

**Universidad de Matanzas**  
**“Camilo Cienfuegos”**  
**Facultad de Ingenierías**  
**Departamento de Química e Ingeniería Química**



**Departamento de Química e Ingeniería Química.**

Trabajo de diploma presentado como requisito parcial para optar por el título de Ingeniero Químico.

**Título:** Diseño de un caso base de una planta de producción de Glicol de Propileno.

**Clasificación:** Fines Docentes.

**Autor:** Edel Hernández Bustos.

**Tutor:** Ing. Pablo R. Pérez Estévez.

Máster en Ciencias.

**Matanzas, Cuba, 2012**

## **Pensamientos**

“Si yo he podido ver más lejos, es porque he estado parado sobre hombros de gigantes”.

Isacc Newton.

“El científico explora lo que existe y el ingeniero crea lo que nunca ha existido”.

Theodore Von Karman.

## Nota de aceptación

---

---

---

---

---

---

---

---

Presidente del Tribunal

Firma

---

Miembro del Tribunal

Firma

---

Miembro del Tribunal

Firma

---

Miembro del Tribunal

Firma

---

**Dedicatoria:**

Este trabajo se lo dedico con mucho amor y afecto a quienes han estado a mi lado todo este tiempo, a mi familia y en especial a mis padres Nidia y Edel y hermana Katia, quienes me han brindado su apoyo incondicional y paciencia a toda la vida.

**Declaración de autoridad:**

Yo, Edel Hernández Bustos, me declaro como único autor de este trabajo realizado en la Universidad de Matanzas “Camilo Cienfuegos”, como requisito parcial para optar por el título de Ingeniero Químico y autorizo que el mismo sea utilizado por la mencionada Institución como material de consulta. Para que así conste, debajo firma:

---

Edel Hernández Bustos

## Agradecimientos:

- Primeramente a lo más grande que tengo en la vida, “mis padres”, por ser la razón de mí existir, por creer siempre en mí y por darme la fuerza que me ha impulsado para llegar a donde estoy.
- A mi tutor Ing. Pablo R. Pérez Estévez, Máster en Ciencias por haberme brindado su ayuda incansable e incondicionalmente a lo largo de este período. Muchas Gracias.
- A mi hermana por ser más que una hermana para mí ya que desde pequeño me guió como a su hijo.
- A mi cuñado Yohanis a quien tengo como un hermano y siempre me ha apoyado en todo.
- A mi novia Cassandra por todos sus desvelos a mi lado y su ayuda incondicional y a toda su familia en especial a su mamá y papá.
- A mi familia por estar siempre pendiente de mis estudios y por brindarme su apoyo incondicional en cada momento.
- A mis abuelos, que aunque algunos ya no estén, siempre rezaron por mí y a mi abuela Migdalia por siempre estar pendiente de mí.
- A mi tía Zunilda que ha sido mi segunda madre y mi profesora en muchos momentos.
- A mi tía Nilda y Eneida por el cariño que me ha dado y por la gran ayuda que me ha brindado siempre.
- A mi tía Elaine (mi madrina) ya que siempre ha estado a mi lado.
- A mis tíos Carlos A (mi padrino) y Roniel P por haberme brindado siempre mucho ejemplo en mi vida.
- A mi tío Girberto Mora por todos sus consejos. Muchas Gracias.
- A todos mis tíos en general.
- A mis sobrinos Cristhian y Kevin por formar parte de mi familia y a quienes quiero como mis hijos.
- A mis primos, a todos en general.
- A Lázaro por siempre ayudarme en todo. Muchas gracias.
- A Nancy Mendoza Santana ya que sin su ayuda no hubiera sido posible realizar mis sueños de ser un profesional.

- A Norma Santiesteban Borrero por toda su ayuda a mi formación preuniversitaria.
- Muchas gracias a la familia Smith Mora por haberme brindado su abrigo cuando más lo necesitaba.
- En general a toda mi familia. Muchas Gracias que de una forma u otra tuvo que ver en mi vida y mi formación.
- A mi amigo Celestino por siempre estar a mi lado y apoyarme en todo.
- A mi amigo Richel por brindarme su amistad sincera y verdadera.
- A Majela, Samuel, Yandi, Rainer y demás amigos de la Universidad por siempre ayudarme y brindarme sus manos amigas.
- A mis compañeros de grupo que nunca voy a olvidar, por todos los momentos felices que compartimos y por la ayuda que durante estos cinco años me han brindado profesional y emocionalmente.
- A todos mis amigos que de una forma u otra han contribuido en mi formación profesional y me han apoyado.
- A todos mis profesores por haber forjado en mí una experiencia inolvidable por el paso por esta Universidad. Muchas Gracias.

A todos muchísimas gracias...

## Resumen

El presente proyecto va a ser realizado con el objetivo de diseñar un caso base de una planta de glicol de propileno, el cual deberá cumplir con algunos parámetros de diseño y calidad del producto. El mismo se llevará a cabo en un simulador capaz de ensamblar toda la planta y estudiar sus parámetros de operación con el objetivo de realizar transformaciones y lograr una mayor eficiencia. Se realizaron los balances de masa y energía en cada uno de los equipos y el diseño de los mismos a partir de los datos requeridos en un módulo lógico (*spreadsheet*) en el software utilizado. También se dispone de un análisis económico riguroso de toda la planta desde la inversión inicial hasta los indicadores de rentabilidad de la producción, también realizados en un módulo lógico (*spreadsheet*). Posteriormente se ejecutó una investigación de la seguridad de toda la planta mediante las técnicas de HAZOP.

## Summary

This project will be conducted with the aim of designing a base case of a propylene glycol plant, which must meet certain design parameters and product quality. It will take place in a simulator capable of assembling the entire plant and to study the operating parameters in order to make changes and achieve greater efficiency. There were the mass and energy balances in each of the teams and their design from the data required in a logic module (spreadsheet) in the software used. It also has a rigorous economic analysis of the whole plant from the initial investment to the profitability indicators of production, also made in a logic module (spreadsheet). Subsequently carried out an investigation into the safety of the entire plant by HAZOP techniques.

## Índice:

<b>Introducción</b> .....	1
<b>Capítulo I: Análisis Bibliográfico</b> .....	3
<b>1.1 Usos y propiedades del Glicol de Propileno</b> .....	3
<b>1.1.1 Propiedades físicas</b> .....	3
<b>1.1.2 Propiedades químicas</b> .....	4
<b>1.1.3 Usos del Glicol de Propileno</b> .....	4
<b>1.2 Riesgos para la salud</b> .....	5
<b>1.3 Estabilidad</b> .....	6
<b>1.4 Procedimiento en caso de derrames</b> .....	6
<b>1.5 Medidas de control de higiene industrial</b> .....	6
<b>1.6 Manejo y almacenamiento</b> .....	7
<b>1.7 Toxicidad</b> .....	7
<b>1.8 Diferentes métodos de producción de Glicol de Propileno</b> .....	8
<b>1.8.1 Glicol de Propileno a partir del ácido acético</b> .....	8
<b>1.8.2 Glicol de Propileno a partir de la hidrolización del óxido de propileno con un catalizador</b> .....	8
<b>1.8.3 Otras metodologías para la producción de Glicol de Propileno</b> .....	9
<b>1.9 Diseño de un proceso químico</b> .....	9
<b>1.10 Aspectos básicos sobre simulación</b> .....	12
<b>1.10.1 Software utilizado para el análisis de procesos</b> .....	13
<b>1.11 Selección de la Termodinámica</b> .....	14
<b>1.12 Análisis de riesgo y seguridad</b> .....	16
<b>Capítulo II: Materiales y métodos</b> .....	18
<b>2.1 Definición y evaluación del problema primitivo</b> .....	18
<b>2.2 Descripción del proceso</b> .....	18

2.3	Procedimiento para los balances de masa .....	19
2.3.1	Balance de masa en el reactor.....	20
2.3.2	Balance de masa en la columna de destilación.....	22
2.3.3	Balance de masa en el mezclador.....	23
2.3.4	Balance de masa en el intercambiador de calor IC1.....	24
2.4	Balances de energía.....	25
2.4.1	Balance de energía en el reactor.....	26
2.4.2	Balance de energía en la torre de destilación.....	27
2.4.3	Balance de energía en el intercambiador de calor IC1.....	29
2.5	Simulación de la Planta.....	30
2.6	Diseño de equipos.....	32
2.6.1	Diseño de los tanques de materia prima y producto.....	32
2.6.2	Diseño del reactor.....	33
2.6.3	Diseño de la columna de destilación de glicol de propileno.....	35
2.6.4	Cálculo del área del intercambiador de calor IC1.....	37
2.6.5	Diseño de la bomba P-1.....	38
2.6.6	Diseño de la bomba P-2.....	39
2.7	Análisis económico.....	39
2.7.1	Cálculos de los costos de adquisición de equipos totales.....	39
2.7.2	Cálculo de la inversión total o inmovilizado total.....	42
2.7.3	Cálculos de los indicadores económicos.....	42
2.8	Proceder metodológico para la aplicación del HAZOP.....	47
<b>Capítulo III: Análisis de los resultados obtenidos.....</b>		<b>50</b>
3.1	Análisis de los balances de masa.....	50
3.2	Análisis de los balances de energía.....	50
3.3	Análisis del diseño de equipos.....	50

<b>3.4</b>	Resultados de los estudios de simulación.....	52
<b>3.4.1</b>	Variación de la temperatura en el reactor.....	52
<b>3.4.2</b>	Variación del factor de separación en el divisor 2.....	53
<b>3.5</b>	Resultados del análisis económico.....	54
<b>3.6</b>	Análisis del HAZOP.....	57
	<b>Conclusiones</b> .....	62
	<b>Recomendaciones</b> .....	63
	<b>Bibliografía</b> .....	64
	<b>Anexos</b> .....	68

## Introducción:

El glicol de propileno es un líquido transparente, incoloro de consistencia espesa a temperatura ambiente. En el aire puede existir en forma de vapor, aunque se debe agitar enérgicamente para que se transforme en vapor. El glicol de propileno prácticamente no tiene olor ni sabor. El mismo se usa para fabricar soluciones anticongelantes y para uso en automóviles, aviones y embarcaciones. También se usa para manufacturar compuestos de poliéster y como solvente en industrias de pintura y plásticos. La Administración de Drogas y Alimentos (FDA) ha clasificado al glicol de propileno como un aditivo que generalmente se estima que es seguro para uso en alimentos. El glicol de propileno se usa para absorber el exceso de agua y para mantener la humedad en ciertos medicamentos, cosméticos y alimentos (Wikipedia, 2012). Por su importancia en las aplicaciones industriales este compuesto resulta necesario dentro de los planes de desarrollo de los próximos años en nuestro país. Existen plantas en otros países como las de la compañía Dow (DOW, 2011) que es la mayor productora de glicol de propileno a nivel mundial con alrededor del 35% de la capacidad mundial. Posee plantas en Alemania, Estados Unidos, Brasil y Australia. Prácticamente toda la producción comercial es elaborada por hidrólisis no catalítica de óxido de propileno a altas temperaturas y presiones. También la conocida Compañía Repsol produce una amplia variedad de glicol de propileno a través de un proceso de hidratación del óxido de propileno obteniendo tres grados y cinco calidades diferentes de este producto (REPSOL, 2010). En este momento las necesidades de este producto se cubren a partir de la importación del mismo, sin embargo en los lineamientos económicos del PCC aprobados recientemente se recoge la indicación de reducir las importaciones para mejorar la economía del país. De ahí que se pueda proponer el estudio de la alternativa de producir esta sustancia a nivel nacional.

**Problema de investigación:** ¿Cómo diseñar una planta de Glicol de Propileno cumpliendo con los indicadores de eficiencia económica, seguridad e impacto ambiental?

La presente propuesta tiene como **hipótesis** de trabajo:

Si se aplican los programas de simulación de procesos se pueden realizar los balances de masa, energía y lograr el diseño de los equipos que permita una buena eficiencia de la planta, consecuentemente con un estudio preciso de los indicadores económicos, de seguridad e impacto ambiental, es posible obtener el diseño de un caso base de la planta.

## Objetivo General:

- Diseñar un caso base de una planta de producción de Glicol de Propileno cumpliendo con las especificaciones de calidad y con los indicadores de eficiencia económica, seguridad e impacto ambiental.

### **Objetivos Específicos:**

1. Realizar estudio bibliográfico sobre el tema.
2. Realizar el procedimiento para los balances de materiales y energía en cada equipo.
3. Diseñar y dimensionar los equipos.
4. Analizar la factibilidad económica.
5. Realizar el análisis de seguridad industrial de la planta por el método de HAZOP.

## Capítulo I: Análisis Bibliográfico.

En este capítulo se estudia la bibliografía relacionada con el tema objeto de estudio de este trabajo, tratándose como temas fundamentales: usos y propiedades del glicol de propileno, diferentes métodos de producción de glicol de propileno, diseño de un proceso químico, selección de la termodinámica, análisis de riesgo y seguridad.

### 1.1 Usos y propiedades del Glicol de Propileno.

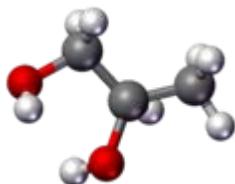


Figura1.1: Molécula de Glicol de Propileno.

#### 1.1 .1 Propiedades físicas.

El glicol de propileno es incoloro, inodoro, líquido con un sabor ligeramente dulce. Es higroscópico y completamente miscible con muchos solventes polares como el agua, alcoholes, éteres del glicol y acetona. Su solubilidad es sin embargo baja en los solventes no polares como el benceno, tolueno, dicloroetano y cloroformo (Wikipedia, 2012).

El glicol del propileno es difícil de cristalizar cuando se enfría es muy viscoso. El uso extendido del glicol de propileno como anticongelante es basado en su habilidad de bajar el punto de congelación al agua. Las propiedades físicas del glicol de propileno y el agua por consiguiente son sumamente importantes según (INSHT, 2009). El glicol de propileno se emplea como anticongelante en: líquidos de frenos, en resinas de poliéster y en productos cosméticos y farmacéuticos con menores problemas de toxicidad que el etilenglicol.

Tabla 1.1: Propiedades Físicas del Glicol de Propileno.

El punto de ebullición a 101.3 kPa	187.2°C
El punto helado	-13.00 °C
La densidad a 20°C	1.1135 g/cm <sup>3</sup>
El índice refractivo, ND,	20 1.4318
El calor de vaporización a 101.3 kPa	52.24 kJ/mol

El calor de combustión	19.07 MJ/kg
La temperatura crítica	372 °C
La presión crítica	6515.73 kPa
El volumen crítico	0.186 L/mol
El punto de llamarada	111 °C
La temperatura de la ignición	371 ° F
El límite explosivo inferior	2.60 vol%
El límite explosivo superior	12.50 vol%
La viscosidad a 20 °C	46 CPS
El coeficiente de la expansión cúbica a 20 °C	0.62×10 <sup>-3</sup> K <sup>-1</sup>

(Dolberg, 2007)

### 1.1.2 Propiedades químicas:

El glicol de propileno está compuesto por los alcoholes que tienen una cadena alifática de carbono. El dos hidroxilo es el que provoca la alta solubilidad en el agua. Los glicoles más pesados poseen algunos de las propiedades de los éteres debido a la unión del éter en su estructura molecular. La reacción del glicol de propileno es similar a las de los alcoholes en que el grupo de hidrógeno se reemplaza por los halógenos, etc. La fórmula química del glicol de propileno es  $C_3H_8O_2$  y el nombre por la (IUPAC) es 1,2-propanodiol según (Potapov, y otros, 1979).

### 1.1.3. Usos del Glicol de Propileno.

El principal uso del glicol de propileno es como anticongelante para automóviles. Se utiliza en las células de enfriamiento de los automóviles, los aviones o los autobuses. El MPG, también conocido como monopropilenglicol, con un bajo punto de congelación se mezcla con agua y se utiliza como líquido subordinante para el parabrisas de los automóviles y aviones. El glicol de propileno es un anticongelante comúnmente usado en sistemas de aire acondicionado que han refrigerado el enfriador de agua o la alimentación fuera de las cañerías, o en sistemas de refrigeración con temperaturas inferiores al punto de congelación. También se utiliza como anticongelante en los circuitos de refrigeración de motores de combustión interna, como difusor del calor, para fabricar compuestos de poliéster, y como disolventes en la industria de la pintura y el plástico. El glicol de propileno es también un ingrediente en líquidos para revelar fotografías, fluidos para frenos hidráulicos y en tinturas usadas en almohadillas para estampar, bolígrafos, y talleres de imprenta según (ONEWORLD, 2009). Además es usado en procesos químicos

como la síntesis de los poliuretanos, de algunos poliésteres, como producto de partida en la síntesis del dioxano.

Las propiedades y usos del glicol de propileno referidos anteriormente coinciden con las reportadas por otras fuentes especializadas. (Mallinckrodt Chemicals, 2001) (Nalco Energy Services, 2012).

## **1.2. Riesgos para la salud.**

El glicol de propileno es una sustancia química que por sus propiedades puede producir afectaciones importantes a la salud. (Dolberg, 2007) reporta los siguientes riesgos:

**Contacto con los ojos:** cuando los operadores no utilizan el equipo de protección personal correspondiente o cuando las condiciones del puesto de trabajo no guardan los requisitos de higiene normados, puede causar una irritación menor.

**Contacto con la piel:** el contacto frecuente o prolongado puede presentar síntomas de piel reseca y de irritación ya que es un agente desengrasante suave.

**Inhalación:** no existen síntomas significativos de un daño a la salud a consecuencia de la Inhalación.

**Ingestión:** relativamente no es tóxico. La ingestión de pequeñas cantidades (sobre 100 ml) puede causar un temporal malestar gastrointestinal y depresión del sistema nervioso central. Estos efectos son más severos en personas con problemas previos de salud.  
**Efectos Crónicos.**

**Precaución:** no se conocen efectos adversos,

**Condiciones de salud que agravan los casos de exposición:** El material y sus emisiones podrían agravar las condiciones pre-existentes de desórdenes en la piel, desórdenes del sistema nervioso y enfermedades en los ojos.

