de vapor (kg/s)
- P_v : densidad del vapor (kg/m³)
- U_v : velocidad del vapor. Se toma un valor típico de 2 m/s.

Los resultados se muestran en la tabla 3-10:

Tabla 3-10 Caracterización de las Columnas

Equipo	Nº Etapas	Caudal Vapor (kg/s)	Altura Torre (m)	Diámetro (m)	V (m³)
T-103	21	2,097	10,5	0,86	6,11
T-104	71	1,250	35,5	0,47	6,33
T-105	37	0,501	18,5	0,25	0,96

Los cálculos referidos a los equipos de separación se han realizado con el software EES.

4 Mediciones y presupuestos

Se determinará el coste de la inversión inicial necesaria de la planta. Para ello, se seguirá la metodología que se detalla a continuación

4.1 Coste de equipos

4.1.1 Correlaciones de costes

El coste de los equipos se puede estimar mediante correlaciones. Para ello, se utiliza la siguiente expresión [26]:

$$\log_{10}(C_{eq}) = k_1 + k_2 \log_{10}(A) + k_3 (\log_{10}(A))^2 \quad (4.1)$$

Siendo:

- C_{eq} : coste de un equipo a presión atmosférica, temperatura ambiente y hecho de acero al carbono.
- A : parámetro específico de cada equipo. En la tabla X se muestran los que intervienen en el proceso.
- K_i : parámetros característicos de cada equipo. Ver tabla Y.

Ya que en la industria es común que los equipos no trabajen a presión atmosférica, existe otra correlación que corrige el coste aplicando un factor que depende de la presión:

$$\log_{10}(F_p) = C_1 + C_2 \log_{10}(P) + C_3 (\log_{10}(P))^2 \quad (4.2)$$

En este caso, F_p es el factor de corrección, P la nueva presión y C_i son parámetros característicos de cada equipo.

Existe también otro factor de corrección en caso de que los equipos no sean de acero al carbono. Sin embargo, en nuestro proceso ningún compuesto resulta corrosivo, por lo que no se tendrá en cuenta (o su valor = 1).

4.1.2 Correlaciones BOEHM

Las correlaciones anteriores sirven para un rango de área determinada. Para el caso de los intercambiadores, el rango no es válido por lo que se tendrán que elegir las correlaciones BOEHM.

Estas se rigen por la siguiente ecuación [27]:

$$C_{eq} = C_{ref} * \left(\frac{A}{A_{ref}}\right)^{\alpha} \quad (4.3)$$

Donde:

- C_{eq} : Coste del equipo
- C_{ref} : coste de un equipo de igual tamaño que el calculado. Para los intercambiadores, se tomará un valor de 21000\$.
- α : Parámetro característico de cada equipo. Para los intercambiadores es igual a 0,71.

4.1.3 Parámetros característicos

Los parámetros característicos se tomarán en función de [27]. Se muestran en las siguientes tablas.

Tabla 4-1 Capacidad característica de cada equipo

Equipo	Capacidad o tamaño
Compresor	Potencia (kW)
Intercambiador de calor	Área de transferencia (m ²)
Bomba	Potencia (kW)
Vasija vertical (flash, reactor y columnas)	Volumen (m ³)

Tabla 4-2 Parámetros característicos de cada equipo

Equipo	K1	K2	K3
Compresor	2,2891	1,3603	-0,1027
Bomba	3,3892	0,0536	0,1538
Vasija vertical	3,4974	0,4485	0,1074

Tabla 4-3 Parámetros característicos de cada equipo

Equipo	C1	C2	C3
Horno	0,1347	-0,2368	0,1021
Bomba	-0,3935	0,3957	-0,00226

El factor de corrección por presión para los tanques flash, los reactores y las columnas se hacen de acuerdo a la tabla 4-4:

Tabla 4-4 Fp para tanques flash reactores y columnas

Presión (bar)	Fp (bar)
3,45	1,00
6,89	1,05
13,79	1,15
20,68	1,20

Tabla 4-5 Correlación de Costes

Equipo	Correlación
Tanques, bombas y vasijas	$C_t = C_{eq} * (B_1 + B_2 F_m F_p)$
Compresores	$C_t = C_{eq} * F_m$

Tabla 4-6 Parámetros característicos de cada equipo

Equipo	B1	B2
Reactor	2,25	1,82
Vasija vertical	2,25	1,82

Para las bombas, debido al catálogo, no es necesario el cálculo del coste de equipo.