(Dolberg, 2007) recomienda como primeros auxilios en caso de contacto con esta sustancia:

**Contacto con los ojos:** lávese inmediatamente los ojos con agua en abundancia, mínimo durante 20 o 30 minutos, separando los párpados frecuentemente. Solicite ayuda médica si el dolor o el enrojecimiento persisten.

**Contacto con la piel:** lávese inmediatamente con gran cantidad de agua, use jabón si hay disponible. Quítese la ropa contaminada incluyendo zapatos. Solicite ayuda médica en caso de que haya irritación persistente.

**Inhalación:** usando protección respiratoria adecuada, se saca inmediatamente a la víctima del ambiente de exposición y se le ubica en un sitio con aire fresco y limpio. No se espera

requerir de algún método de primeros auxilios, ya que este producto no presenta agresividad por vía inhalatoria,

Ingestión: si se ingiere, no inducir el vómito. Mantenga a la persona en descanso. Si la víctima está consciente proporcionarle varios vasos de agua o leche. Procure ayuda médica inmediata.

### **1.3 Estabilidad.**

Sobre la estabilidad del compuesto (Dolberg, 2007) expresa:

Es estable en condiciones normales de uso y almacenamiento (temperatura ambiente, presión atmosférica, producto no contaminado, ambiente no corrosivo).

Los peligros por descomposición pueden ser: la combustión puede producir monóxido de carbono y dióxido de Carbono. También se pueden formar aldehídos, ácido láctico, ácidos acéticos o pirúvico y peróxidos.

Presenta como incompatibilidades: evitar contacto con agentes oxidantes fuertes, ácido perclórico.

### **1.4 Procedimiento en caso de derrames.**

En caso de derrames en tierra las recomendaciones (Dolberg, 2007) son:

Eliminar toda fuente de ignición. Utilizar el equipo de protección. Emplear herramientas anti-explosivas. Si es posible, detener la descarga adicional de material. Puede formar superficie resbaladiza. Aislar el área en caso de existir riesgo de incendio al menos 50 metros a la redonda. Proceder a confinar el derrame y evitar que el derrame llegue a las alcantarillas, reservorios de agua o vías navegables. Contener el líquido derramado con arena o tierra. No utilizar materiales combustibles como aserrín. El material recuperado debe ser transferido a contenedores debidamente rotulados y donde se le aplique una disposición final acorde a las regulaciones ambientales locales.

### **1.5 Medidas de control de higiene industrial.**

Como medidas de control de higiene industrial resulta fundamental la ventilación:

Se recomienda que las Terminales de recepción y despacho sean zonas abiertas con gran circulación natural de aire. Igualmente los sitios para transvase o proceso, deben contar con ventilación por extracción local para controlar las emanaciones del proceso cerca de la fuente, previniendo la dispersión de vapores y aerosoles en el área de trabajo. Se recomienda contar con ventilación mecánica anti-explosiva en los lugares cerrados.

También para la protección personal se recomienda:

En el caso de operaciones donde el contacto es probable utilice ropa impermeable, guantes de butilo, gafas plásticas de seguridad con protección lateral y mascarilla con

filtro químico para vapores orgánicos. Esta protección sirve hasta niveles de 10 veces la máxima concentración especificada (vapor y aerosol, 50 ppm). Para emergencias o lugares donde el nivel de exposición es desconocido, use el equipo autónomo de respiración con presión positiva.

Debe contarse con equipos de seguridad tales como duchas de seguridad y estaciones lava ojos que deben ser probadas de manera frecuente.

Se recomienda además lavarse vigorosamente las manos después de manipular el producto y antes de comer o beber. Lavar la ropa contaminada antes de volverla a usar. En el puesto de trabajo, no comer, beber ni fumar. (Dolberg, 2007)

### **1.6 Manejo y almacenamiento.**

Almacenamiento y Manejo:

Mantenga los recipientes herméticamente cerrados. Almacene en un lugar fresco, seco y con buena circulación de aire, aislado de los productos incompatibles. Maneje y abra los recipientes con cuidado utilizando herramientas anti-chispas. No maneje o almacene el material cerca de llamas abiertas, calor u otras fuentes de ignición. Proteja los recipientes contra daño físico. El sitio de almacenamiento debe estar provisto de equipo para respuesta en caso de incendio, acorde a la carga de fuego, y su diseño estructural debe permitir la salida de humos y la recolección de un derrame.

Precaución: no presurice, corte, caliente o sulte los recipientes. Los recipientes vacíos deben ser manejados con precaución debido al peligro que representa su contenido de líquido y vapores residuales; por tanto deben tratarse de manera ambientalmente segura (Dolberg, 2007).

### **1.7 Toxicidad.**

Al ingerir cantidades sumamente altas de glicol de propileno puede causar la muerte, en tanto que cantidades elevadas pueden producir náusea, convulsiones, dificultad para hablar, desorientación, y problemas al corazón y al riñón.

El glicol de propileno afecta a la química del organismo aumentando la cantidad de ácido, lo que produce problemas metabólicos. La intoxicación se presenta como depresión del S.N.C. e irritación en el sitio de absorción inicialmente, seguido de acidosis metabólica e hipocalcemia. Puede causar sordera, ceguera y puede dejar grandes secuelas cerebrales, y a grandes dosis la muerte. Es un solvente orgánico con actividad nefrotóxica como se mencionó anteriormente. Puede ocasionar necrosis tubular aguda que si no se trata a tiempo puede desencadenar una insuficiencia renal crónica y posteriormente la muerte. (Sax, 1968).

## 1.8 Diferentes métodos de producción de Glicol de Propileno:

El proceso de producción de glicol de propileno más utilizado es a partir de la reacción del óxido de propileno con agua, como se reporta en el sitio web de glicol de propileno (PG sector group of Cefic, 2011). La figura 1.2 ilustra de forma resumida el proceso global de obtención de glicol de propileno a partir de la producción de petróleo.

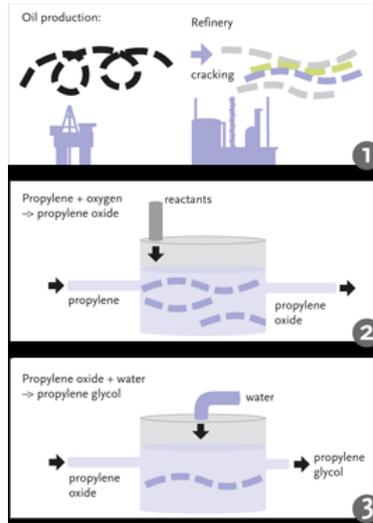
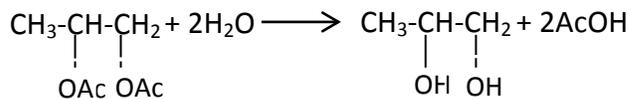
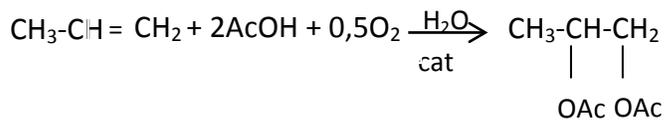


Figura1.2: Producción de Glicol de Propileno.

### 1.8.1 Glicol de Propileno a partir del ácido acético.

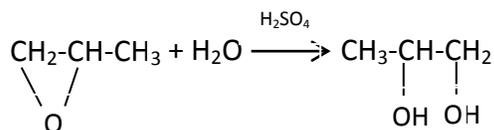
Según investigaciones de Halcon se puede obtener Glicol de Propileno en forma de acetato por reacción de propeno con ácido acético en presencia de  $O_2$  y  $TeO_2$  e iones de bromo a  $150^\circ C$  con una selectividad de aproximadamente 93% la subsiguiente hidrólisis a  $110^\circ C$  y a presiones por encima de la atmosférica produce Glicol de Propileno (Klaus, 1999):



### 1.8.2 Glicol de Propileno a partir de la hidrolización del óxido de propileno con un catalizador.

Se produce Glicol de propileno hidrolizando el óxido de propileno. Esta reacción se efectúa en un reactor CSTR (reactor de mezcla completa) a temperatura ambiente con un

catalizador de ácido sulfúrico. (Folger, 2002), sino se utiliza un gran exceso de agua se obtienen polímeros, dicha reacción se muestra a continuación:



### 1.8.3 Otras metodologías para la producción de Glicol de Propileno.

Dentro de los  $\alpha$ -glicoles más sencillos está el Glicol de Propileno, este se obtiene en grandes cantidades del propileno a través de sus epóxidos, esto ha permitido el desarrollo de muchas aplicaciones industriales.

En general los  $\alpha$ -glicoles se obtienen por muchas vías (Primo Yúfera, 1988):

- La oxidación de los alquenos con  $\text{MnO}_4\text{K}$  neutro.
- A partir de epóxidos.
- Utilizando como reactivo las halohidrinas.
- A partir de  $\alpha$ -dihalogenados con  $\text{KOH}$  acuoso.
- Por dimerización de cetonas con reductores.

Otros de los métodos es a través de la transformación de la dihidroxiacetona mediante un catalizador de forma hidrogenolítica en una sola etapa según (Services, 2000).

Como ha sido recogido en este punto, entre los diferentes procesos de producción de Glicol de Propileno, el más utilizado industrialmente es el proceso basado en la reacción del óxido de propileno con agua debido a su factibilidad económica por la disponibilidad de la materia prima, tal como se afirma por (PG sector group of Cefic, 2011).

### 1.9 Diseño de un proceso químico.

El diseño de un proceso químico tiene su origen en un problema primitivo que plantea una necesidad a satisfacer. Este problema primitivo debe ser valorado y precisado planteándose diferentes vías para su solución. Cuando entre estas alternativas está la creación de un nuevo proceso químico da comienzo la síntesis y diseño de este nuevo proceso químico.

Los problemas de diseño son problemas de final abierto y pueden tener muchas soluciones atractivas y próximas a la óptima. Es una actividad creativa.

Un problema de síntesis de proceso puede representarse por el siguiente esquema:



Debe sintetizarse el diagrama de flujo que transforme las materias primas en productos a través de una secuencia de operaciones apropiada.

Posteriormente deben diseñarse los equipos que realizarán estas operaciones logrando que se cumpla:

- ✓ Calidad del producto
- ✓ Impacto ambiental
- ✓ Resultados económicos favorables
- ✓ Seguridad de operación

En el esquema del proceso de síntesis y diseño de un proceso químico (Seider, 1998) señala tres etapas principales:

1. Creación del nuevo proceso
2. Desarrollo del caso base
3. Diseño detallado

La etapa de creación del nuevo proceso.

Comprende los siguientes pasos.

Paso 1: Creación de la base de datos preliminar

Paso 2: Experimentos

Paso 3: Síntesis preliminar del proceso

Paso 1: Creación de la base de datos preliminar.

Para facilitar el trabajo posterior de síntesis debe organizarse una base de datos preliminar con abundante información relativa al proceso:

Paso 2: Experimentos.

Muchos conceptos de diseño son el resultado de experimentos extensivos en el laboratorio, que proporcionan valiosos datos para el diseño. Muchas veces es necesario realizar nuevos experimentos a otras concentraciones, temperaturas y presiones o usando

otros solventes más representativos de la producción en gran escala. Estos resultados se procesan y se insertan en la base de datos preliminar.

Paso 3: Síntesis preliminar del proceso.

Antes de proceder a realizar la síntesis preliminar del proceso deben definirse algunos conceptos importantes:

1. Proceso continuo o discontinuo.
2. Estado químico
3. Operaciones del proceso
4. Etapa de desarrollo del caso base.

Al terminar la etapa de creación del proceso se seleccionan una o dos alternativas para su desarrollo posterior en lo que se llama Diseño del caso base. Esta etapa comprende los siguientes pasos:

1. Diagrama de flujo detallado del proceso.
2. Integración del proceso.

1. Diagrama de flujo detallado del proceso:

Para desarrollar un diagrama de flujo del proceso:

- Se añaden equipos no incluidos en la síntesis preliminar como bombas, acumuladores de reflujo y tanques.
- Se nombran los equipos y corrientes.
- Se prepara una lista de los equipos principales.
- Se construye una tabla con el estado de cada corriente: temperatura, presión, fase, flujo, composición, entalpía y otras propiedades.
- Se completan todos los balances de materiales y energía.
- Se chequean todas las asunciones.
- Se elabora un diagrama de flujo con la simbología adecuada.

2. Integración del proceso:

Se chequean las asunciones y se ven las oportunidades de mejorar los diseños. Se analiza la integración del calor y potencia para reducir el consumo de utilidades. Se aplican algoritmos para la integración del calor y potencia.

Para cada diseño del caso base se realizan tres actividades en paralelo a partir del diagrama de flujo detallado del proceso:

1. Creación de una base de datos.

Se refina la base de datos preliminar y se añaden nuevos datos como: Datos de cinética y de transporte, datos heurísticos y otros para el dimensionamiento de los equipos.

2. Estudios de planta piloto.

Generalmente es necesario realizar estudios de planta piloto para confirmar que el proceso va a operar correctamente y para obtener información para el completamiento de la base de datos. Es un paso caro y que consume tiempo por lo que debe ser planificado con anticipación y muy detallado.

3. Simulación del proceso.

El uso de modelos de simulación permite examinar el efecto de cambios paramétricos en el proceso total. También para comparar con los datos de planta piloto.

Al terminar el diseño del caso base debe hacerse una valoración para comprobar si es prometedor el proceso considerado. Para ello pueden realizarse diseños de equipos por métodos cortos y análisis económicos preliminares. Si lo es, se pasa al diseño detallado y si no lo es se regresa a los pasos anteriores para hacer las correcciones pertinentes. (Seider, 1998)

### **1.10 Aspectos básicos sobre simulación.**

Con el desarrollo de la informática se han creado programas especializados para la simulación de procesos, (Ortega, 2010) estudia los diferentes software utilizados para la simulación de procesos. Durante los últimos diez años, los paquetes de software que realizan cálculos simbólicos y numéricos junto con representaciones gráficas se han convertido en una herramienta indispensable para todos los ingenieros (Scenna, 1999) (Rodríguez, 2001) (Pretides, y otros, 2002). El gran potencial de las computadoras radica en su capacidad para hacer cualquier tarea que pueda describirse matemáticamente como una serie de operaciones y decisiones lógicas. Para esto se pueden utilizar diferentes herramientas de análisis (Boehm, 1997) y (Himmelblau, 1997): Programas de resolución de ecuaciones: estos programas son de bajo costo como (TK Solver Plus, Gauss9), disponibles para microcomputadoras, para resolver balances de materia lineal y no lineal. Es muy probable que tales códigos se ejecuten con mayor rapidez que los programas de hoja de cálculo, pero no tan rápidamente como los programas en C o en FORTRAN.

Hojas de cálculo: son tal vez la herramienta numérica más ampliamente utilizada en la computación personal. Por esta razón se ha tendido que a ampliar las posibilidades de estos programas hasta adquirir algunas de las características de las otras herramientas de computadora y ya no están limitados a realizar cálculos en una matriz bidimensional de

celdas. Existen un sin número de paquetes de hojas de cálculo comerciales (LOTUS, EXCEL, etc.). Las similitudes entre las hojas de cálculo comerciales son muchas. Todas ofrecen un administrador de situaciones que permite al usuario incluir varios conjuntos de suposiciones en una hoja de cálculo y permite cambiar de un conjunto de suposiciones a otro con rapidez a fin de poder comparar la solución de los problemas (Himmelblau, 1997) y (Cultip, y otros, 1999).

Software interactivo: el llamado software interactivo ha evolucionado desde códigos de computadora que sólo efectuaban manipulaciones de matrices hasta programas de gran alcance que combinan cálculos de matrices, análisis de datos, resolución de ecuaciones, gráficos y muchas otras funciones. Dos ejemplos representativos de este tipo de software son MathCAD y MatLAB. Estos códigos son más fáciles de usar que los códigos genéricos, los programas de simulación o los manipuladores simbólicos de los que hablaremos más adelante, pero su alcance no es tan amplio. La principal razón del éxito de estos códigos es que el lenguaje empleado para formular los programas es sencillo y se combina bien con las matemáticas que el usuario ya conoce. MatLAB cuenta también con un conjunto de paquetes de aplicación llamados “cajas de herramientas” que son bibliotecas de funciones y programas que resuelven problemas específicos.

Programas de simulación de procesos: estos aceptan información acerca de un proceso químico en el nivel del trazado de diagrama de flujos y realizan cálculos que proporcionan datos no sólo acerca de los flujos de materia y de energía, sino también sobre costos, disposición de tuberías, efectos de tiempo y otra información útil para el diseño y la operación. Estos códigos pueden simular el desempeño en estado estacionario (y en algunos casos en estado no estacionario) de plantas químicas integradas de gran tamaño que consisten en unidades de proceso interconectadas con flujos de reciclaje y sus fuentes. Con los programas de simulación podemos modelar toda una planta completa con tanta complejidad como deseemos. Es posible introducir la estructura del proceso en la computadora por medio de una interfaz gráfica y obtener la salida en forma de diagramas de flujo o bien, informes escritos. Además, es necesario obtener de una base de datos las propiedades físicas apropiadas e información termodinámica.

#### **1.10.1 Software utilizado para el análisis de procesos.**

La información acerca de los programas específicos de análisis de procesos pueden ser obtenidas de diversas fuentes, incluyendo contactos profesionales en revistas y publicaciones tales como: *Computer Selects reviews* y *Chemical Engineering Progress' Annual Software Directory*.

A continuación se muestran las herramientas de análisis de procesos más utilizadas:

*EndResults*: [Sega, Inc.] Es un paquete de hojas de cálculo, herramientas de análisis y problemas resueltos disponibles en formato para *LOTUS* y *EXCEL*. Como aplicaciones incluye Absorbedor, Absorbedor con rehervidor, Absorbedor con reflujo, Destilación, Destilación trifásica y a vacío, Destilación de petróleo y extractor líquido-líquido. Permite la predicción y la evaluación de unidades de destilación. (Sega, 2003).

Design II: [WinSim Inc.] Este software fue desarrollado para aplicaciones en las industrias químicas, petroquímicas y refinerías. Permite realizar los balances de materia y energía para gran variedad de procesos incluyendo operaciones unitarias tales como reactores, intercambiadores de calor, quemadores y hornos, bombas, compresores, turbinas y columnas de destilación. La base de datos y las correlaciones para determinar las propiedades termodinámicas están fundamentalmente enfocadas a aplicaciones con hidrocarburos y plantas químicas (WinSim, 2004) y (WinSim , 2006).

Aspen Plus: [Aspen Technology, Inc.] Este es un simulador gráfico de procesos de propósito general. Principalmente enfocado para la industria química y petroquímica. Incluye además, el análisis de costos e inversiones de los procesos y unidades (López, 2007) y (Aspen Technology, 2008b).

ChemCAD III: [Chemstations, Inc.] Es un simulador de procesos para uso general. Su biblioteca de equipos incluye intercambiadores, bombas, compresores, turbinas y otros módulos. Además, el usuario puede configurar su propio módulo. Incluye módulos específicos para el diseño y la evaluación de intercambiadores de calor, columnas de destilación y sistemas de tuberías (Chemstations, 2006).

Aspen HYSYS: [Aspen Technology, Inc.] Este paquete permite la simulación dinámica y en estado estacionario a través de interface gráfica. Su mejor aplicación es para la industria petroquímica. Ofrece una optimización multivariables para el diseño de procesos de modelación dinámica integrada para el desarrollo de estrategias de control de procesos e interface gráfica con software de control digital (Aspen Technology, 2008a).

Todos los programas mencionados anteriormente son capaces de resolver cualquier problema de simulación en plantas de tratamiento de gas acompañante de petróleo. De ellos el que va a ser utilizado es HYSYS, debido a que ofrece resultados confiables, se encuentra disponible en nuestra Universidad, se puede operar con facilidad y ya fue estudiado en asignaturas de análisis de proceso.

### **1.11 Selección de la Termodinámica.**

Para (Martínez, 2000) el diseño y simulación de procesos químicos necesita de datos de propiedades físicas, termodinámicas y de transporte, estos se calculan a partir de modelos de propiedades con base teórica o empírica. La representación precisa de las propiedades es fundamental para la simulación de procesos. El usuario debe seleccionar un modelo para representar las propiedades. El uso de un modelo inadecuado puede cambiar radicalmente los resultados de la simulación y perder validez. Los errores en la simulación por una mala selección del modelo de propiedades físicas no se pueden detectar o prevenir fácilmente, los resultados parecen correctos, pero no lo son.

El comportamiento de una solución depende de la naturaleza de cada uno de sus componentes, de las cantidades presentes y de las condiciones de presión y temperatura. A su vez, el comportamiento de cada compuesto está relacionado a las fuerzas intermoleculares que actúan en el nivel molecular y a su interacción con los otros

compuestos. Cada modelo termodinámico ha sido desarrollado para ciertos intervalos específicos de condiciones, y para ciertos tipos de sustancias, no pueden reproducir el comportamiento de todos los compuestos y en todas las condiciones (Martínez, 2000).

La selección del modelo termodinámico apropiado a una aplicación específica, es una decisión crucial para el éxito de la simulación. Los criterios a tomar en cuenta para una selección adecuada se basan en los siguientes aspectos:

- Naturaleza de los componentes (polaridad), idealidad o no idealidad de la mezcla.
- Intervalo de composición, temperatura y presión.
- Tipo de aplicación (equilibrio vapor-líquido o. equilibrio líquido- líquido, una fase, etc.).

El comportamiento no ideal de una especie química o una mezcla está determinado por las interacciones a escala molecular. Las condiciones del sistema como presión y temperatura acentuarán o suavizarán el efecto no ideal de ese sistema (Martínez, 2000).

En general, las propiedades se calculan con Ecuaciones de estado: Modelos EOS, Modelos de coeficiente de actividad y Modelos Especiales (correlaciones teóricas, empíricas o híbridas).

Las Ecuaciones de estado se aplican a fluidos normales (gases raros. nitrógeno. Oxígeno, monóxido de carbono, hidrocarburos) sustancias de baja polaridad aún a presiones altas, trabajan muy bien con componentes supercríticos. Tienen varias ventajas: son continuas en la región crítica (aunque es difícil alcanzar convergencia), son continuas en la región de dos fases y predicen el equilibrio vapor-líquido y se pueden derivar una amplia gama de propiedades. La Ecuación de estado trabaja con los mismos parámetros específicos en todo el intervalo de aplicación.

Una desventaja de las Ecuaciones de estado es que no se pueden aplicar a mezclas con componentes polares, a moléculas grandes (polímeros) y electrolitos. Son muy sensibles a las reglas de mezclado y a parámetros de interacción binaria que se deben determinar de datos experimentales (Martínez, 2000).

Los modelos de coeficiente de actividad como su nombre lo indica calculan el coeficiente de actividad para la fase líquida y entre ellos se encuentran los modelos clásicos: Van Laar, Wilson, Margulles, y los más recientes como son:

NRTL (*Non Random Two Liquid*), *Uniquac*, *Unifac*, *Flory –Huggins* entre otros (Seader, y otros, 1998).

El uso de modelos de coeficiente de actividad en la fase líquida permite representar el comportamiento no ideal de mezclas (especies fuertemente polares, polímeros, electrolitos, componentes que forman enlaces de hidrógeno) a presiones bajas. Estos modelos solamente se aplican a la fase líquida, por ello, es necesario utilizar una Ecuación de estado para representar la fase vapor. (Martínez, 2000).

La selección entre los modelos de Ecuaciones de estado (modelos EOS) y los modelos de coeficientes de actividad está basada en el grado de no-idealidad del sistema en estudio y de las condiciones de operación.

Las Ecuaciones de estado se aplican a sistemas no polares a ligeramente polares en todo el intervalo de presión y los modelos de coeficiente de actividad se usan en sistemas que contienen sustancias polares a presiones bajas < 10 bar). (Martínez, 2000).

Carlson (Don't Gamble with Physical Properties, 1996), cubre en un esquema global los aspectos acerca del papel tan importante de las propiedades en la simulación de procesos y presenta recomendaciones para que se puedan elegir con seguridad los modelos de propiedades necesarios para cada caso de aplicación de simulación, La selección de los modelos de propiedades para una simulación en particular, es una de las decisiones más importantes que debe de tomar un usuario, con la metodología de Carlson, se facilita la selección del modelo termodinámico adecuado para cada simulación. En su artículo, presenta diagramas del tipo de, árbol de decisión, sumamente útiles en esa selección.

Para seleccionar un modelo Termodinámico resulta útil un procedimiento para decidir el modelo a tomar. (Kamaruddin, 2003) recomienda el árbol de decisión propuesto por (Elliott, y otros, 1999).

Los simuladores de procesos más modernos, entre ellos el *ASPEN HYSYS* proporcionan asistentes que ayudan a seleccionar el modelo termodinámico a utilizar especificando el tipo de componente y el tipo de procesos.

Teniendo en cuenta lo planteado hasta aquí por autores como (Martínez, 2000); (Seider, 1998) y (Carlson, 1996) es de gran importancia seleccionar adecuadamente la termodinámica de un proceso antes de proceder a su simulación y para ello se pueden utilizar los árboles de decisión y los asistentes que ofrecen los simuladores de procesos.

### **1.12 Análisis de riesgo y seguridad.**

El diseño de cualquier proceso debe estar acompañado por un análisis de riesgo y seguridad industrial, de forma tal que se garantice un diseño que no esté propenso a la ocurrencia de accidentes.

La evaluación de riesgos en la industria química es necesaria para conocer las afectaciones que pueden ser provocadas por cambios en las condiciones del proceso. A pesar de que existen gran cantidad de técnicas para llevar a cabo los análisis de riesgo y seguridad industrial en cualquier proceso, una de las más universalmente usada es la técnica HAZOP.

El HAZOP es una técnica de identificación de riesgos. Este método surgió en 1963 en la compañía Imperial Chemical Industries (ICI) la cuál utilizaba técnicas de análisis crítico en otras áreas. Posteriormente, se generalizó y formalizó, y actualmente es una de las herramientas más utilizadas internacionalmente en la identificación de riesgos en una instalación industrial. El mismo se basa en que los riesgos, los accidentes o los problemas de operabilidad se producen como consecuencia de una desviación de las variables de

proceso con respecto a los parámetros normales de operación en un sistema dado o en una etapa determinada. Por tanto, ya se aplique en la etapa de diseño, como en la etapa de operación, la técnica consiste en evaluar, en todas las líneas y en todos los sistemas las consecuencias de posibles desviaciones en todas las unidades de proceso, tanto si es continuo como discontinuo. El HAZOP involucra un examen metódico y sistemático de los documentos de diseño que describen las instalaciones, por un grupo multidisciplinario, que identifica a los problemas de riesgo en el proceso que pueden causar un accidente. Las desviaciones del valor de diseño o los parámetros clave son estudiados usando palabras guías. Esto supone que los valores de diseño de los flujos, temperaturas, presiones, concentraciones y otros procesos variables son inherentemente seguros y operables citado de (Garza, 2007).

Para aplicar la técnica de HAZOP se parte de un grupo de palabras guías que identifican los posibles cambios (Turton, 1998)

## Capítulo II: Materiales y métodos.

### 2.1 Definición y evaluación del problema primitivo.

¿Por qué se va a realizar el diseño de una planta?

Porque se necesita satisfacer la demanda de 41325,6 t/año de glicol de propileno con una fracción molar de propileno de 99,5%, para la elaboración de productos químicos en una planta que trabaja 24 h/día durante 335 días al año cumpliendo con los indicadores de eficiencia económica, seguridad e impacto ambiental.

Este producto pudiera importarse, pero no se realiza porque la política del país es exportar más e importar menos. También se pudiera realizar una ampliación de una planta, pero no es la mejor opción porque no existe ninguna planta que produzca glicol de propileno. Otra alternativa pudiera ser la creación de una nueva planta química.

De las tres opciones se aplicó la última porque sería la más económica, debido a que la materia prima principal para la producción del glicol de propileno es el óxido de propileno y este se puede producir en el país, no es necesario importarlo, se cuenta con el personal calificado para el diseño y puesta en marcha, se pretende que esta planta satisfaga la demanda requerida y se logrará obtener un producto con buena calidad.

### 2.2 Descripción del proceso.

En el Tutorial para el entrenamiento en el uso del simulador de Procesos HYSYS (AEA Technology-Hyprotech, 2000) se presenta un esquema simplificado para una planta de producción de glicol de propileno combinando el óxido de propileno con agua en un reactor de tanque agitado continuo a presión atmosférica. El esquema consta de un mezclador, el reactor y una columna de destilación donde se obtiene el glicol de propileno por la corriente de fondo de dicha columna. Partiendo de este esquema básico se agregó un divisor, las corrientes de recirculación y purga y un intercambiador para ajustar la temperatura del producto. De esta forma se estructuró el diagrama de flujo que a continuación se describe.

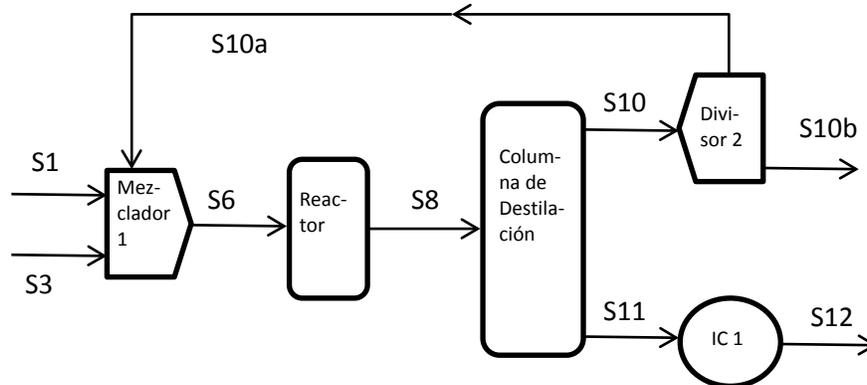


Figura 2.1: Diagrama de flujo del proceso de glicol de propileno.

En la etapa de materia prima el óxido de propileno entra al proceso a través de una corriente S1, con un 100% de pureza, este óxido de propileno entra en un mezclador con el objetivo de mezclar la corriente S3 que es agua pura y la recirculación S10a que es una corriente derivada del condensador de la torre de destilación con una composición rica en agua y menor contenido de óxido de propileno. Toda esta mezcla pasa al reactor por la corriente S6. En el reactor ocurre la hidratación del óxido de propileno. Como dicha reacción es exotérmica o sea desprende gran cantidad de calor, aumenta la temperatura, por lo que la misma se mantiene en 60°C mediante agua de enfriamiento. A esta temperatura se obtiene entre un 90 y un 98% de conversión. Del reactor sale la corriente S8 con una temperatura de 60°C, que se mantiene en fase líquida. La misma es enviada a una columna de destilación que tiene como función separar el glicol de propileno de los demás componentes. La columna tiene un rehervidor en el fondo y un condensador total en el tope de la misma. La corriente S10 que sale por el tope de la columna es prácticamente agua con un contenido bajo de óxido de propileno, por lo que es recirculada al mezclador que se encuentra antes del reactor con el objetivo de aumentar la eficiencia en el mismo y obtener una mayor conversión. La corriente S11 que sale por el fondo de la columna contiene el glicol de propileno que es el producto de interés y un 0.005 de agua, por lo que se puede apreciar que el producto tiene cumple con la calidad requerida. Posteriormente este producto como sale a una temperatura elevada es enviado hacia un intercambiador de calor el cual tiene la función de disminuir la temperatura del líquido para su posterior almacenamiento en el tanque.

### **2.3 Procedimiento para los balances de masa.**

El diseño de la planta de glicol de propileno se realizará aplicando principalmente las técnicas de simulación con el simulador de procesos HYSYS. Antes de proceder a la simulación de este proceso fue necesario realizar un análisis detallado del mismo para conocer el comportamiento de las diferentes variables y equipos, así como determinar las variables de diseño cuyos valores deben fijarse. Para ello se plantearon los balances de masa y energía en los equipos principales y se analizaron los grados de libertad y las variables conocidas y desconocidas. Esto además permitió un mayor conocimiento del proceso y los fenómenos que en el mismo ocurren.

Para realizar estos balances de masa se necesita obtener el árbol de STEWARD del proceso de obtención de glicol de propileno y así determinar la corriente de corte, de la cual se brindan todos los datos.

Después de realizar el árbol de STEWARD se obtuvo la matriz de ciclos y corrientes. Para su confección se utiliza la figura del anexo # 1.

Tabla 2. 1 **Matriz de ciclos y corrientes.**

<b>Corrientes/ ciclos</b>	<b>S1</b>	<b>S3</b>	<b>S6</b>	<b>S8</b>	<b>S10a</b>	<b>S10</b>	<b>Total</b>
A			x	x	x	x	4
Total	-	-	1	1	1	1	

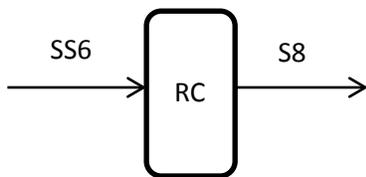
Como la matriz de ciclos y corrientes tiene frecuencia 1 la corriente de corte puede ser cualquiera de las cuatro que están presentes en el ciclo, pero se recomienda cortar la corriente que representa la salida de un mezclador por lo que se escoge S6 como corriente de corte. La misma se divide en dos corrientes: S6 que sale del mezclador 1 y SS6 que entra al Reactor. Por lo tanto se asumen los datos de temperatura, presión y composición de la corriente SS6 para proceder al cálculo de los equipos que la involucran, el diagrama de flujo información se podrá ver anexo # 2 con las modificaciones que más adelante se detallan.

### **Orden de Cálculo.**

Reactor, Columna de destilación, Mezclador, Intercambiador de calor.

**Nota:** El óxido de propileno se le otorgo el número 1 en cada corriente para facilitar los balances de masas, al agua se le nombro el número 2 y al glicol de propileno el 3.

### **2.3.1 Balance de masa en el reactor.**



**Figura 2.2:** Esquema del reactor.

### **Datos:**

**Reacción química:**  $C_3H_6O + H_2O \longrightarrow C_3H_8O_2$

**Conversión:** X= Es un valor conocido entre un 90 y un 98% de conversión.

Valores asumidos de la corriente de corte SS6: Temperatura=24.882°C, Presión=0.9729 bar, flujo molar=151.22 kmol/h, con una fracción molar de óxido de propileno=0.4572, agua=0.5428 y glicol de propileno=0.

La expresión general de Balance de Masa es:

Masa Acumula = Masa sale - Masa entra + Masa genera – Masa consume

Como se considera estado estacionario el término de acumulación se anula, quedando:

Masa sale = Masa entra + Masa genera – Masa consume

### **Balance de masa con reacción química.**

#### **Balance del óxido de propileno (1)**

Masa sale = Masa entra + Masa genera – Masa consume (1)

**Nota:** El término de la masa que se genera de óxido de propileno se hace 0 porque el óxido de propileno en el reactor no se genera sino entra se consume y sale. El flujo y las fracciones son molares.

La composición se denota: Z(corriente, componente)

Masa sale = Masa entra – Masa consume

$S8 * Z(S8,1) = SS6 * Z(SS6,1) - \{[SS6 * Z(SS6,1)] * X\}$  (2)

$S8 * Z(S8,1) = SS6 * Z(SS6,1) * [1-X]$  (I)

#### **Balance de H<sub>2</sub>O (2)**

Masa sale = Masa entra + Masa genera – Masa consume (3)

**Nota:** El término de la masa que se genera de Agua (H<sub>2</sub>O) se hace 0 porque el agua en el reactor no se genera sino entra se consume y sale.

Masa sale = Masa entra – Masa consume

$S8 * Z(S8,2) = SS6 * Z(SS6,2) - SS6 * Z(SS6,1) * X$  (II) (4)

#### **Balance del glicol de propileno (3).**

Masa sale = Masa entra + Masa genera – Masa consume

$S8 * Z(S8,3) = SS6 * Z(SS6,3) + SS6 * Z(SS6,1) * X$  (III) (5)

**Nota:** El término de la masa que se consume de glicol de propileno se hace 0 porque el glicol de propileno no se consume; entra y se genera como producto de la reacción en el reactor y como producto de interés.

#### **Ecuación restrictiva de composición.**

$Z(S8,1) + Z(S8,2) + Z(S8,3) = 1$  (IV) (6)

### Grados de Libertad.

Grados de libertad = Variables Totales – Variables Conocidas – Números de Ecuaciones (7)

VC (variables conocidas): [SS6; Z(SS6,1) ; Z(SS6,2) ; X] SS6 es la corriente de corte cuyos valores fueron asumidos.