El coste total de los equipos se muestra en la tabla 4-7:

Tabla 4-7 Coste de los equipos

Equipo	Característica	Coste (\$)
Bomba P-101	10,92 (kW)	12.104
Bomba P-102	1,81 (kW)	4.932
Bomba P-103	1,61 (kW)	4.932
Bomba P-104	1,38 (kW)	4.932
Bomba P-105	5,35 (kW)	10.469
Bomba P-107	0,44 (kW)	4.932
Bomba P-112	0,03 (kW)	3.154
Compresor C-101	1110 (kW)	301.449
Compresor C-102	10,74 (kW)	3.823
Intercambiador E-102	46,17 (m ²)	12.132
Intercambiador E-103	105,1 (m ²)	21.755
Intercambiador E-104	21,48 (m ²)	7.046
Intercambiador E-105	5,042 (m ²)	2.517
Intercambiador E-111	37,28 (m ²)	10.422
Intercambiador E-113	58,12 (m ²)	14.285
Intercambiador E-114	66,84 (m ²)	15.776
Intercambiador E-115	13,38 (m ²)	5.035
Intercambiador E-120	29,87 (m ²)	8.905
Intercambiador E-123	5,9 (m ²)	2.815
Reactor R-101	255,5 (m ³)	673.199
Reactor R-102	225,9 (m ³)	598.159
Reactor R-103	195,2 (m ³)	520.863
Reactor R-104	46,6 (m ³)	149.009
Reactor R-105	7,8 (m ³)	40.886
Columna Preflash T-101	1,49 (m ³)	16.102
Columna Flash T-102	10,04 (m ³)	48.200
Columna T-103	6,11 (m ³)	35.066
Columna T-104	6,33 (m ³)	35.843
Columna T-105	0,96 (m ³)	13.124
Coste total de los equipos		2.581.866

Los cálculos referidos al coste de los equipos se han realizado con el software EES.

4.2 Coste Total de la planta

Una vez se estiman los costes de los equipos, se calcula el coste total de la inversión por la planta. Para ello, se utilizan de nuevo correlaciones de acuerdo con [27]. Se sigue el método de Chilton.

En la tabla 4-8 se muestran los factores a tener en cuenta, así como un factor de corrección. Se toma el valor medio de dicho factor para obtener el resultado.

Tabla 4-8 Coste Total de la Planta

Concepto	Factor	Coste (\$)
1. Coste equipos principales	1	2.581.866
2. Coste equipos instalados	1,8	4.647.358,8
3. Tuberías (Planta de fluidos)	0,45	1.161.839,7
4. Instrumentación (Completa automatización)	0,12	309.823,92
5. Edificios y preparación del terreno (Planta interna)	0,8	2.065.492,8
6. Auxiliares (Nueva extensión)	0,62	1.600.756,92
7. Líneas exteriores (Unidad integrada)	0,02	51.637,32
8. Coste directo total	Suma de las anteriores	12.418.775,5
9. Ingeniería y construcción (complejidad complicada)	0,425	1.097.293,05
10. Contingencia y beneficio contratista (Proceso completado)	0,15	387.279,9
11. Factor del tamaño (Grande)	0,075	193.639,95
12. Coste indirecto total	Suma de las anteriores (9-11)	1.678.212,9
13. Coste total		14.096.988,4

5 Resumen y conclusiones

El objeto del proyecto es el de realizar la Ingeniería Básica de una planta que produce fenol a partir de cumeno. Se describen varios métodos de obtención del producto principal, siendo el más rentable y, por tanto, el más usado, el de oxidación del cumeno.

Este método produce cantidades equimolares de acetona, por lo que se hace de este producto secundario un importante valor añadido debido a su venta.

Los aspectos más importantes a tener en cuenta en el diseño de una planta de producción de fenol son las unidades de oxidación y de fraccionamiento. El correcto diseño de los reactores, así como de los equipos de separación, son los aspectos clave a la hora de poder optimizar la planta.

Es importante conocer el mercado de subproductos que puedan generarse en el proceso de producción, como puede ser el AMS o la acetona antes mencionada. Un correcto funcionamiento de la planta pasa por optimizar la producción de estos dos compuestos que se generan adicionalmente.

Se puede observar que los reactores, junto al compresor de aire, son los equipos de mayor coste. Por tanto, optimizar las condiciones del proceso es vital para la rentabilidad de la planta.

Se ha de tener en cuenta que, en condiciones normales, no haría falta tanta cantidad de *utilities* en el proceso. Se abre un abanico de posibilidades a la hora de integrar energéticamente la planta para disminuir los costes de operación.

Por último, concluir que el proceso logra una rentabilidad superior si la propia planta es la productora del cumeno, compuesto que se genera a partir de benceno y propileno. En la actualidad, las grandes productoras de fenol vía oxidación de cumeno son también productoras de este último.