VT (variables totales) = 8

NE (Número de ecuaciones) = 4

GL = VT – VC – NE

GL = 8 – 4 – 4

GL = 0

### 2.3.2 Balance de masa en la columna de destilación.

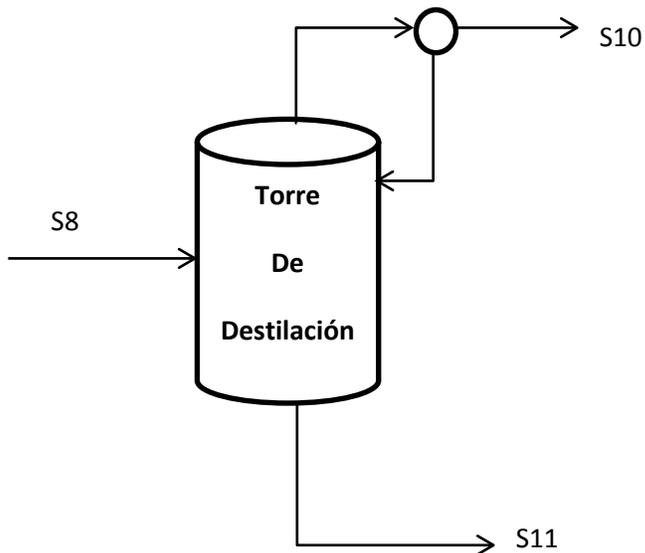


Figura 2.3: Esquema de la columna de destilación .

#### Balance sin reacción química

#### Balance general.

$$S8 = S10 + S11 \quad (I) \quad (8)$$

#### Balance por componentes.

#### Óxido de propileno.

$$S8 \cdot Z(S8,1) = S10 \cdot Z(S10,1) + S11 \cdot Z(S11,1) \quad (II) \quad (9)$$

#### Glicol de Propileno.

$$S8 \cdot Z(S8,3) = S10 \cdot Z(S10,3) + S11 \cdot Z(S11,3) \quad (\text{III}) \quad (10)$$

**Ecuaciones restrictivas por composición.**

$$Z(S10,1) + Z(S10,2) + Z(S10,3) = 1 \quad (\text{IV}) \quad (11)$$

$$Z(S11,1) + Z(S11,2) + Z(S11,3) = 1 \quad (\text{V}) \quad (12)$$

**Grados de libertad (GL).**

Grados de libertad (GL) = Variables totales (VT) – Variables conocidas (VC) – Números de ecuaciones (NE).

VC: [S8; Z(S8,1); Z(S8,3)] S8 es resultado del balance anterior.

$$GL = VT - VC - NE$$

$$VT = 11$$

$$VC = 3$$

$$NE = 5$$

$$GL = 11 - 3 - 5$$

$$GL = 3$$

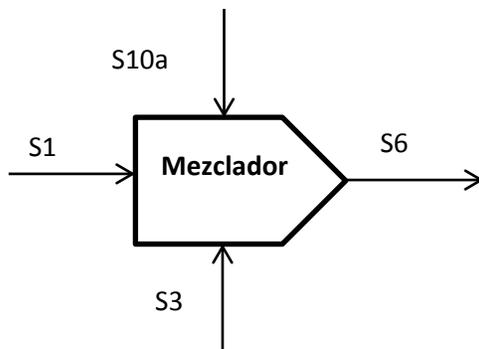
El cálculo de los grados de libertad dio 3 por lo que hay que fijar 3 variables en la torre de destilación. Las cuales corresponden a la composición del producto:

$$Z(S11,1) = 0$$

$$Z(S11,2) = 0.005$$

$$Z(S11,3) = 0.995$$

**2.3.3 Balance de masa en el mezclador.**



**Figura 2.4:** Esquema del mezclador .

**Balance total.**

$$S1 + S3 + S10a = S6 \quad (I) \quad (13)$$

**Balance por componentes.**

**Óxido de propileno.**

$$S1*Z(S1,1) + S10a*Z(S10a,1) = S6*Z(S6,1) \quad (II) \quad (14)$$

**Agua (H<sub>2</sub>O).**

$$S3*Z(S3,2) + S10a*Z(S10a,2) = S6*Z(S6,2) \quad (III) \quad (15)$$

**Ecuaciones restrictivas de composición.**

$$Z(S6,1) + Z(S6,2) + Z(S6,3) = 1 \quad (IV) \quad (16)$$

$$VC: [ S1; S3; S10a; Z(S1,1); Z(S10a,1); Z(S3,2); Z(S10a,2) ]$$

$$GL = VT - VC - NE \quad (17)$$

$$VT = 11$$

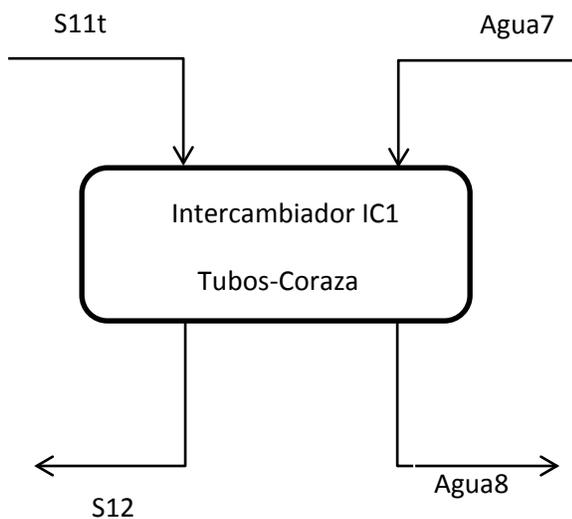
$$VC = 7$$

$$NE = 4$$

$$GL = 11-7-4$$

$$GL = 0$$

**2.3.4 Balance de masa en el intercambiador de calor IC1.**



**Figura 2.5:** Esquema del intercambiador de calor IC 1 .

### **Balance de masa general para S12.**

Masa sale = Masa entra + Masa genera – Masa consume

**Nota:** El término de la masa que se genera y se consume de agua se hace 0 porque en el intercambiador de calor IC1 no se genera ni se consume nada porque no hay reacción química.

$$\text{Masa sale} = \text{Masa entra} \quad (18)$$

$$S_{12} = S_{11}$$

### **Balance por componentes.**

#### **Agua que sale con el producto.**

$$S_{12} \cdot Z(S_{12},2) = S_{11} \cdot Z(S_{11},2) \quad (19)$$

#### **Glicol de propileno.**

$$S_{12} \cdot Z(S_{12},3) = S_{11} \cdot Z(S_{11},3) \quad (20)$$

### **2.4 Balances de energía.**

Para la determinación de las temperaturas, las entalpías y los calores necesarios en las corrientes del sistema se procederá hacer uso de los balances de energía. Para el cálculo de las entalpías de las corrientes se aplicará la ecuación:

$$H(i) = F(i) \cdot \sum h_j \cdot z(i,j)$$

Donde:

$H(i)$  = Entalpía de la corriente  $i$ , kcal/mol

$F(i)$  = Flujo molar de la corriente  $i$ , kcal/mol

$Z(i,j)$  = Composición molar del componente  $j$  en la corriente  $i$

$h_j$  = Entalpía molar del componente, kcal/mol

$h_j = h_j^o + \Delta h_j$  (Aucejo , 1999)

Donde:

$h_j^o$  = Entalpía de formación a temperatura de 298K y 1 atm. (Calor de formación standard  $\Delta H_f^o$ , generalmente en estado gaseoso).

$\Delta h_j$  = Variación de entalpía por la que el componente  $j$  pasa de la temperatura de referencia a la temperatura del sistema.

### 2.4.1 Balance de energía en el reactor.

Corriente que entra: SS6, la cual es una corriente líquida.

Temperatura de entrada (SS6):  $24.88^{\circ}\text{C} = 298.03\text{ K}$

Corriente de salida: S8 sigue siendo líquida.

Temperatura de salida (8):  $60^{\circ}\text{C} = 333.15\text{ K}$

Q: Flujo de calor (cedido o absorbido).

W: Trabajo realizado.

$\Delta H$ : Diferencia de entalpía (final- inicial).

Cp: Capacidad calorífica de la sustancia.

Xj: Composiciones en la fase líquida.

$\lambda_{\text{cond}}$ : Calor latente donde la sustancia cambia de fase.

$T_{bj}$ : Temperatura de ebullición del componente j.

$$Q - W = \Delta H \quad \text{primera Ley de la Termodinámica} \quad (21)$$

En el reactor químico no hay trabajo y por tanto  $W=0$ .

$$Q = \Delta H \quad (22)$$

$$Q = H(S8) - H(SS6)$$

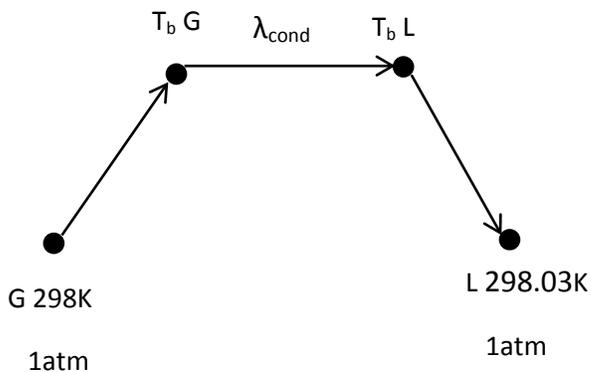
#### Determinación H(SS6):

$$H(SS6) = SS6 * \sum h_j * Z(SS6, j) \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \quad (23)$$

Zj= Composiciones en la fase líquida.

$$h_j = \Delta H^{\circ} f_j + \Delta h_j$$

#### Camino termodinámico.



Debido a que existe un cambio de fase, hay que incluir el calor de condensación con signo negativo (calor cedido) para determinar  $\Delta h_j$ .

$$\Delta h_j = C_{p \text{ medio } G} j^* (T_{b j} - 298) + \lambda_{\text{cond}} + C_{p \text{ medio } L} j^* (298.03 - T_{b j}) \quad (24)$$

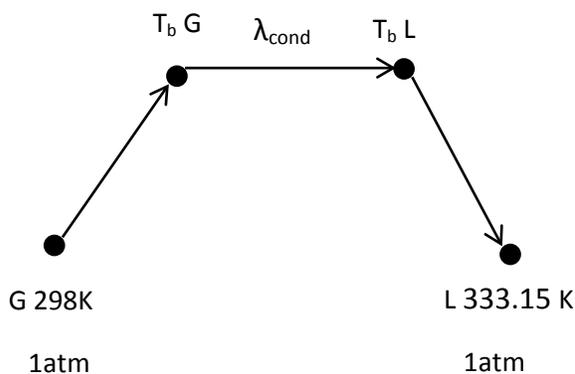
**Determinación H(S8):**

$$H(S8) = S8 * \sum h_j * Z(S8, j) \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \quad (25)$$

Zj= Composiciones en la fase líquida.

$$h_j = \Delta H^\circ f_j + \Delta h_j \quad (26)$$

**Camino termodinámico.**



Debido a que existe un cambio de fase, hay que incluir el calor de condensación con signo negativo (calor cedido) para determinar  $\Delta h_j$ .

$$\Delta h_j = C_{p \text{ medio } G} j^* (T_{b j} - 298) + \lambda_{\text{cond}} + C_{p \text{ medio } L} j^* (333.15 - T_{b j}) \quad (27)$$

Para calcular el calor cedido en el reactor químico se necesita de la expresión de la Primera Ley de la Termodinámica que es la siguiente:

$$Q = H(S8) - H(SS6) \quad (28)$$

Nota: Estos datos pueden ser vistos en el HYSYS donde está montada la planta.

#### 2.4.2 Balance de energía en la torre de destilación.

Corriente de salida: S10 líquida.

Temperatura de salida T(S10): Temperatura de salida del condensador.

Corriente de salida: S11 líquida.

Temperatura de salida T(S11): Temperatura de salida del rehedidor.

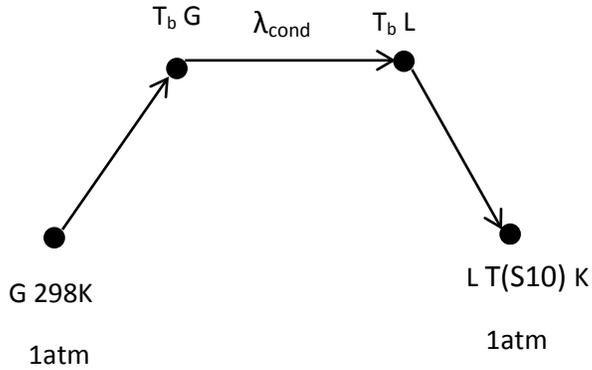
**Determinación de H(S10):**

$$H(S10) = S10 * \sum h_j * Z(S10, j) \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \quad (29)$$

Zj= Composiciones en la fase líquida.

$$h_j = \Delta H^{\circ} f_j + \Delta h_j$$

**Camino termodinámico.**



Debido a que existe un cambio de fase, hay que incluir el calor de condensación con signo negativo (calor cedido) para determinar  $\Delta h_j$ .

$$\Delta h_j = C_{p \text{ medio } G} j^* (T_{bj} - 298) + \lambda_{cond.} + C_{p \text{ medio } L} j^* (T(S10) - T_{bj}) \quad (30)$$

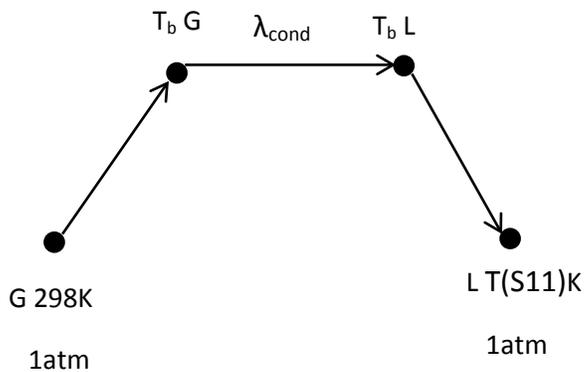
**Determinación de H(S11):**

$$H(S11) = S11 * \sum h_j * Z(S11, j) \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \quad (31)$$

Zj= Composiciones en la fase líquida.

$$h_j = \Delta H^{\circ} f_j + \Delta h_j$$

**Camino termodinámico.**



Debido a que existe un cambio de fase, hay que incluir el calor de condensación con signo negativo (calor cedido) para determinar  $\Delta h_j$ .

$$\Delta h_j = C_{p \text{ medio } G} j^* (T_{bj} - 298) + \lambda_{cond.} + C_{p \text{ medio } L} j^* (T(S11) - T_{bj}) \quad (32)$$

$$Q - W = \Delta H$$

$$Q = \Delta H$$

$$Q = (H(S10) + H(S11)) - H(S8) \quad (33)$$

$$Q = Q_{\text{cond}} + Q_{\text{reherv}} \quad (34)$$

Nota: Estos datos pueden ser vistos en el HYSYS donde está montada la planta.

### 2.4.3 Balance de energía en el intercambiador de calor IC1.

#### Determinación de H(S12):

Temperatura de salida T(S12): Temperatura de salida del Intercambiador de Calor IC1.

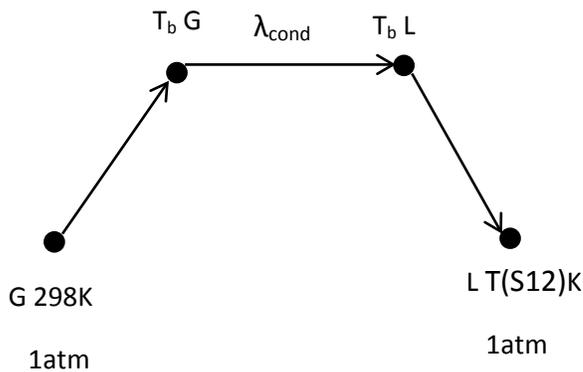
Corriente de salida: S12 sigue siendo líquida.

$$H(S12) = S12 * \sum h_j * Z(S12, j) \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \quad (35)$$

Z<sub>j</sub> = Composiciones en la fase líquida.

$$h_j = \Delta H^{\circ} f_j + \Delta h_j$$

#### Camino termodinámico.



Debido a que existe un cambio de fase, hay que incluir el calor de condensación con signo negativo (calor cedido) para determinar Δh<sub>j</sub>.

$$\Delta h_j = C_{p_{\text{medioGj}}} * (T_{bj} - 298) + \lambda_{\text{cond.}} + C_{p_{\text{medioLj}}} * (T(S12) - T_{bj}) \quad (36)$$

$$Q - W = \Delta H$$

$$Q = \Delta H$$

$$Q = H(S12) - H(S11) \quad (37)$$

Nota: Estos datos pueden ser vistos en el HYSYS donde está montada la planta.

## 2.5 Simulación de la Planta.

Para la simulación de la planta en HYSYS se dieron los siguientes pasos:

1. Se seleccionó el paquete termodinámico UNIQUAC atendiendo a las propiedades de los componentes y siguiendo el árbol de toma de decisiones; considerando que la planta trabaja a presión atmosférica. Esta selección se comprobó con el asistente para la selección de la termodinámica de ASPEN HYSYS 2006.
2. En el *Basis Environment* se introdujeron los componentes y la reacción química.
3. Se incorporaron los módulos correspondientes a los equipos y corrientes principales del proceso incluyendo la corriente de recirculación y la purga.
4. Se agregaron los módulos de los tanques de materias primas y producto.
5. Se introdujeron los intercambiadores de calor necesarios, incluyendo la caída de presión de 0.3 bar, siguiendo la heurística 5 de la tabla 9-11 (Turton, 1998).
6. Se dividieron las corrientes y agregaron los tramos de tubería entre un equipo y otro. Las nuevas corrientes se denotaron con la letra (t) a la salida de la tubería. Se consideró para ello la heurística 3 de la tabla 9-8 según (Turton, 1998) que recomienda una longitud de 30 metros de tubería. El diámetro se determinó mediante la utilidad *Pipe sizing* de HYSYS.
7. Se introdujeron las bombas necesarias de acuerdo a las caídas de presión ocasionadas. Las nuevas corrientes se denotaron con la letra (p) a la salida de la bomba.
8. Se rectificaron las caídas de presión y las eficiencias en los platos de la columna de acuerdo con las heurísticas 3 que señala una caída de presión de 0.1bar y la heurística 4 que plantea una eficiencia de platos entre 0.6 y 0.9, seleccionándose un valor de 0.8. Estas heurísticas fueron tomadas de la tabla 9.14 (Turton, 1998). Como consecuencia de esto se ajustaron el número de platos y el plato de alimentación, así como la altura de la tubería de alimentación a la columna.
9. Se añadió el modulo lógico (*spreadsheet*) para realizar el diseño de los tanques.
10. Se adicionó un segundo módulo lógico para efectuar el diseño de los restantes equipos.
11. Un tercer módulo lógico permitió realizar todo el análisis económico de la planta.
12. Por último se hicieron estudios de simulación para diferentes variables de la planta: Temperatura en el reactor y factor de separación en el divisor 2 (purga y reciclo).