Anexo I: Balance de Materia y Energía

Corriente		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Caudal molar	(kmol/h)	357,8	661,8	661,8	856,8	300,0	300,0	556,8	753,8	200,0	200,0
Caudal másico	(kg/h)	43010,3	79549,4	79549,4	106889,5	37318,7	37318,7	69570,8	96342,1	25483,3	25483,3
Temperatura	(°C)	25,0	120,0	120,0	120,0	120,0	113,6	120,0	105,0	105,0	44,5
Presión	(bar)	1,0	5,0	5,0	4,5	5,0	5,0	5,0	4,5	5,0	5,0
Densidad	(kg/m ³)	812,0	812,0	812,0	836,8	836,8	836,8	836,8	853,1	853,1	853,1
Compuesto											
Hidroperóxido de Cumeno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	100,5	31,9	31,9	68,6	160,3	40,1	40,1
Fenol	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetona	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cumeno	kmol/h	357,8	661,8	661,8	713,5	253,1	253,1	460,4	555,7	149,9	149,9
Oxígeno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dimetilfenilcarbinol	kmol/h	0,0	0,0	0,0	42,8	15,0	15,0	27,8	37,8	10,0	10,0
Alfametilestireno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Agua	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Nitrógeno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetofenona	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Peróxido de dicumilo	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ácido sulfúrico	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Corriente		11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
Caudal molar	(kmol/h)	553,8	650,8	194,0	194,0	456,8	1348,4	1348,4	1348,4	1348,4	586,5
Caudal másico	(kg/h)	70858,8	84733,9	25299,1	25299,1	59434,8	38903,2	38903,2	38903,2	38903,2	16921,4
Temperatura	(°C)	105,0	90,0	90,0	29,8	90,0	25,0	239,0	23,0	25,0	25,0
Presión	(bar)	5,0	4,5	5,0	5,0	5,0	1,0	5,0	5,0	5,1	5,1
Densidad	(kg/m3)	853,1	867,8	869,2	869,2	867,5	339,4	339,4	339,4	339,4	339,4
Compuesto											
Hidroperóxido de Cumeno	kmol/h	120,2	186,9	56,9	56,9	130,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Fenol	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetona	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cumeno	kmol/h	405,8	431,1	127,1	127,1	304,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Oxígeno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	283,2	283,2	283,2	283,2	123,2
Dimetilfenilcarbinol	kmol/h	27,8	32,8	10,0	10,0	22,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Alfametilestireno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Agua	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Nitrógeno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1065,3	1065,3	1065,3	1065,3	463,4
Acetofenona	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Peróxido de dicumilo	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ácido sulfúrico	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Corriente		21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
Caudal molar	(kmol/h)	761,9	440,8	321,1	4,8	4,8	9,5	4,8	14,3	28,9	427,9
Caudal másico	(kg/h)	21981,8	12718,4	9263,4	137,4	137,4	274,8	137,4	412,1	3473,6	55961,2
Temperatura	(°C)	25,0	25,0	25,0	120,0	105,0	112,5	90,0	101,3	128,0	160,0
Presión	(bar)	5,1	5,1	5,1	4,5	4,5	4,5	4,5	4,5	0,5	0,5
Densidad	(kg/m ³)	339,4	339,4	339,4	339,4	339,4	339,4	339,4	339,4	812,0	871,2
Compuesto											
Hidroperóxido de Cumeno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	130,0
Fenol	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetona	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cumeno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	28,9	275,1
Oxígeno	kmol/h	160,0	92,6	67,4	1,0	1,0	2,0	1,0	3,0	0,0	0,0
Dimetilfenilcarbinol	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	22,8
Alfametilestireno	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Agua	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Nitrógeno	kmol/h	601,9	348,3	253,7	3,8	3,8	7,5	3,8	11,3	0,0	0,0
Acetofenona	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Peróxido de dicumilo	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ácido sulfúrico	kmol/h	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Corriente		31	32	R1	33	34	35	36	37	38	39	40
Caudal molar	(kmol/h)	260,1	167,8	289,0	167,8	15,0	509,4	509,4	509,4	297,8	297,8	209,7
Caudal másico	(kg/h)	31262,53	24698,7	34736,1	24698,7	24698,7	28551,9	28551,9	28551,9	24286,0	24286,0	3778,2
Temperatura	(°C)	128	160,0	128,0	160,0	25,0	90,0	90,0	125,0	125,0	25,0	25,0
Presión	(bar)	0,5	0,5	1,0	8,0	8,0	7,5	8,0	8,0	7,5	7,5	1,0
Densidad	(kg/m ³)	812,0	963,0	812,0	963,0	963,0	918,7	918,7	918,7	865,9	865,9	969,0
Compuesto												
Hidroperóxido de Cumeno	kmol/h	0	130	0,0	130	130	17,2	17,2	17,2	0,0	0,0	0,0
Fenol	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	110,5	110,5	110,5	130,0	130,0	0,0
Acetona	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	110,5	110,5	110,5	130,0	130,0	0,0
Cumeno	kmol/h	260,1	15,0	289,0	15,0	15,0	15,0	15,0	15,0	15,0	15,0	0,0
Oxígeno	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dimetilfenilcarbinol	kmol/h	0	22,8	0,0	22,8	22,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Alfametilestireno	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	20,6	20,6	20,6	22,8	22,8	0,0
Agua	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	232,6	232,6	232,6	0,0	0,0	209,7
Nitrógeno	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetofenona	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Peróxido de dicumilo	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,3	2,3	2,3	0,0	0,0	0,0
Ácido sulfúrico	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,8	0,8	0,8	0,0	0,0	0,0

Corriente		41	42	43	44	45	46	47	R2	48	49	50
Caudal molar	(kmol/h)	0,78	210,5	297,8	130,0	167,8	37,8	22,8	15,0	130,0	130,0	22,8
Caudal másico	(kg/h)	76,44	3854,6	24286,0	7550,4	16735,6	4500,9	2698,0	1802,9	12234,7	12234,7	2698,0
Temperatura	(°C)	25	25,0	60,0	60,0	167	86	92	81,0	113	25,0	25,0
Presión	(bar)	1	1,0	1,2	1,2	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
Densidad	(kg/m ³)	1780,0	972,0	865,9	720,0	978,8	837,3	854,0	812,0	1020,0	1020,0	854,0
Compuesto												
Hidroperóxido de Cumeno	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Fenol	kmol/h	0	0,0	130,0	0,0	130,0	0,0	0,0	0,0	130,0	130,0	0,0
Acetona	kmol/h	0	0,0	130,0	130,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Cumeno	kmol/h	0	0,0	15,0	0,0	15,0	15,0	0,0	15,0	0,0	0,0	0,0
Oxígeno	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Dimetilfenilcarbinol	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Alfametilestireno	kmol/h	0	0,0	22,8	0,0	22,8	22,8	22,8	0,0	0,0	0,0	22,8
Agua	kmol/h	0	209,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Nitrógeno	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Acetofenona	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Peróxido de dicumilo	kmol/h	0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Ácido sulfúrico	kmol/h	0,78	0,8	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Anexo II: Hojas de especificaciones de los equipos.

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-102				
	HOJA 1 DE 1			<i>Planta Producción de Fenol</i>	
	TAG EQUIPO	E-102			
DATOS GENERALES					
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15			
PROVEEDOR		ALFA LAVAL			
FUNCIÓN		Enfriamiento de la corriente de entrada de aire			
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	46,17		
DATOS DE OPERACIÓN					
		In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]		15	90	239	25
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]		0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)		1121		DTLM	45,51
CAUDAL (kg/s)		0,49		0,09	
FLUIDO		AGUA DE RERIGERACIÓN		Aire	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]		5			
DATOS DE DISEÑO					
LONGITUD (m)		1,14			
DIÁMETRO (m)		0,27			
Fecha	03/06/2019	Observaciones:			

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-103			
	HOJA 1 DE 1			<i>Planta Producción de Fenol</i>
	TAG EQUIPO	E-103		
DATOS GENERALES				
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15		
PROVEEDOR		ALFA LAVAL		
FUNCIÓN		Refrigeración reactor R-101. Corriente de reciclo.		
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	105,1	
DATOS DE OPERACIÓN				
	In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]	25	80	120	30,16
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]	0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)	1750		DTLM	17,01
CAUDAL (kg/s)	7,3		10,4	
FLUIDO	AGUA DE RERIGERACIÓN		Cumeno + CHP + PDMC	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]	5			
U (kW/m ² K)	0,97			

HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-104					
	HOJA 1 DE 1			Planta Producción de Fenol	
	TAG EQUIPO	E-104			
	DATOS GENERALES				
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15			
PROVEEDOR		ALFA LAVAL			
FUNCIÓN		Refrigeración reactor R-102. Corriente de reciclo.			
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	21,48		
DATOS DE OPERACIÓN					
		In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]		60	25	105	49,2
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]		0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)		704,5		DTLM	33,53
CAUDAL (kg/s)		4,6		7,1	
FLUIDO		AGUA DE RERIGERACIÓN		Cumeno + CHP + PDMC	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]		5			
U (kW/m ² K)		0,97			

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-105			
	HOJA 1 DE 1			<i>Planta Producción de Fenol</i>
	TAG EQUIPO	E-105		
DATOS GENERALES				
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15		
PROVEEDOR		ALFA LAVAL		
FUNCIÓN		Refrigeración reactor R-103. Corriente de reciclo.		
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	5,042	
DATOS DE OPERACIÓN				
	In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]	25	60	105	74,56
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]	0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)	192,2		DTLM	38,96
CAUDAL (kg/s)	1,27		3,51	
FLUIDO	AGUA DE RERIGERACIÓN		Cumeno + CHP + PDMC	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]	5			
U (kW/m ² K)	0,97			