Para dar cumplimiento a los pasos anteriores se tuvieron en cuenta los siguientes detalles:

## **Módulos correspondientes a los equipos principales.**

### **Reactor.**

Se entraron los siguientes datos en cada una de las pestañas correspondientes:

Volumen del reactor, porcentaje del nivel del líquido, set de reacción y temperatura de la corriente de salida.

### **Columna de destilación.**

Se entraron los siguientes datos en cada una de las pestañas correspondientes:

Número de platos totales, número del plato de alimentación, como especificaciones se dieron la relación de reflujo y la composición de agua en la corriente de salida por el fondo, esta última considerando la calidad requerida por el producto.

### **Intercambiador de calor IC 1.**

Se entraron los siguientes datos en cada una de las pestañas correspondientes:

Número de pases por la coraza y por los tubos, temperatura de salida del producto y temperatura de entrada y salida del agua de enfriamiento.

### **Módulos de tuberías.**

Se entraron los siguientes datos en cada una de las pestañas correspondientes:

Calor intercambiado (*Duty*), longitud, elevación y tipo de material.

En la pestaña *Rating* con el botón *View Segment* se selecciona el *Schedule* y el diámetro nominal.

Para determinar el diámetro se utilizó la utilidad *Pipe Sizing* de la siguiente forma:

En la pestaña *Design* se seleccionó la corriente y el tipo de cálculo: *Pressure Drop*. Se entró un valor asumido para el diámetro y se verificó en la pestaña *Performance* que la velocidad cumple con la heurística para velocidades de líquidos que deben ser de 0.5-2.5m/s en tuberías de presión de la tabla 1-1 del (Pavlov, 1981).

### **Modulo lógico (spreadsheet).**

En la pestaña *Connections* se importaron los datos correspondientes a las variables necesarias.

En la pestaña *Parameters* se asignó el número de filas y columnas deseado.

En la pestaña *Spreadsheet* se programaron las fórmulas correspondientes a los cálculos necesarios. Se indicó el tipo de variable y de forma automática se mostró el resultado con las unidades.

En la pestaña *Connections* se exportaron los resultados correspondientes a las variables necesarias.

### **Estudios de simulación.**

En el menú *tools* se seleccionó la herramienta *Data book*, en la cual la pestaña *Variables* permitió insertar todas las variables independientes y dependientes.

En la pestaña *Case Studies* se identificaron las variables independientes y dependientes de cada caso.

El botón *View* permitió visualizar cada caso de estudio y en la pestaña *Independent Variables Setup* se especificó el rango y el paso de cada variable independiente.

El botón *Start* ordenó la ejecución de los cálculos pertinentes.

El botón *Results* mostró los resultados tabulados como graficados.

Ver diagrama de flujo correspondiente a la simulación en el Anexo #2.

## **2.6 Diseño de equipos.**

### **2.6.1 Diseño de los tanques de materia prima y producto.**

Para el diseño de los tanques de materia prima y producto se toma un tiempo de cobertura de la materia prima y el producto que puede ser de 7 días de capacidad, pero que el mismo depende del sistema de transportación de la materia prima y del producto según se recoge en la heurística 6 de la tabla 9.7 de (Turton, 1998).

Se calculará el volumen de los tanques por:

$$\text{Vol} = q * t / 0.9 \quad (38)$$

Donde:

q: flujo volumétrico (m<sup>3</sup>/h)

t: tiempo de cobertura de fluido, para tanques de almacenamiento.

Se consideró un coeficiente de llenado de 0.9 según se recoge en la heurística 5 de la tabla 9.7 según (Turton, 1998).

Una relación longitud o altura al diámetro del tanque recomendada es de 3 como se recoge en la heurística 4 de la tabla 9.6 del (Turton, 1998). Por lo que el diámetro del tanque se calculó por:

$$D = \sqrt[3]{\frac{4 * \text{Vol}}{9\pi}} \quad (39)$$

Como el volumen del tanque es mayor que 38 m<sup>3</sup> se recomienda el uso de un tanque vertical, según lo planteado en la heurística 3 de la tabla 9.7 citada en (Turton, 1998). Estos tanques se encuentran a presión atmosférica.

### 2.6.2 Diseño del reactor.

Para el diseño del reactor se tendrá en cuenta la recomendación de (Ray, 1999) que plantea que para obtener un valor estimado del costo del reactor puede calcularse el mismo como la unión de un recipiente más un intercambiador de calor por lo que se calcula a continuación el volumen del recipiente y el área del intercambiador de calor.

Un reactor CSTR es un tanque en el cual la masa reaccionante es continuamente agitada de tal manera que se considera como una mezcla completa y por lo tanto se asume que sus propiedades son uniformes en todo el interior del reactor según (Levenspiel, 1985). La ecuación de diseño de un reactor de mezcla completa es:

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\tau}{C_{A0}} = \frac{X_A}{-r_A} \quad (40)$$

Siendo V: el volumen del reactor,  $F_{A0}$ : el flujo molar del reactivo limitante,  $\tau$ : el tiempo espacial,  $C_{A0}$ : la concentración del reaccionante A en la corriente de entrada,  $X_A$ : la conversión de A y  $r_A$ : la velocidad de reacción de A.

La velocidad de una reacción no catalítica depende de la concentración del reaccionante. Con respecto al reaccionante A, la ecuación de velocidad de reacción se expresa de la siguiente manera:

$$-r_A = kC_A^n C_B^m \quad (41)$$

Siendo k, la constante específica de velocidad de reacción, n, el orden cinético de la reacción y  $C_A$ , la concentración de reaccionante

El orden de una reacción se determina experimentalmente y la constante de velocidad de reacción depende de la temperatura de la reacción y se puede calcular con la ecuación de Arrhenius, de la forma:

$$k = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (42)$$

Siendo A: el factor pre-exponencial, E: la energía de activación, T: la temperatura en escala absoluta y R: la constante universal de los gases.

$$A = 1,7 \cdot 10^{13}$$

$$E = 1.8 \cdot 10^4 \quad [\text{kcal/kmol}] \quad \text{Para la reacción de obtención del glicol de propileno.}$$

Por lo que se puede calcular el volumen del reactor de la siguiente forma:

$$\frac{\tau}{C_{A_0}} = \frac{X_A}{-r_A} \quad (43)$$

Donde:

$$\tau = \frac{V}{q} \quad (44)$$

V: el volumen en del reactor en m<sup>3</sup>

q: el flujo volumétrico en m<sup>3</sup>/h.

$$C_A = C_{A_0}(1 - X_A) \quad (45)$$

$$V = \frac{qX_A C_{A_0}}{-r_A} \quad (46)$$

Por lo tanto el cálculo del volumen del reactor se puede calcular de la siguiente forma de acuerdo con (Levenspiel, 1985):

$$V = \frac{qX_A}{k(1-X_A)} \quad (47)$$

El volumen del reactor se calculó por las ecuaciones anteriores y se introdujo en la simulación del reactor obteniéndose la conversión esperada.

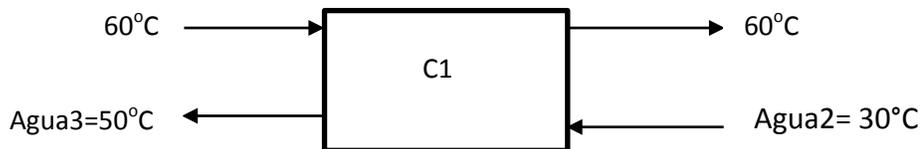
Para el diseño del intercambiador de calor del reactor se utilizó:

$$Q_{coolant} = U \cdot A \cdot \Delta t_{ml} \quad (48)$$

$$\Delta t_{ml} = (\Delta t_{mayor} - \Delta t_{menor}) / \ln (\Delta t_{mayor} / \Delta t_{menor}) \quad (49)$$

U = 850 W/m<sup>2</sup> °C según heurísticas 8 de la tabla 9.11 citada en el (Turton, 1998) para coeficientes de transferencia de calor en intercambiadores de agua-líquido.

Para calcular el  $\Delta t_{ml}$  se considerará un intercambiador de calor interno y como el reactor es de mezcla completa tiene la misma temperatura en todos los puntos del recipiente:



**Figura 2.6:** Esquema del intercambiador de calor del reactor .

Cálculo del consumo de agua de enfriamiento:

$$Q_{IC1} = W_{enf} \cdot C_{p_w} \cdot (t_2 - t_1) \quad (50)$$

$$C_{p_{Agua}} = 75.47 \text{ kJ/kg}^\circ\text{C}$$

$$\text{Agua2} = 30^\circ\text{C}$$

Agua3 = 50°C

### 2.6.3 Diseño de la columna de destilación de glicol de propileno.

Se aplica la metodología de Mc Cabe Thiele (Treybal , 1980). Se considera que la corriente de alimentación a la columna (S8) es de 2 componentes (glicol de propileno y H<sub>2</sub>O) dado el bajo contenido de óxido de propileno.

$$q = (H_a - H_{ba}) / (H_a - h_a) \quad (51)$$

q: es el calor necesario para convertir 1 mol de la mezcla de alimentación de su condición hasta un vapor saturado, dividido por el calor latente molar.

Donde:

H<sub>a</sub>: entalpía del vapor a la temperatura de rocío del alimento.

h<sub>a</sub>: entalpía del líquido a la temperatura de burbuja del alimento.

H<sub>ba</sub>: entalpía del líquido a la temperatura del alimento T(1).

Pendiente de la línea q:

$$m = q / (q - 1) \quad (52)$$

- Se trazaron las curvas de equilibrio (anexo#3), la línea q y se determinaron el reflujo mínimo y el de operación (R<sub>min</sub> y R<sub>op</sub>)
- $R_{op} = 1.2 * R_{min}$  (53)
- Se trazaron las líneas de enriquecimiento, agotamiento y se trazaron los platos o etapas teóricas y se señaló el plato de alimentación.
- Se calcularon el número de platos reales y el plato de alimentación real a partir de la eficiencia ( $\epsilon = 0.8$ ) según plantea la heurística 4 de la tabla 9-14 referida en el (Turton, 1998). Se simuló la columna a partir de estos resultados obteniéndose los valores esperados para el destilado y el residuo.
- Se calcularon los caudales internos de la torre tanto en la sección de enriquecimiento como de agotamiento.

$$V_n = (R_{op} + 1) * S_{10} \quad (54)$$

$$L_n = R_{op} * S_{10} \quad (55)$$

$$V_m = q * S_{8p} + R_{op} * S_{10} - S_{11} \quad (56)$$

$$L_m = V_m + S_{11} \quad (57)$$

### Diseño del condensador

Ln: líquido a temperatura de burbuja T(10)

Vn: vapor a temperatura de rocío Tr(10)

$$\Delta T_{ml} = ((T(10)-t_1)-(Tr(10)-t_2))/\ln((T(10)-t_1)/(Tr(10)-t_2)) \quad (58)$$

$$t_1=30 \text{ [}^\circ\text{C]}$$

$$t_2=50 \text{ [}^\circ\text{C]}$$

Se tomaron estas temperaturas ya que la heurística 3 de la tabla 9-13 de (Turton, 1998) da un rango de temperatura para condensadores de 30°C-50°C.

$$A_c = Q_c / (U * \Delta T_{ml}) \quad [\text{m}^2] \quad (59)$$

Nota:  $Q_c$  se determina en el HYSYS.

$$U = 850 \text{ [W/m}^2 \text{ }^\circ\text{C]}$$

Este valor fue tomado de la heurística 8 de la tabla 9-11 citada en (Turton, 1998) para intercambiadores de calor, agua – líquido.

$$W_{enf} = Q_c / (C_{p_w} * (t_2 - t_1)) \quad [\text{kg/h}] \quad (60)$$

### Diseño del rehervidor

$$A_r = Q_r / (U * \Delta T_m) \quad [\text{m}^2] \quad (61)$$

$$U = 850 \text{ [W/m}^2 \text{ }^\circ\text{C]}$$

Este valor fue tomado de la heurística 8 de la tabla 9-11 del (Turton, 1998) para intercambiadores de calor, agua – líquido.

$$\Delta T_m = T_{\text{vapor}} - T(11) \quad (62)$$

$$\text{Vapor a } P = 28 \text{ [bar]}$$

$$T_{\text{vapor}} = 230 \text{ [}^\circ\text{C]}$$

Los siguientes datos fueron tomados de la heurística 8 de la tabla 9-18 del (Turton, 1998) para utilidades.

$$M_{\text{vapor}} = Q_r / \lambda_{\text{cond}} \quad [\text{kg/h}] \quad (63)$$

Nota:  $Q_r$  se determinó en HYSYS.

### Diámetro de la columna

$$\rho_G = 273.15 / (22.4 * T(11)) \quad [\text{kmol/m}^3] \quad (64)$$

T(11) en [K]

$$Q_G = V_m / (\rho_G * 3600) \quad [m^3/s] \quad (65)$$

Velocidad permisible de gas

$$v_m = K_v * ((\rho_{mL} - \rho_{mG}) / \rho_{mG})^{0.5} \quad [pie/s] \quad (66)$$

$$\rho_{mG} = \rho_G * MM_{\text{ácido acético}} \quad [kg/m^3] \quad (67)$$

$\rho_{mL}$ : HYSYS para S11

Espaciado  $t = 0.5$  [m] heurística 1 tabla 9-14 según (Turton, 1998).

$$v_{\text{vapor}} = 0.8 v_m \quad [m^2/s] \quad (68)$$

$$A = Q_G / v_{\text{vapor}} \quad [m^2] \quad (69)$$

$$D = (4 * A / \pi)^{0.5} \quad [m] \quad (70)$$

El diámetro de la columna fue determinado mediante la utilidad *tray sizing* de HYSYS.

$$\text{Altura de la columna} = N^{\circ} \text{platos reales} * \text{espaciado} \quad [m] \quad (71)$$

$$\text{Altura del plato de alimentación} = \text{Plato real de alimentación} * \text{espaciado} \quad (72)$$

Todos los resultados se pueden observar en el HYSYS en un módulo lógico (spreadsheet) en el que fueron diseñados los equipos.

#### 2.6.4 Cálculo del área del intercambiador de calor IC1:

$$QE1 = U * A * \Delta t_{ml}$$

$$\Delta t_{ml} = (\Delta t_{\text{mayor}} - \Delta t_{\text{menor}}) / \ln (\Delta t_{\text{mayor}} / \Delta t_{\text{menor}})$$

$U = 850 \text{ W/m}^2 \text{ } ^{\circ}\text{C}$  según heurísticas 8 de la tabla 9.11 citada en el (Turton, 1998) para coeficientes de transferencia de calor en intercambiadores de calor.

Para calcular el  $\Delta t_{ml}$  se considerará un intercambiador de calor a contra corriente:

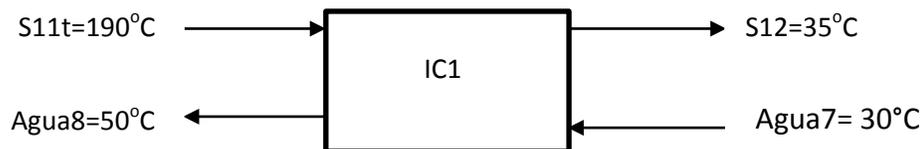


Figura 2.7: Esquema del intercambiador de calor IC1 .

#### Cálculo del consumo de agua de enfriamiento:

$$Q_{IC1} = W_{enf} * C_{p_w} * (t_2 - t_1) \quad (73)$$

$$C_{p_{\text{Agua}}} = 75.47 \text{ kJ/kg}^\circ\text{C}$$

Agua7 = 30°C según heurísticas 9 de la tabla 9.18 citada en el (Turton, 1998) para agua de enfriamiento en un rango de 27-32 °C.

Agua8 = 50°C según heurísticas 9 de la tabla 9.18 citada en el (Turton, 1998) para agua de enfriamiento en un rango de 45-52 °C.

### 2.6.5 Diseño de la bomba P-1.

A la bomba P-1 entra la corriente S8 y sale S8. Esta bomba eleva la presión de 0.9729 bar a 1.50 bar que es la presión necesaria para cuando pase por la tubería y sufra una caída de presión entre a la presión del plato de alimentación de la torre. No ocurren cambios en el flujo y composiciones de las corrientes S8 y S8t.

La carga de la bomba se determina mediante la siguiente expresión:

H<sub>b</sub>: Carga de la bomba

P: Presión de la corriente.

ρ: Densidad de la sustancia.

g: Aceleración de la gravedad en Cuba (9.8m/s<sup>2</sup>).

q: Flujo volumétrico.

η: Eficiencia de la bomba, esta eficiencia fue tomada de la heurística 6 de la Tabla 9.9 del Turton.

$$H_b = \frac{P_{8p} - P_8}{\rho * g} \quad (74)$$

Donde:

Presión (P<sub>8p</sub>)= 1.60 bar = 160 kPa

Presión (P<sub>8</sub>)= 0.9887 bar = 98.87 kPa

S<sub>8p</sub> y S<sub>8</sub> su densidad se estima en HYSYS.

El consumo de potencia se determina por:

$$Pot = \frac{H_b * q * \rho * g}{\eta} \quad (75)$$

Donde:

$$q = \frac{S_{8p} * MM_{8p}}{3600 * \rho} \quad (76)$$

η = eficiencia de la bomba ≈ 0, 75 según la heurística 4 de la Tabla 9.9 de (Turton, 1998).