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-111				
	HOJA 1 DE 1			<i>Planta Producción de Fenol</i>	
	TAG EQUIPO	E-111			
DATOS GENERALES					
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15			
PROVEEDOR		ALFA LAVAL			
FUNCIÓN		Enfriamiento de la corriente de entrada al reactor R-104			
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	37,28		
DATOS DE OPERACIÓN					
		In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]		15	70	160	25
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]		0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)		1328		DTLM	36,41
CAUDAL (kg/s)		5,6		6,86	
FLUIDO		AGUA DE RERIGERACIÓN		Cumeno + CHP + PDMC	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]		8			
U (kW/m ² K)		0,97			

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-113				
	HOJA 1 DE 1			<i>Planta Producción de Fenol</i>	
	TAG EQUIPO	E-113			
DATOS GENERALES					
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15			
PROVEEDOR		ALFA LAVAL			
FUNCIÓN		Calentamiento de corriente de entrada al reactor R-105			
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	58,12		
DATOS DE OPERACIÓN					
		In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]		150	120	90	125
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]		0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)		714,6		DTLM	22,41
CAUDAL (kg/s)		5,52		7,93	
FLUIDO		Vapor de baja		Cumeno + CHP + PDMC + Fenol + Acetona + Agua + AMS + H ₂ SO ₄ + DCP	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]		8			
U (kW/m ² K)		0,54			

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-114			
	HOJA 1 DE 1			<i>Planta Producción de Fenol</i>
	TAG EQUIPO	E-114		
DATOS GENERALES				
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15		
PROVEEDOR		ALFA LAVAL		
FUNCIÓN		Enfriamiento de la corriente de entrada a la unidad de Intercambio Iónico		
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	66,84	
DATOS DE OPERACIÓN				
	In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]	15	70	125	25
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]	0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)	1726		DTLM	26,4
CAUDAL (kg/s)	7,27		6,7	
FLUIDO	AGUA DE RERIGERACIÓN		Cumeno + Fenol + Acetona + AMS	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]	7,5			
U (kW/m ² K)	0,97			

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-115			
	HOJA 1 DE 1			<i>Planta Producción de Fenol</i>
	TAG EQUIPO	E-115		
DATOS GENERALES				
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15		
PROVEEDOR		ALFA LAVAL		
FUNCIÓN		Calentamiento de la corriente de entrada a la primera columna		
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	13,38	
DATOS DE OPERACIÓN				
	In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]	15	90	150	100
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]	0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)	604		DTLM	82,27
CAUDAL (kg/s)	6,7		2,8	
FLUIDO	Cumeno + Fenol + Acetona + AMS		Vapor de baja	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]	7,5			
U (kW/m ² K)	0,54			

HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-120				
	HOJA 1 DE 1			<i>Planta Producción de Fenol</i>
	TAG EQUIPO	E-120		
	DATOS GENERALES			
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15		
PROVEEDOR		ALFA LAVAL		
FUNCIÓN		Enfriamiento de la corriente de salida de fenol		
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	29,87	
DATOS DE OPERACIÓN				
	In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]	15	70	113	25
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]	0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)	661		DTLM	45,51
CAUDAL (kg/s)	2,78		3,4	
FLUIDO	AGUA DE RERIGERACIÓN		Fenol	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]	0,1			
U (kW/m ² K)	0,97			

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE INTERCAMBIADOR E-123			
	HOJA 1 DE 1			<i>Planta Producción de Fenol</i>
	TAG EQUIPO	E-123		
DATOS GENERALES				
DENOMINACIÓN EQUIPO		AALBORG EH-15		
PROVEEDOR		ALFA LAVAL		
FUNCIÓN		Enfriamiento de la corriente de salida de AMS		
Tipo	Tubos	Superficie [m ²]	5,9	
DATOS DE OPERACIÓN				
	In (ff)	Out (ff)	In (fc)	Out (fc)
TEMPERATURA DE OPERACIÓN [°C]	15	70	92	25
FACTOR DE ENSUCIAMIENTO [m ² K/W]	0,0002		0,0002	
CALOR INTERCAMBIADO (kW)	87,84		DTLM	15,22
CAUDAL (kg/s)	0,37		1,25	
FLUIDO	AGUA DE RERIGERACIÓN		AMS	
PRESIÓN DE OPERACIÓN [bar]	0,1			
U (kW/m ² K)	0,97			

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE COMPRESOR C-101	
	HOJA 1 DE 1	
	TAG EQUIPO	C-101
DATOS GENERALES		
NÚMERO DE LÍNEA	16/17	
MATERIAL	ACERO AL CARBONO	
FUNCIÓN	Compresor de aire para Reactores	
DATOS DE OPERACIÓN		
Fluido	Aire (O ₂ +N ₂)	
Caudal (m ³ /h)	114,62	
Temperatura de entrada (°C)	25	
Temperatura de salida (°C)	239	
Temperatura de diseño	307,6	
Densidad (kg/ m ³)	339,4	
Presión de aspiración (bar)	1	
Presión de impulsión (bar)	5	
Relación de compresión	5	
Presión de diseño (bar)	5	
Rendimiento isentrópico (%)	80	
Potencia (kW)	1110	

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE COMPRESOR C-102	
	HOJA 1 DE 1	
	TAG EQUIPO	C-102
DATOS GENERALES		
NÚMERO DE LÍNEA	18/19	
MATERIAL	ACERO AL CARBONO	
FUNCIÓN	Compresor de aire para Reactores	
DATOS DE OPERACIÓN		
Fluido	Aire (O ₂ +N ₂)	
Caudal (m ³ /h)	114,62	
Temperatura de entrada (°C)	50	
Temperatura de salida (°C)	287,6	
Temperatura de diseño	307,6	
Densidad (kg/ m3)	339,4	
Presión de aspiración (bar)	5	
Presión de impulsión (bar)	5,1	
Relación de compresión	1,11	
Presión de diseño (bar)	5	
Rendimiento isentrópico (%)	80	
Potencia (kW)	10,74	

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE BOMBA P-101	
	HOJA 1 DE 1	
	TAG EQUIPO	P-101
<i>Planta Producción de Fenol</i>		
DATOS GENERALES		
DENOMINACIÓN EQUIPO	NBE 50-250/222 AF2ABQQE - 98978496	
NÚMERO DE LÍNEA	2/3	
MATERIAL	ACERO INOXIDABLE	
FUNCIÓN	Bomba centrífuga de alimentación al reactor R-101	
DATOS DE OPERACIÓN		
Fluido	Cumeno	
Caudal (kg/h)	79549,4	
Caudal (m ³ /h)	98,0	
Diámetro interno (m)	0,22	
Temperatura de trabajo (°C)	120	
Temperatura de diseño (°C)	140	
Densidad (kg/ m3)	812,0	
Altura (m)	50,42	
Presión de aspiración (bar)	1	
Presión de impulsión (bar)	5	
Presión de diseño (bar)	16	
NPSH requerido	3,45	
Rendimiento (%)	93	
Potencia consumida (kW)	10,92	
Velocidad de giro del motor (rpm)	2744	

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE BOMBA P-102	
	HOJA 1 DE 1	
	TAG EQUIPO	P-102
<i>Planta Producción de Fenol</i>		
DATOS GENERALES		
DENOMINACIÓN EQUIPO	NBE 80-200/164 AF2ABQQE - 99105442	
NÚMERO DE LÍNEA	4/5	
MATERIAL	ACERO INOXIDABLE	
FUNCIÓN	Bomba centrífuga de reciclo al reactor R-101	
DATOS DE OPERACIÓN		
Fluido	Cumeno + HCP + PDMC	
Caudal (kg/h)	106889,5	
Caudal (m ³ /h)	127,7	
Diámetro interno (m)	0,22	
Temperatura de trabajo (°C)	120	
Temperatura de diseño (°C)	140	
Densidad (kg/ m3)	836,8	
Altura (m)	6,25	
Presión de aspiración (bar)	4,5	
Presión de impulsión (bar)	5	
Presión de diseño (bar)	16	
NPSH requerido	1,4	
Rendimiento (%)	99	
Potencia consumida (kW)	1,81	
Velocidad de giro del motor (rpm)	1438	

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE BOMBA P-103	
	HOJA 1 DE 1	
	TAG EQUIPO	P-103
<i>Planta Producción de Fenol</i>		
DATOS GENERALES		
DENOMINACIÓN EQUIPO	NBE 50-250/222 AF2ABQQE - 98978496	
NÚMERO DE LÍNEA	8/9	
MATERIAL	ACERO INOXIDABLE	
FUNCIÓN	Bomba centrífuga de reciclo al reactor R-102	
DATOS DE OPERACIÓN		
Fluido	Cumeno + HCP + PDMC	
Caudal (kg/h)	96342,1	
Caudal (m ³ /h)	112,9	
Diámetro interno (m)	0,2	
Temperatura de trabajo (°C)	105	
Temperatura de diseño (°C)	140	
Densidad (kg/ m3)	853,1	
Altura (m)	6,13	
Presión de aspiración (bar)	4,5	
Presión de impulsión (bar)	5	
Presión de diseño (bar)	16	
NPSH requerido	1,4	
Rendimiento (%)	99	
Potencia consumida (kW)	1,61	
Velocidad de giro del motor (rpm)	1438	