La carga y la potencia de la bomba se determinan en la simulación de HYSYS.

### 2.6.6 Diseño de la bomba P-2.

A la bomba P-2 entra la corriente S11 y sale S11p. Esta bomba eleva la presión de 1.172 bar a 1.350 bar que es la presión necesaria para enviar la corriente producto hacia el tanque de almacenamiento. No ocurren cambios en el flujo y composiciones de las corrientes S11 y S11p.

$$H_b = \frac{P_{11p} - P_{11}}{\rho * g} \quad (77)$$

Donde:

Presión (P11p)= 1.350 bar = 135 kPa

Presión (P11)= 1.172 bar = 117.2 kPa

S11p y S11 su densidad se estima en HYSYS.

El consumo de potencia se determina por:

$$Pot = \frac{H_b * q * \rho * g}{\eta} \quad (78)$$

Donde:

$$q = \frac{S_{11p} * MM_{11p}}{3600 * \rho} \quad (79)$$

$\eta$  = eficiencia de la bomba  $\approx 0,75$

La carga y la potencia de la bomba se determinan en la simulación de HYSYS.

## 2.7 Análisis económico.

### 2.7.1 Cálculos de los costos de adquisición de equipos totales:

Para el cálculo de los costos de adquisición de los equipos se utilizaron las ecuaciones aplicadas en diferentes proyectos de curso de Ingeniería de Procesos (Dang Le Thu, y otros, 2007) las cuales fueron determinadas en la Universidad de Valencia a partir de los datos de costos publicados por la revista Chemical Engineering.

**Costo de los tanques (Óxido de propileno, H<sub>2</sub>O y Glicol de Propileno).**

$$C_{adq} = 688.623 * V_{tanque}^{0.54} * \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1968}} \quad (80)$$

Donde:

$V_{\text{tanque}}$ : Volumen del tanque (Óxido de propileno, H<sub>2</sub>O y Glicol de propileno) [m<sup>3</sup>]

Ic: Índice de costo. anexo #7

### Costo del Reactor cinético.

Se calculó el costo del tanque del reactor y el intercambiador de calor y se sumaron los dos y se obtuvo el costo del reactor total.

$$C_{\text{tanque del reactor}} = 688.623 * V_{\text{tanque del reactor}}^{0.54} * \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1968}} \quad (81)$$

$$C_{\text{adq } C1} = 550.9 * A_{C1}^{0.58} * \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1968}} \quad (82)$$

$$C_{\text{total del reactor}} = C_{\text{tanque del reactor}} + C_{\text{adq } C1} \quad [\$] \quad (83)$$

Donde:

$A_{IC}$ : Área del intercambiador de calor C1 [m<sup>2</sup>]

V: Volumen del tanque del reactor [m<sup>3</sup>]

### Costo de la columna de glicol de propileno.

$$C_{\text{adq}} = C_{\text{columna}} + C_{\text{platos}} + C_{\text{rehervidor}} + C_{\text{condensador}} \quad (84)$$

$$C_{\text{columna}} = 550.89 * D^{1.03} * \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1968}} \quad (85)$$

Donde:

D: Diámetro de la columna. [m]

$C_{\text{adq}}$ : Costo de adquisición. [\\$]

$$C_{\text{platos}} = 278.44 * D^{1.1} * \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1988}} * N^{\circ} \text{Platos} \quad (86)$$

Donde:

$N^{\circ}$  Platos: Número de platos reales

D: Diámetro de la torre [m]

$$C_{\text{rehervidor}} = 485.02 * \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1968}} * A_r^{0.58} \quad (87)$$

Donde:

$A_r$ : Área del rehervidor de la torre de acetona [m<sup>2</sup>]

$$C_{condensador} = 550.89 * \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1968}} * A_c^{0.58} \quad (88)$$

Donde:

$A_c$ : Área del condensador de la torre de acetona [m<sup>2</sup>]

**Costo del Intercambiador de calor (enfriador1) (E1).**

$$C_{adq\ enf1} = 550.9 \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1968}} * A_{enf1}^{0.58} \quad (89)$$

Donde:

$A_{IC}$ : Área del intercambiador de calor E1 [m<sup>2</sup>]

**Costo del Intercambiador de calor (calentador1) (C1).**

$$C_{adq\ c1} = 550.9 \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1968}} * A_{C1}^{0.58} \quad (90)$$

Donde:

$A_{IC}$ : Área del intercambiador de calor C1 [m<sup>2</sup>]

**Costo del Intercambiador de calor (calentador2) (C2).**

$$C_{adq\ c2} = 550.9 \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1968}} * A_{C2}^{0.58} \quad (91)$$

Donde:

$A_{IC}$ : Área del intercambiador de calor C2 [m<sup>2</sup>]

**Costo de las bombas (1 y 2).**

Como las potencias de las dos bombas son menores que 18000 watt el costo se calcula por la siguiente ecuación:

$$C_{adq} = 281.44 * \frac{I_c^{2011}}{I_c^{1988}} * P^{0.11} \quad (92)$$

Donde:

P: Potencia que requiere la bomba [Watt]

Se puede calcular el costo de adquisición total de la planta de la siguiente manera:

$$C(C_{adq\ total}) = \sum C_{adq\ equipos} \quad (93)$$

Donde:

C ( $C_{adq.total}$ ): Costo de adquisición total [\$]

$C_{adq,equipos}$ : Costo de adquisición de los equipos que conforman la planta [\\$]

### 2.7.2 Cálculo de la inversión total o inmovilizado total.

La determinación del costo de la inversión teniendo en cuenta cada uno de sus componentes se realizó haciendo uso del Método de Lang, un método corto, de rápida estimación y evaluación, que permite situarse en el orden de la magnitud del costo de inversión de la planta en una alternativa dada mediante el cual se establece el costo de la misma a partir del costo de su equipamiento principal. Algunos autores reportan que el factor de Lang para plantas que procesan fluidos puede variar entre 3.58 y 5.05 por lo que en realidad la aplicación de este método puede generar resultados que se desvían de la realidad apreciable (Brizuela, 1987). Según (Perry, 2008) un factor aceptable es 4; siendo entonces:

Inversión:

$$I = 4 * \sum C_{adq,equipos} \quad (94)$$

Donde:

**I: Inversión [\\$]**

La Inversión está compuesta por el capital fijo y el capital circulante:

$$I = CF + CC \quad (95)$$

El capital circulante es 0.15-0.20 del capital fijo planteado por (Turton, 1998):

$$I = CF + (0.15 * CF) \quad (96)$$

$$I = CF(0.15 + 1)$$

$$CF = \frac{I}{1.15}$$

$$CC = I - CF$$

Donde:

CF: Capital fijo.

CC: Capital circulante.

### 2.7.3 Cálculos de los indicadores económicos:

**Depreciación, Mantenimiento, Seguros:** 17 % de la inversión.

$$C_{DMS} = 0.17 * I \quad (97)$$

C<sub>DMS</sub>: Costo de depreciación, mantenimiento y seguros.

### **Materia prima.**

$$C_{\text{óxido de propileno}} = F_{\text{óxido de propileno}} * C_{u_{\text{óxido de propileno}}} * 24 \frac{\text{h}}{\text{día}} * 335 \frac{\text{día}}{\text{año}} \quad (112)$$

$$C_{\text{H}_2\text{O}} = F_{\text{H}_2\text{O}} * C_{u_{\text{H}_2\text{O}}} * 8040 \frac{\text{h}}{\text{año}} \quad (98)$$

Donde:

C<sub>u</sub> (óxido de propileno): Costo unitario del óxido de propileno [\$/año]

C<sub>u</sub> (H<sub>2</sub>O): Costo unitario del agua de proceso [\$/año]

F<sub>óxido de propileno</sub>: Flujo de óxido de propileno [kg/h]

F<sub>H<sub>2</sub>O</sub>: Flujo de agua [kg/h]

C<sub>óxido de propileno</sub>: Costo del óxido de propileno [\$/kg]

C<sub>H<sub>2</sub>O</sub>: Costo del agua de proceso [\$/kg]

### **Costo del agua de enfriamiento total.**

$$C_{\text{H}_2\text{Oenfriamiento}} = \sum F_{\text{H}_2\text{O}} * C_{u_{\text{H}_2\text{O}}} * 8040 \frac{\text{h}}{\text{año}} \quad (99)$$

Donde:

C<sub>u<sub>H<sub>2</sub>O</sub></sub>: Costo unitario del H<sub>2</sub>O de enfriamiento [\$/m<sup>3</sup>]

F<sub>H<sub>2</sub>O</sub>: Flujo de agua de enfriamiento [m<sup>3</sup>/h]

### **Vapor de agua total.**

$$C_{\text{vapor}} = \sum F_{\text{vapor}} * C_{u_{\text{vapor}}} * 8040 \frac{\text{h}}{\text{año}} \quad (100)$$

Donde:

C<sub>u<sub>vapor</sub></sub>: Costo unitario del vapor a 28 atm [\$/kg]

F<sub>vapor</sub>: Flujo de vapor [kg/h]

### **Electricidad.**

$$C_{\text{electricidad}} = \sum (\text{Pot1} + \text{Pot2}) * C_{u_{\text{electricidad}}} * 8040 \frac{\text{h}}{\text{año}} \quad (101)$$

Donde:

Pot1: Potencia de la bomba P-1 [watt]

Pot2: Potencia de la bomba P-2 [watt]

Cu<sub>electricidad</sub>: Costo unitario de electricidad [\$/kWatt-h]

**Costo de mano de obra**

$$C_{\text{mano de obra}} = N * C_{u_{\text{mano de obra}}} * 8040 \frac{\text{h}}{\text{año}} \quad (102)$$

Donde:

N: Volumen de producción [Ton/año]

Cu<sub>mano de obra</sub>: Costo unitario de la mano de obra [\$/kg producto]

**Valor de la producción.**

$$V_p = C_{u_{\text{glicol de propileno}}} * N \quad (103)$$

Donde:

Vp: Valor de producción [\$/a]

Cu<sub>glicol de propileno</sub>: Costo unitario del glicol de propileno [\$/kg]

**Costo de producción total.**

$$C_p = C_F + C_V \quad (104)$$

Donde:

Cp: Costo de producción total [\$/año]

C<sub>F</sub>: Costos fijos [\$/año]

C<sub>v</sub>: Costos variables [\$/año]

Tabla 2.7.1: Precios utilizados.

Precios	Unidades	Valor
Oxido de propileno	\$/kg	1.388
Agua de proceso	\$/kg	$4 \cdot 10^{-5}$
Glicol de propileno	\$/kg	1.259
Agua de enfriamiento	\$/kg	$7.9 \cdot 10^{-5}$
Vapor	\$/kg	$8.65 \cdot 10^{-3}$
Electricidad	\$/kWh	0.065
Mano de obra	\$/kg	0.0299

Precios tomados de: (AllChem Industries, 2012) y (IChem Education Subject Group, 2012).

**Ganancia.**

$$G = V_p - C_p \quad (105)$$

G: ganancia                      [\$/año]

**Rentabilidad.**

$$R = \frac{G}{C_p} * 100 \quad (106)$$

Donde:

R: rentabilidad porcentual [%]

**Costo por peso de producción.**

$$C/\$ = \frac{C_p}{V_p} \quad (107)$$

Donde:

C/\$: costo por peso de producción, debe ser <1.

**Costo unitario del producto.**

$$C_{u_{\text{producto}}} = \frac{C_p}{F_{\text{glicol de propileno/año}}} \quad (108)$$

Donde:

$Cu_{\text{producto}}$ : costo unitario del producto. [\$/kg]

**Retorno de la inversión.**

$$Rn = \frac{G_{\text{bruta}}}{I_{\text{total}}} * 100 \quad (109)$$

Donde:

Rn: retorno de la inversión. [%]

**Plazo de recuperación de la inversión.**

$$PRI = \frac{CF}{G+A} \quad (110)$$

$$A = \frac{CF}{t_d} \quad (111)$$

Donde:

PRI: Plazo de recuperación de la inversión. [año]

A: Amortización. [\$/año]

$t_d$ : Tiempo de vida útil de la planta = 10años.

## 2.8 Proceder metodológico para la aplicación del HAZOP.

El HAZOP tiene como fin describir los diferentes riesgos a que está expuesta la planta, el cual tiene como objetivo plantear las palabras guías que pueden influir en el proceso de forma negativa planteado por (Garza, 2007), este método también presenta las posibles desviaciones que se producirán, las causas, las posibles consecuencias y las acciones a seguir para solucionar el problema.

A continuación se ofrece en la Figura 8.1 la secuencia de aplicación de la técnica:

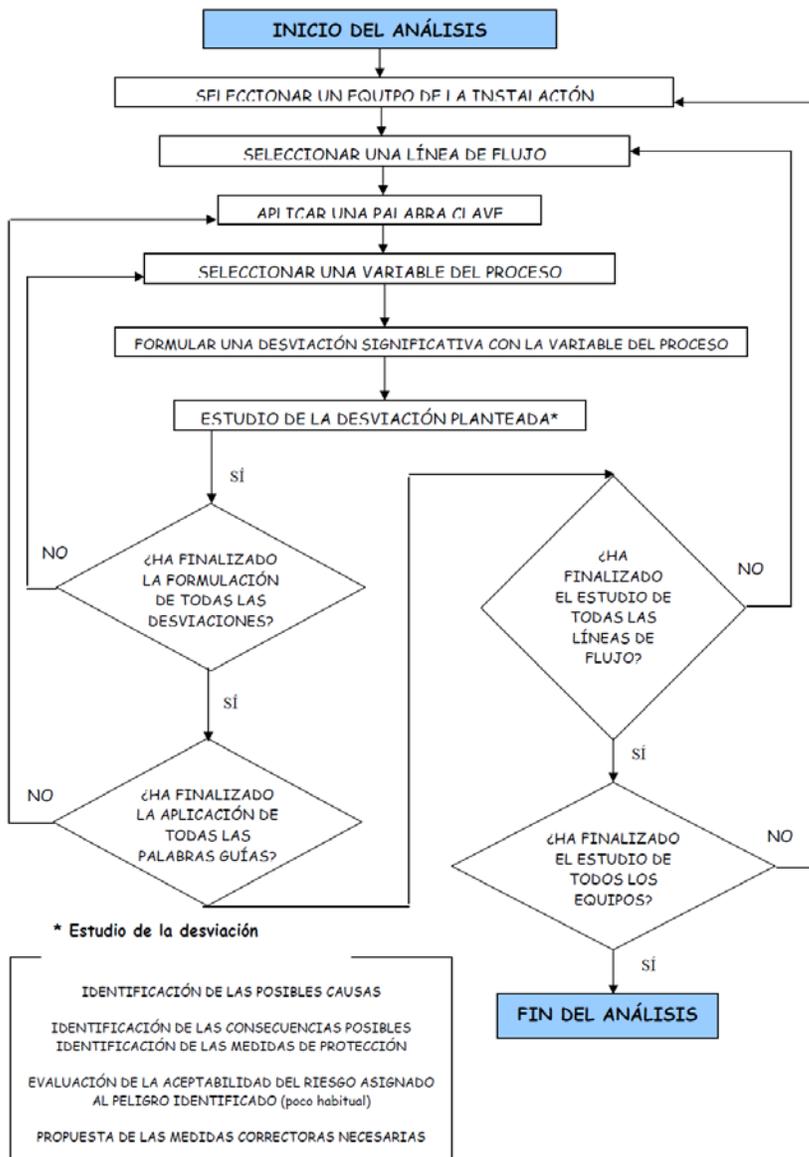


Figura 2.8: Proceder metodológico para la aplicación del HAZOP.

Las palabras guías mencionadas se explican en la Tabla 8.1.

Tabla 8.1 **Palabras guías que se utilizan para la aplicación de las técnicas de HAZOP.**

Palabra Guía.	Significado.	Ejemplo de desviación.	Ejemplo de causas originadoras.
NO	Ausencia de la variable a la cual se aplica	No hay flujo en una línea.	Bloqueo: fallos de bombeo, válvula cerrada o atascada.  Fuga: válvula abierta, fallo de control.
MÁS	Aumento cuantitativo de una variable.	Más flujo (Más caudal)	Presión de descarga reducida; succión presurizada; controlador saturado; fuga; lectura errónea de instrumentos.
		Más temperatura	Fuegos exteriores; bloqueo; puntos calientes; explosión en reactor; reacción descontrolada.
MENOS	Disminución cuantitativa de una variable.	Menos caudal	Fallo de bombeo; fuga; bloqueo parcial; sedimentos en línea; falta de carga; bloqueo de válvulas.
		Menos temperatura	Pérdidas de calor; vaporización; venteo bloqueado; fallo de sellado.
INVERSO	Analiza la inversión en el sentido de la variable. Se obtiene el efecto contrario al que se pretende.	Flujo inverso.	Fallo de bomba; sifón hacia atrás; inversión de bombeo; válvula antirretorno que falla o está insertada en la tubería de forma incorrecta.
ADEMÁS DE	Aumento cualitativo. Se obtiene algo más que las intensiones del diseño.	Impurezas o una fase extraordinaria.	Entrada de contaminantes del exterior como aire, agua o aceites; productos de corrosión; fallo de aislamiento; presencia de materiales por fugas

			interiores; fallos de la puesta en marcha.
PARTE DE	Disminución cualitativa. Parte de lo que debería ocurrir sucede según lo previsto.	Disminución de la composición en una mezcla.	Concentración demasiado baja en la mezcla; reacciones adicionales; cambio en la alimentación.
DIFERENTE DE	Actividades distintas respecto a la operación normal.	Cualquier actividad	Puesta en marcha y parada; pruebas e inspecciones; muestreo; mantenimiento; activación del catalizador; eliminación de tapones; corrosión; fallo de energía; emisiones indeseadas etc.