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE BOMBA P-104	
	HOJA 1 DE 1	
	TAG EQUIPO	P-104
<i>Planta Producción de Fenol</i>		
DATOS GENERALES		
DENOMINACIÓN EQUIPO	NBE 50-250/222 AF2ABQQE - 98978496	
NÚMERO DE LÍNEA	12/13	
MATERIAL	ACERO INOXIDABLE	
FUNCIÓN	Bomba centrífuga de reciclo al reactor R-103	
DATOS DE OPERACIÓN		
Fluido	Cumeno + HCP + PDMC	
Caudal (kg/h)	84733,9	
Caudal (m ³ /h)	97,6	
Diámetro interno (m)	0,2	
Temperatura de trabajo (°C)	90	
Temperatura de diseño (°C)	140	
Densidad (kg/ m3)	867,8	
Altura (m)	6,03	
Presión de aspiración (bar)	4,5	
Presión de impulsión (bar)	5	
Presión de diseño (bar)	16	
NPSH requerido	1,4	
Rendimiento (%)	99	
Potencia consumida (kW)	1,38	
Velocidad de giro del motor (rpm)	1438	

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE BOMBA P-105	
	HOJA 1 DE 1	
	TAG EQUIPO	P-105
<i>Planta Producción de Fenol</i>		
DATOS GENERALES		
DENOMINACIÓN EQUIPO	NBE 32-250/262 AF2ABQQE - 96782675	
NÚMERO DE LÍNEA	32/33	
MATERIAL	ACERO INOXIDABLE	
FUNCIÓN	Bomba centrífuga de alimentación al reactor R-104	
DATOS DE OPERACIÓN		
Fluido	Cumeno + HCP + PDMC	
Caudal (kg/h)	24698,7	
Caudal (m ³ /h)	25,6	
Diámetro interno (m)	0,2	
Temperatura de trabajo (°C)	120	
Temperatura de diseño (°C)	140	
Densidad (kg/ m3)	963,0	
Altura (m)	79,63	
Presión de aspiración (bar)	0,5	
Presión de impulsión (bar)	1	
Presión de diseño (bar)	16	
NPSH requerido	4,08	
Rendimiento (%)	99	
Potencia consumida (kW)	5,35	
Velocidad de giro del motor (rpm)	2914	

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE BOMBA P-107	
	HOJA 1 DE 1	
	TAG EQUIPO	P-107
<i>Planta Producción de Fenol</i>		
DATOS GENERALES		
DENOMINACIÓN EQUIPO	NBE 50-250/222 AF2ABQQE - 98978496	
NÚMERO DE LÍNEA	35/36	
MATERIAL	ACERO INOXIDABLE	
FUNCIÓN	Bomba centrífuga de alimentación al reactor R-105	
DATOS DE OPERACIÓN		
Fluido	Cumeno + HCP + PDMC + Fenol + Acetona + Agua + AMS + DCP	
Caudal (kg/h)	28551,9	
Caudal (m ³ /h)	31,1	
Diámetro interno (m)	0,2	
Temperatura de trabajo (°C)	90	
Temperatura de diseño (°C)	120	
Densidad (kg/ m3)	918,7	
Altura (m)	5,7	
Presión de aspiración (bar)	7,5	
Presión de impulsión (bar)	8	
Presión de diseño (bar)	16	
NPSH requerido	1,4	
Rendimiento (%)	99	
Potencia consumida (kW)	0,44	
Velocidad de giro del motor (rpm)	1438	

	HOJA DE ESPECIFICACIÓN DE BOMBA P-112	
	HOJA 1 DE 1	
	TAG EQUIPO	P-112
<i>Planta Producción de Fenol</i>		
DATOS GENERALES		
DENOMINACIÓN EQUIPO	NBE 32-160.1/177 AF2ABQQE - 98890805	
NÚMERO DE LÍNEA	R2	
MATERIAL	ACERO INOXIDABLE	
FUNCIÓN	Bomba centrífuga de reciclo cumeno	
DATOS DE OPERACIÓN		
Fluido	Cumeno	
Caudal (kg/h)	1802,9	
Caudal (m ³ /h)	2,2	
Diámetro interno (m)	0,16	
Temperatura de trabajo (°C)	120	
Temperatura de diseño (°C)	140	
Densidad (kg/ m3)	812,0	
Altura (m)	6,4	
Presión de aspiración (bar)	0,5	
Presión de impulsión (bar)	1	
Presión de diseño (bar)	16	
NPSH requerido	0,51	
Rendimiento (%)	77	
Potencia consumida (kW)	0,031	
Velocidad de giro del motor (rpm)	1137	