**(Casal, 2001).**

Realizando el análisis de los cambios que indican las palabras guías, se elabora la tabla HAZOP correspondiente al proceso o a una parte del mismo (Turton, 1998). Esta tabla debe contener la información siguiente:

- Palabra guía
- Desviación
- Causas
- Consecuencias
- Acción

## Capítulo III: Análisis de los resultados obtenidos.

### 3.1 Análisis de los balances de masa.

Se calcularon todos los flujos y composiciones para todas las corrientes los cuales se muestran en el anexo #4. El flujo y la calidad del producto final es la requerida. Se apreció la importancia de la corriente de recirculación S10a que eleva la conversión en el reactor y la corriente de purga S10b que permite extraer el óxido de propileno que no reacciona. Los balances realizados dan la información necesaria para el cálculo de los costos de materia prima y del valor de la producción. La corriente de purga S10b constituye el residual del proceso, tiene un flujo másico de 104.94 kg/h lo cual representa una fuente de contaminación. Esta corriente está compuesta principalmente por agua con 0.8982 en fracción molar y 0.1018 de óxido de propileno.

### 3.2 Análisis de los balances de energía.

Se calcularon las temperaturas y entalpías para todas las corrientes tal como se muestra en el anexo #4. También se determinó los calores intercambiados en los diferentes equipos los cuales sirvieron de base para el diseño de los mismos y el cálculo del consumo y el costo de las utilidades de este proceso (agua de enfriamiento, Vapor). Se obtuvo además el consumo de potencia en las bombas pues se utilizó para determinar el costo de la energía eléctrica consumida. El mayor consumo de agua de enfriamiento es en el reactor debido a que la reacción es extremadamente exotérmica por lo que se necesita un flujo mayor del agua de enfriamiento que los demás intercambiadores de calor.

### 3.3 Análisis del diseño de equipos.

Los equipos de la planta fueron diseñados según la metodología explicada en el Capítulo II. En la tabla 3.1 se muestra un resumen del resultado del diseño de los equipos:

Tabla3.3.1: **Resultado del diseño de los equipos.**

Resultado del diseño de los equipos			
	Área	Agua	Vapor
	m <sup>2</sup>	kg/h	kg/h
<b>Intercambiadores de calor</b>			
C1 del reactor	24	66186	
C2 condensador	4.515	16405	
E1 rehervidor	5.218		1925
IC1 del producto	20.22	29813	

	<b>Total</b>	<b>112404</b>	<b>1925</b>
<b>Reactor, Volumen m<sup>3</sup></b>	7.929		
	<b>Platos reales</b>	<b>Altura, m</b>	<b>Diámetro,m</b>
<b>Columna Destilación</b>	13	6.5	0.7620
<b>Tanques de almacenamiento</b>	<b>Volumen,m3</b>	<b>Diámetro,m</b>	<b>Altura,m</b>
Oxido de propileno	896.2	5.02	15.07
Agua	240.7	3.24	9.72
Glicol de propileno	947.1	5.11	15.35
<b>Bombas</b>	<b>Potencia, kW</b>		
Bomba 1	0.1091		
Bomba 2	0.04257		
Potencia total , kW	0.15167		

Como se puede observar en la Tabla 3.1 el intercambiador de calor de mayor área y flujo de agua de enfriamiento es el del reactor, debido a que la reacción que se produce dentro del mismo es extremadamente exotérmica por lo que eleva la temperatura de la mezcla dentro del reactor.

El intercambiador de calor E1, rehervidor de la columna, utiliza vapor a presiones de 28 bar debido a que la temperatura del mismo es de 230°C y en la heurística 8 de la tabla 9-18 para utilidades según (Turton, 1998). Para el diseño de la columna de destilación en un principio se determinaron 10 platos ideales y la alimentación en el plato 5, pero después de aplicar una eficiencia y caída de presión en cada plato como se plantea en la heurística del (Turton, 1998) mencionada en el Capítulo II en el epígrafe de diseño de equipos dividimos la cantidad de platos ideales entre la eficiencia normada y da 13 platos reales y la alimentación en el plato 7, la columna tiene una altura de 6.7m y un diámetro de 0.7620m. El diámetro fue tomado de la utilidad *tray sizing* de HYSYS, por lo que se puede apreciar que es una columna relativamente pequeña, esto influye en que el costo de la columna no sea tan elevado en comparación con otras columnas presentes en otros procesos.

El plato de alimentación tiene una elevación de 3.5m por lo que se necesita una bomba que eleve el flujo proveniente del reactor hasta el plato de alimentación. El reactor se comporta como un reactor de mezcla completa, el volumen se muestra en la Tabla 3.1 y el área del intercambiador de calor también se encuentra en la misma tabla, el volumen del

mismo y la temperatura de 60°C regulada por el intercambiador de calor conlleva a que se obtenga un conversión del 97.73%. Esto demuestra que el volumen calculado es el correcto para obtener una buena conversión.

Las bombas utilizadas para enviar el fluido hacia la columna y al tanque de almacenamiento del producto tienen una potencia pequeña, esto se explica por la baja caída de presión existente en cada sistema y justifica el bajo costo de las mismas. El valor de la potencia se encuentra en la Tabla 3.1. Los tramos de tubería se diseñaron por la heurística para velocidades de líquidos que deben ser de 0.5-2.5 m/s en tuberías de presión de la tabla 1-1 del (Pavlov, 1981). Debido a que los flujos de estos líquidos en las tuberías son relativamente bajas los diámetros de ellas no pasan de 2 pulgadas. Las tuberías se consideraron aisladas por lo que al calor intercambiado (*Duty*) se le dio valor de cero.

Dado el tamaño de los equipos diseñados para esta planta se estima que la misma puede ser instalada en un área de aproximadamente 32 m por 32 m, o sea 1000 m<sup>2</sup>. Esta planta puede ser instalada de forma anexa a otro proceso industrial que suministre las utilidades necesarias (agua de enfriamiento, vapor, electricidad).

### **3.4 Resultados de los estudios de simulación.**

#### **3.4.1 Variación de la temperatura en el reactor**

Se estudiaron los efectos de la variación de la temperatura en el reactor sobre las siguientes variables:

1. Flujo de calor transferido en el reactor (*coolant*).
2. Conversión en el reactor.
3. Flujo másico de producto (S11).
4. Flujo másico total del agua de enfriamiento en el proceso (Agua 1).

Se realizó un Caso de Estudio para la temperatura en el reactor entre los límites 55-95°C con un incremento de 5°C.

El flujo de calor disminuye a medida que aumenta la temperatura dentro del reactor debido a que es necesario transferir menor cantidad de calor disminuyendo de  $1.34 \cdot 10^6$  hasta  $1.22 \cdot 10^6$  kcal/h.

La conversión aumenta a medida que crece la temperatura debido que el aumento de esta favorece la velocidad de la reacción. La conversión se incrementa desde 96.5 hasta 99.5%. A partir de 75°C que se alcanza el 99%, los incrementos en la misma son menores.

El flujo másico de producto (S11) aumenta a medida que crece la temperatura ya que el aumento de esta favorece la conversión, formándose mayor cantidad de glicol de

propileno. El flujo másico (S11) se incrementa desde 5126 hasta 5181 kg/h. A partir de 75°C que se alcanza el valor de 5172 kg/h, los incrementos en la misma son mínimos.

Flujo másico total del agua de enfriamiento en el proceso (Agua 1) disminuye a medida que aumenta la temperatura dentro del reactor por lo que es necesario transferir menor cantidad de calor en el reactor. Estos cambios no incrementan el consumo de agua de enfriamiento de otros equipos, por esto flujo másico total del agua de enfriamiento en el proceso (Agua 1) muestra esta disminución. Esta variable disminuye desde  $1.145 \cdot 10^5$  hasta  $1.03 \cdot 10^5$  kg/h de forma prácticamente lineal.

### **3.4.2 Variación del factor de separación en el divisor 2.**

Se estudiaron los efectos de la variación del factor de separación en el divisor 2 para la corriente de purga S10b sobre las siguientes variables:

1. Flujo másico de la corriente de reciclo S10a.
2. Conversión en el reactor.
3. Conversión Global.
4. Flujo másico de producto (S11).

Se realizó un Caso de Estudio para el factor de separación en el divisor 2 entre los límites 0.25 hasta 0.5 con un incremento de 0.0025. Se escogió este rango debido a que para valores menores de 0.25 el programa de simulación reportaba estado fallido.

El flujo másico de la corriente S10a disminuye a medida que aumenta el factor de separación debido a que sale mayor cantidad por la corriente de purga y menos por la de reciclo disminuyendo de 297.09 hasta 131.09 kg/h de forma prácticamente lineal.

La conversión aumenta a medida que crece el factor de separación debido a que el aumento de este disminuye el flujo de la corriente de reciclo con lo que aumenta la concentración de la sustancia limitante óxido de propileno, lo que produce un incremento en la velocidad de la reacción. La conversión se incrementa desde 97.64 hasta 97.73%. Puede apreciarse que el aumento es muy ligero.

La conversión global disminuye y aumenta el factor de separación debido a que la corriente de purga (S10b) aumenta con lo cual se pierde mayor cantidad de óxido de propileno. Esta variable disminuye desde 99.39% hasta 98.85% de forma prácticamente lineal.

El flujo másico de producto (S11) disminuye a medida que aumenta el factor de separación debido a que la corriente de purga (S10b) aumenta con lo cual se pierde mayor cantidad de óxido de propileno y disminuye la conversión global del proceso. Esta variable disminuye desde 5152kg/h hasta 5124kg/h de forma prácticamente lineal. Es de señalar que la disminución es muy leve.

### 3.5 Resultados del análisis económico.

El balance económico de la planta fue realizado por el método anteriormente mencionado en el Capítulo II seguidamente se pondrán algunas de las tablas de los resultados obtenidos:

Tabla 3.5.1: **Costo de adquisición e inversión.**

<b>Costos</b>	<b>\$</b>
<b>Costo de adquisición total de equipos</b>	159600.22
<b>Inversión total</b>	638400.88
<b>Capital Fijo</b>	555131.20
<b>Capital Circulante</b>	83269.68

Como se aprecia en la Tabla 3.1 la inversión de la planta es en el orden de los cientos de miles de pesos por lo que se puede decir que es una inversión mediana, esto es provocado por los bajos costos de adquisición de los equipos y componentes según las dimensiones de los mismos, los cuales se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 3.5.2: **Costo de adquisición de los equipos.**

<b>Equipos</b>	<b>Inversión</b>	<b>\$</b>
<b>Columna de glicol de propileno</b>	Columna	2146.75
	Platos	5293.57
	Rehervidor	6519.46
	Condensador	6809.93
	Total	20769.72
<b>Reactor cinético</b>	Tanque del reactor	10860.44
	Intercambiador de calor C1	1794.24
	Total	12654.69
	Intercambiador de calor	1624.45

<b>Otros componentes</b>	IC1	
	Bomba P-1	810.40
	Bomba P-2	726.54
	Tanque de óxido de propileno	48776.34
	Tanque de H <sub>2</sub> O	23983.85
	Tanque de glicol de propileno	50254.19
	Total de los componentes	126175.77
<b>Total</b>	Total	159600.18

Estos valores se deben a que la planta no necesita grandes columnas de destilación para separar el glicol de propileno de los demás componentes, los intercambiadores de calor son pequeños ya que en el proceso no se necesita grandes cambios de temperaturas todas las corrientes se mantienen líquidas, no hay calores latentes, por lo que no se necesita grandes flujos de calor y esto conlleva a que el área de los mismos sea pequeña, las bombas usadas en el proceso tienen una potencia muy baja.

Tabla 3.5.3: **Costos anuales.**

<b>Costos Anuales</b>	<b>\$/a</b>	<b>Estructura de costo %</b>
Amortización o depreciación	$5.551 \cdot 10^4$	
Depreciación, Mantenimiento, Seguro	$1.085 \cdot 10^5$	0.2377
Materia Prima. Óxido de propileno	$4.410 \cdot 10^7$	96.6023
Materia Prima. H <sub>2</sub> O	418.1	0.0009
Agua de Enfriamiento	$7.140 \cdot 10^4$	0.1563
Vapor de Calentamiento	$1.339 \cdot 10^5$	0.2933
Energía eléctrica	81.73	0.00017
Mano de obra	$1.237 \cdot 10^6$	2.7090
Costo total de producción	$4.565 \cdot 10^7$	100

En la tabla anterior se aprecia que el costo de materia prima correspondiente es el que mayor peso tiene dentro de la estructura de costo, seguido por el costo de salarios. La Amortización o depreciación toma el valor de 55513.12 \$/año.

Tabla 3.5.4: **Indicadores económicos de la producción.**

Indicadores económicos	Valor	Unidades
Valor de Producción (VP)	$5.206 \cdot 10^7$	\$/año
Ganancia (G)	$6.407 \cdot 10^6$	\$/año
Rentabilidad (R)	14.03	%
Costo unitario del Producto (Cup)	1.104	\$/kg
Costo por peso (C/P)	0.8769	-

La tabla preliminar muestra que el valor de la ganancia obtenida es positivo y elevado. Está en el orden de las decenas de millones, lo que quiere decir que el valor de la producción con relación al costo total es mayor. La rentabilidad es buena debido a que la relación ganancia entre el costo total es del 13.66%. Además se observa que producir 1kg de glicol de propileno cuesta 1.104 \$ lo que es inferior al precio de venta del producto. El costo por peso da una cifra menor que uno lo que evidencia la eficiencia económica de este proceso.

Tabla 3.5.5: **Indicadores de la eficiencia económica de la inversión.**

Indicadores de la inversión	Valor	Unidades
Retorno	1004	%
Plazo de recuperación Inv.	$8.59 \cdot 10^{-2}$	Años

El retorno es bueno porque la ganancia obtenida es mucho mayor que la inversión por esto sobre pasa el 100%. La inversión se va a recuperar en un plazo de menos de un mes debido a los valores de la ganancia. Estos valores demuestran que se recupera la inversión a partir del primer mes de trabajo. Por lo que se llega a la conclusión de que el proceso es económicamente rentable en todos los indicadores calculados.

### 3.6 Análisis del HAZOP.

Tablas de resultados del análisis de riesgos por HAZOP

Tabla 3.6.1: **HAZOP de la columna de destilación del glicol de propileno:**

Palabra guía	Desviación	Causas	Consecuencias	Acción
No	Flujo de alimentación a la columna.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Mala operación de la bomba P-1,</li> <li>• Averías en las tuberías.</li> <li>• Mala lectura de equipos de medición.</li> <li>• Obstrucción de las tuberías.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Provoca que no halla agua para satisfacer el flujo de la recirculación hacia el mezclador.</li> <li>• No se podrá obtener producto por el fondo de la columna.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Parar el proceso.</li> <li>• Revisar cada equipo y accesorios</li> <li>• Reparar o cambiar los equipos y/o accesorios deteriorados.</li> <li>• Limpiar tuberías de posibles incrustaciones.</li> </ul>
Menos	Flujo de alimentación a la columna.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Mala operación de alguno de los siguientes equipos: bomba P-1</li> <li>• Averías en las tuberías.</li> <li>• Mala lectura de equipos de medición.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Induce a que haya menos producto.</li> <li>• Provoca a que por el tope de la columna no salga el suficiente flujo para satisfacer la recirculación al mezclador y afecte la conversión en el reactor.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Revisar cada equipo y accesorios nombrados.</li> <li>• Reparar o cambiar los equipos y/o accesorios deteriorados.</li> </ul>

Más	Flujo de alimentación a la columna y/o reciclo de operación.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Mala operación de la bomba que no regula el flujo adecuado en la entrada de la torre.</li> <li>• Mala lectura de equipos de medición.</li> <li>• Un nivel elevado del flujo del reciclo proveniente de la columna.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Puede inducir el fenómeno de inundación en la columna, impidiendo la transferencia de masa.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Disminuir el Flujo de alimentación a la columna y/o reciclo de operación.</li> <li>• Cambiar o reparar equipos, bombas, accesorios en mal estado.</li> <li>• Para el proceso si fuera necesario.</li> </ul>
Más	Temperatura del fondo.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Excesivo calentamiento en el rehervidor.</li> <li>• Líquido en la zona de agotamiento de la columna.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Provoca que luego en el intercambiador de calor E-1, el fluido no se enfríe hasta la temperatura deseada y que posteriormente en el tanque de almacenamiento ocurra deterioramiento debido a las altas temperaturas.</li> <li>• Induce a que la mayor parte del líquido que sale por el fondo sea recirculado al último plato.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ajustar el flujo de vapor de agua en el rehervidor hasta los valores deseados.</li> <li>• Revisar, reparar y/o remplazar válvulas y/o flujómetros.</li> </ul>
Menos	Reciclo de operación.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Problemas en el condensador de la columna.</li> <li>• Mala lectura de equipos de medición.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Puede que la columna trabaje con valores de reflujo de operación iguales o incluso inferiores al reflujo de operación mínimo, provocando que disminuya o no exista la transferencia de masa, aumentando de esta manera los problemas ambientales</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Revisar, reparar y/o remplazar flujómetros.</li> <li>• Para la planta si fuera necesario.</li> </ul>

No	Flujo de agua en el condensador.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Mal funcionamiento de válvulas, flujómetros y/o equipo de bombeo de agua.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Impide la transferencia de masa, pues no se va a producir la condensación del vapor de tope y por tanto tampoco va a haber reflujo.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Revisar, reparar y/o remplazar flujómetros y/o equipo de bombeo del líquido.</li> </ul>
Menos	Flujo de agua en el condensador.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Mal funcionamiento flujómetros y/o equipo de bombeo de agua.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dificulta la transferencia de masa, pues la condensación del vapor de tope no va a ser eficiente y por tanto el reflujo va a ser inferior.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Revisar, reparar y/o remplazar flujómetros y/o equipo de bombeo del agua.</li> </ul>
Más	Presión en la columna.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aumento del vapor de la zona de agotamiento.</li> <li>• Problema en la abertura de válvulas.</li> <li>• Tupiciones.</li> <li>• Mala lectura de equipos.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Dificulta la transferencia de masa, pues traslada el equilibrio de la mezcla.</li> <li>• Provoca derrames o salideros por la uniones en la columna.</li> <li>• Explosión del equipo.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Parar el proceso, revisar, reparar y/o remplazar flujómetros y/o bridas.</li> </ul>
Además de	Falta hermeticidad en el cierre del equipo.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Mal estado de los elementos de sellado.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Escape de los gases al exterior.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Parar el proceso y reparar y ajustar los elementos de sellado.</li> </ul>

Tabla 3.6.2: HAZOP del reactor:

Palabra guía	Desviación	Causas	Consecuencias	Acción
No	Flujo de alimentación.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Obstrucción y dificultades en las tuberías de alimentación o en el mezclador</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Disminución total de la conversión.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Parar el proceso.</li> <li>• Revisar cada equipo y accesorios</li> <li>• Reparar o cambiar los equipos y/o accesorios deteriorados.</li> <li>• Limpiar tuberías de posibles incrustaciones.</li> </ul>
Menos	Flujo de agua de enfriamiento	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Menor flujo desde la torre de enfriamiento.</li> <li>• Distribución incorrecta del agua de enfriamiento.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Elevación importante de la temperatura dentro del reactor.</li> <li>• Peligro de ebullición del líquido dentro del reactor.</li> <li>• Elevación de la temperatura del agua de enfriamiento con afectación a otros equipos.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Revisar el sistema de alimentación de agua de enfriamiento</li> <li>• Disminuir los flujos de alimentación al reactor.</li> </ul>
Más	Temperatura	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Disminución de agua de enfriamiento.</li> <li>• Incrustación de la superficie de intercambio de calor.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Peligro de ebullición del líquido dentro del reactor.</li> <li>• Afectación del funcionamiento de la columna de destilación.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Revisar el sistema de alimentación de agua de enfriamiento</li> <li>• Parada del proceso y limpieza de la superficie de intercambio.</li> </ul>

Al realizarse un análisis de riesgo por HAZOP se llegó a la conclusión de que tanto la torre como el reactor pueden ocasionar daños en el proceso. Se observó que las desviaciones que más afectan al proceso están relacionadas con el flujo de alimentación a la columna, debido a que si existiera alguna anomalía afecta directamente en la obtención del producto de interés y a la columna, pero también si no se revisa constantemente el flujo de agua de enfriamiento en el condensador y el vapor en el rehervidor puede afectar directamente al reciclo perturbando el flujo de alimentación hacia el mezclador antes del reactor y repercutir en la conversión, pero también induce efecto sobre la corriente de producto ya que no se va a lograr un buena calidad del mismos.