Bibliografía

- [1] Fritz Ullman, “*Ullman’s Encyclopedia of industrial chemistry.*”
- [2] D. F. O. Raymond E. Kirk, *Enciclopedia de la Tecnología Química*, 1995.
- [3] National Institute of Standards and Technology. *Libro Web de Química del NIST, SRD 69 Número CAS: 98-82-8. Cumeno*. Visto en línea: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=98-82-8>
- [4] Ministerio de Trabajo y Asuntos Sociales España. “*Fichas Internacionales de Seguridad Química. Cumeno.*” Visto en línea: <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/FichasTecnicas/FISQ/Ficheros/101a200/nspn0170.pdf>
- [5] Fritz Ullman, “*Ullman’s Encyclopedia of industrial chemistry. Phenol.*”
- [6] Klaus Weissermel, Hans-Jürgen Arpe. “*Química Orgánica Industrial*”. Visto en línea: <https://books.google.com.mx/books?id=UxA3kcGM-i0C&pg=PA332&lpg=PA332&dq=descripcion+del+proceso+de+raschig+hooker&source=bl&ots=5WH-P39kDH&sig=r8XpOTAsZzAoERBJT0vOwUNO33s&hl=es&sa=X&ei=r2aCUpOeMibN8AHOmYHoAg#v=onepage&q=descripcion%20del%20proceso%20de%20raschig%20hooker&f=false>
- [7] Alfonso Carrasco Ríos, Jefe de Operaciones Cepsa Química Palos de la Frontera. “*Descripción de los procesos productivos*”.
- [8] Alfonso Carrasco Ríos, Jefe de Operaciones Cepsa Química Palos de la Frontera. “*Proceso de fenol y acetona*”.
- [9] Francisco Juan Vaquero Acevedo. “*Ingeniería Conceptual de una Planta de Producción de Acetona*”. 2016. Visto en línea: <http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/90684/fichero/tfg%252FTFG.FranciscoJuanVaqueroAcevedo.pdf>
- [10] Puigjaner, L., Ollero, P., Prada, C. y Jiménez, L.; “*Estrategias de modelado, simulación y optimización de procesos químicos.*” Síntesis, DL 2006.
- [11] Sin autor “*Los precios del fenol y de la acetona se mantienen al alza por el encarecimiento de las materias primas*”. Visto en línea el 07/11/2018 en: <https://www.elconfidencialquimico.com/precio-acetona-al-alza-febrero/>
- [12] ERTISA S.A. “*Proceso de producción fenol y acetona*”. Visto en línea el 07/11/2018: <http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/4382/fichero/INTRODUCCION%252Fintroduccion.pdf>
- [13] Manuel Rodríguez, Ismael Díaz, Emilio J. González, María González. Grupo Diquímica. Universidad Politécnica de Madrid. “*TECNOLOGÍA QUÍMICA INDUSTRIAL: Hidrocarburos aromáticos y productos derivados.*” Visto en línea el 07/11/2018: http://www.diquima.upm.es/old_diquima/docencia/tqindustrial/docs/cap5_aromaticos
- [14] Valérie Meille, Claude de Bellefon, Daniel Schweich. “*Kinetics of α -Methylstyrene Hydrogenation on Pd/Al₂O₃*”. 2002. Visto en línea el 27/12/2018: <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ie010460g>
- [15] S. Matsui, T. Fujita “*New Cumene-Oxidation systems O₂ activator effects and radical stabilizer effects.*”

- [16] J. P. Fortuin, H. I. Waterman. *“Production of phenol and cumene”*.
- [17] Instituto Tecnológico de Oxaca. *“Obtención de Acetona Vía Cumeno”*
- [18] Robert J. Schmidt *“Industrial catalytic processes—phenol production”*.
- [19] Base de datos Aspen Plus.
- [20] Xuan Dai, Weiyu Zhou et Al. *“Chemical Engineering Science: Microchannel process for phenol production via the cleavage of cumene hydroperoxide”*
- [21] EES, Base de datos NASA
- [22] Universidad de Sevilla. *“Ingeniería de Procesos Químicos”*
- [23] Ángel Luis Villanueva. Universidad de Sevilla. *“Simulación avanzada de Procesos Químicos”*
- [24] González, R., Velázquez, D. Universidad de Sevilla *“Colección de Tablas y Gráficos de Tecnología Energética.”* (2014).
- [25] Coulson & Richardson's. *“Chemical Engineering Desing. Volume 6. Fourth edition. R.K. Sinnott”* (2005).
- [26] Esmeralda Portillo. Universidad de Sevilla. *“Tema 9 Ingeniería de procesos: Análisis económico de procesos químicos.”*
- [27] *“Correlaciones de BOEHM: intercambiadores de calor.”*
- [28] Fritz Ullman, *“Ullman's Encyclopedia of industrial chemistry. Acetone.”*