El reactor tiene como variables de riesgos más importante el flujo de entrada y el flujo de calor del intercambiador de calor del reactor ya que si este no mantiene las condiciones fijadas puede tener consecuencia directa en la conversión de la reacción. Estas variables son las que presentan mayor riesgo en el proceso por lo que se debe controlar con un período mayor que las demás.

## Conclusiones:

1. El simulador de procesos HYSYS resultó una importante herramienta para el diseño de la planta de glicol de propileno, ya que permitió a través de la simulación realizada obtener los balances de masa y energía así como el diseño de los equipos y el análisis económico de la planta haciendo uso de los múltiples módulos y herramientas disponibles en este software.
2. Mediante el balance de masa realizado se determinaron los flujos y composiciones de todas las corrientes; de tal forma que el consumo de materias primas en el proceso es de 3951.7 kg/h de óxido de propileno y 1300kg/h de agua para producir 5144.46 kg/h de glicol de propileno y se eliminan 104.94 kg/h de residual líquido.
3. Mediante el balance de energía realizado se determinaron las temperaturas y energías de todas las corrientes así como los calores intercambiados en los diferentes equipos a partir de lo cual se calculó el consumo de utilidades del proceso: 103038kg/h de agua de enfriamiento, 1473.1kg/h de vapor y 0.15 kW de energía eléctrica.
4. Con los equipos cuyas dimensiones han sido determinadas en este trabajo es posible lograr la producción necesaria, siendo estas dimensiones de capacidades medianas y de instalación factible.
5. La inversión necesaria para poner en funcionamiento esta planta se ha estimado en 638400.88 \$, el costo de producción total es de 45650544.41 \$/año y la eficiencia económica está dada por un costo por peso de 0.8769 y un plazo de recuperación de la inversión de 0.0859 años por lo que se recomienda acometer este proyecto de inversión.
6. Se realizó el análisis de HAZOP de la planta previsto anteriormente, en el cual se decretó que las variables que más influyen en el proceso son: flujo de alimentación a la columna, flujo de agua de enfriamiento en el condensador, vapor en el rehervidor, flujo de entrada al reactor, flujo de calor del intercambiador de calor del reactor. Se determinó realizar un control más periódico a estas variables que a las demás.

**Recomendaciones:**

1. Implementar la simulación de la planta de glicol de propileno en versiones más modernas de HYSYS que ofrecen nuevas facilidades y herramientas.
2. Estudiar y proponer posibles métodos de tratamientos para la corriente de residual purga S10b.
3. Realizar estudios de optimización para variables de importancia en el proceso como por ejemplo la temperatura en el reactor y el factor de separación en el divisor 2 para la purga.

## Bibliografía

1. **AEA Technology-Hyprotech. 2000.** *Tutorial*. s.l. : AEA Technology, 2000.
2. **AllChem Industries. 2012.** Current Price Industries. [En línea] 2012. [Citado el: 13 de 5 de 2012.] <http://www.allchem.com>.
3. **Aspen Technology. 2008a.** *Aspen HYSYS Documentation and Operations Guide*. 2008a.
4. —. **2008b.** *Aspen Plus Documentation and Operations Guide*. 2008b.
5. **Aucejo , Antonio. 1999.** *Introducció a l'Enginyena Quimica*. Barcelona : Bliiblioteca Universitaria, 1999. ISBN 84-7306-556-5.
6. **Boehm, R.F. 1997.** *Developments in the Design of Thermal Systems*. 1997.
7. **Brizuela, Enrique. 1987.** *Aspectos fundamentales del diseño de plantas industriales*. s.l. : ISPJAE, 1987.
8. **Casal, J. 2001.** Análisis de Riesgo en Instalaciones Industriales. [En línea] 4 de diciembre de 2001. [Citado el: 20 de febrero de 2012.] <http://www.google.com/cu/search?client=firefox-a&rls=org.mozilla%3AenUS%3Aofficial&channel=s&hl=es19&source=hp&q=an%C3%A1lisis+de+riesgo+en+instalaciones+industriales%2CCasal&meta=&btnG>.
9. **Chemstations. 2006.** CHEMCAD. [En línea] 2006. [Citado el: febrero de 20 de 2012.] <http://www.chemstations.net>.
10. **Cultip, M.P y Shacham, M. 1999.** *Problem solving in chemical engineering with numerical methods*. s.l. : ISBN, 1999.
11. **Dang Le Thu, Minh, Acosta Alfonso, Anett y Alonso Pedroso , Yaíma. 2007.** *DISEÑO DE UNA PLANTA DE ANHIDRIDO ACETICO*. Química e Ingeniería Química, Universidad de Matanzas. Matanzas : s.n., 2007. Proyecto de Curso.
12. **Dolberg, Fernando. 2007.** Hoja de seguridad de materiales. [En línea] 9 de abril de 2007. [Citado el: 13 de marzo de 2012.] <http://www.proquimsa.com>.
13. *Don't Gamble with Physical Properties*. **Carlson, E.C. 1996.** octubre de 1996, Chemical Engineering Progress.
14. **DOW. 2011.** Dow. [En línea] Dow, 1 de junio de 2011. [Citado el: 3 de mayo de 2012.] <http://www.dow.com/productsafety/finder/prog.htm>.
15. **Elliott y Lira. 1999.** *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. s.l. : Prentice Hall, 1999.

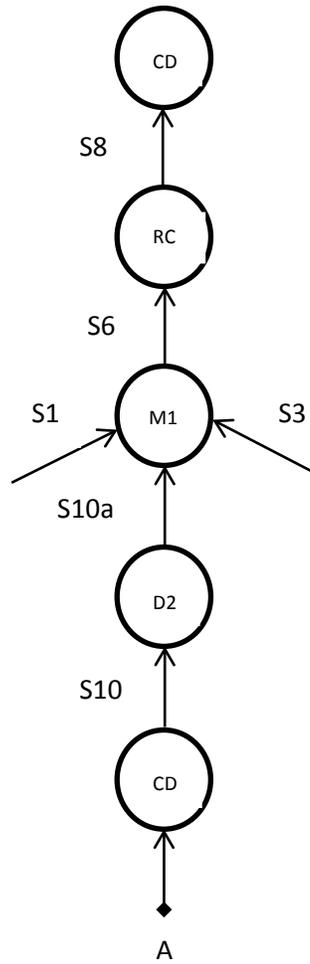
16. **Folger, H.Scott. 2002.** *Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas*. s.l. : PEARSON Educación, 2002.
17. **Garza, Roberto. 2007.** *Análisis de los métodos complejos cualitativos para evolución del riesgo de incendio*. 2007.
18. **Himmelblau, D.M. 1997.** *Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química*. s.l. : Prentice Hall Hispanoamericana, 1997. Vol. 6.
19. **IChem Education Subject Group. 2012.** Chemical Cost Guide. [En línea] 2012. [Citado el: 13 de 5 de 2012.] <http://ed.icheme.org>.
20. **INSHT. 2009.** Documentación toxicológica del Glicol de Propileno. [En línea] 20 de febrero de 2009. [Citado el: 3 de marzo de 2012.] [http://www.buenastareas.com/ficha/toxicológica/glicol de propileno/603214.html](http://www.buenastareas.com/ficha/toxicologica/glicol%20de%20propileno/603214.html).
21. **Kamaruddin, A.H. 2003.** *An Introduction to Chemical Engineering Simulation*. s.l. : Aspen HYSYS, 2003.
22. **Klaus, W.H. 1999.** *Química Orgánica Industrial*. s.l. : REVERTÉ, 1999.
23. **Levenspiel, Octave. 1985.** *Ingenierías de las reacciones químicas*. Habana : ENPES, 1985.
24. **López, Y. 2007.** *Desarrollo de un modelo riguroso para el control de un ciclo de vapor*. Centro de Estudio de Combustión y Energía UMCC. 2007. Tesis presentada en opción al título de Máster en Termodinámica Industrial.
25. **Mallinckrodt Chemicals. 2001.** Material Safety Data Sheet: Propylene Glycol. *Material Safety Data Sheet*. [En línea] 2 de noviembre de 2001. <http://www.mallchem.com>.
26. **Martínez, V.H. 2000.** *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*. Ciudad México : Plaza y Valdés, 2000.
27. **Nalco Energy Services. 2012.** Material Safety Data Sheet. *Nalco Energy Services*. [En línea] 2012. <http://www.nalco.com>.
28. **ONEWORLD. 2009.** ONEWORLD Investments Limited. [En línea] 8 de octubre de 2009. [Citado el: 12 de mayo de 2012.] <http://www.oneworld.com>.
29. **Ortega, Darién. 2010.** *Obtención de un modelo de simulación riguroso para la toma de decisiones en un Ciclo Combinado de Turbina de Gas*. Ingeniería Química, Universidad de Matanzas. Matanzas : s.n., 2010. Trabajo de Diploma.
30. **Pavlov, K F. 1981.** *Problemas y ejemplos para el curso de operaciones básicas y aparatos en tecnología química*. s.l. : Mir, 1981.
31. **Perry, Robert H. 2008.** *Chemical Engineers' Handbook*. La Habana : Revolucionaria, 2008.

32. **PG sector group of Cefic. 2011.** Propylene-glycol web site. [En línea] 10 de febrero de 2011. [Citado el: 25 de abril de 2012.] <http://www.propylene-glycol.com/index.php/what-is-propylene-glycol/production>.
33. **Potapov, V.M. y Tatarinchik, S.N. 1979.** *Química Orgánica*. Moscú : Mir 527p, 1979.
34. **Pretides, DP y Koulouris. 2002.** *The Role of Process Simulation in Pharmaceutical Process Development and Product Commercialization*. 2002.
35. **Primo Yúfera, Eduardo. 1988.** *Química Orgánica Básica y Aplicada*. s.l. : REVERTÉ, 1988.
36. **Ray, Martyn. 1999.** *Chemical Engineering Desing Project*. 2 da. s.l. : Gordon & Breach Science, 1999.
37. **REPSOL. 2010.** Repsol. [En línea] Repsol, 25 de enero de 2010. [Citado el: 10 de marzo de 2012.] <http://www.repsol.com/es/en/productos-servicios/quimica/Nuestros-productos/Glicoles/default.aspx>.
38. **Rodríguez, N. 2001.** *Informática Aplicada a la Ingeniería de Procesos I: Modelado y Optimización*. 2001.
39. **Sax, Irving. 1968.** *Dangerous properties of Industrial material*. s.l. : ediciones revolucionarias, 1968. pág. 521.
40. **Scenna, N. 1999.** *Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos*. Argentina : s.n., 1999.
41. **Seader, J.D y Henley, Ernest J. 1998.** *Separation Process Principles*. New York : John and Wiley, 1998.
42. **Sega. 2003.** EndResult. [En línea] 2003. [Citado el: 28 de 3 de 2012.] <http://www.endresult.com>.
43. **Seider, J. 1998.** *Process design principles*. s.l. : J.Wiley & Sons, 1998.
44. **Services. 2000.** Services. [En línea] 2000. [Citado el: 12 de abril de 2012.] <http://www.adservice.com>.
45. **Treybal , Robert E. 1980.** *Operaciones con Transferencia de Masa*. Habana : Editorial Pueblo y Educación, 1980.
46. **Turton, R. 1998.** *Synthesis and Design of Chemical Processes*. New Jersey : Prentice Hall, PTR, 1998.
47. **Wikipedia. 2012.** Wikipedia. [En línea] 2012. [Citado el: 20 de 6 de 2012.] <http://es.wikipedia.org>.

48. **WinSim . 2006.** DESIGN II. [En línea] 2006. [Citado el: 28 de mayo de 2012.] [http:  
www.winsim.com/products/html](http://www.winsim.com/products/html).
49. **WinSim. 2004.** WinSim Inc. [En línea] WinSim Inc, 2004. [Citado el: 28 de mayo de 2012.] <http://www.winsim.com>.

## Anexos.

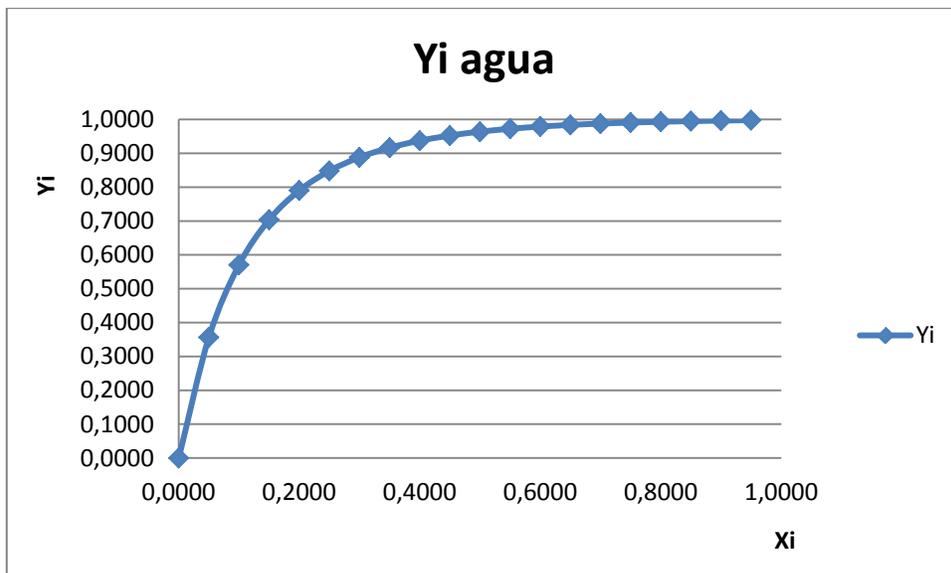
Anexo #1: Árbol de STEWARD.





### Anexo #3: Curvas de equilibrio.

Glicol de propileno-Agua.



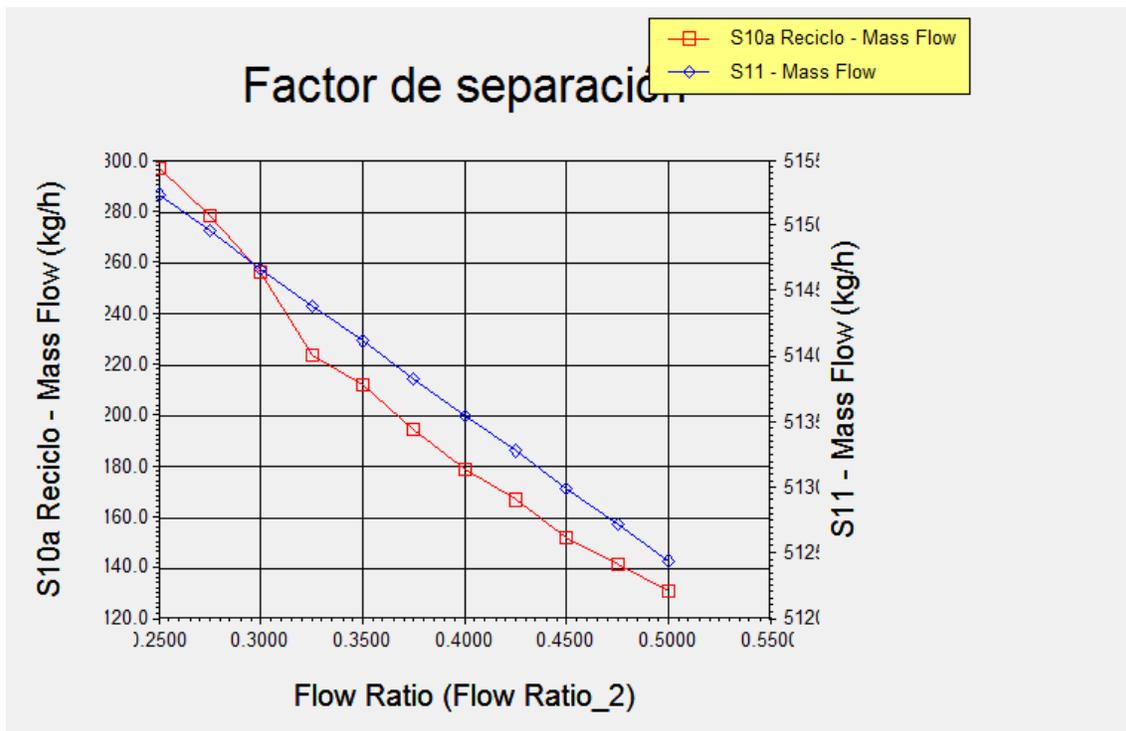
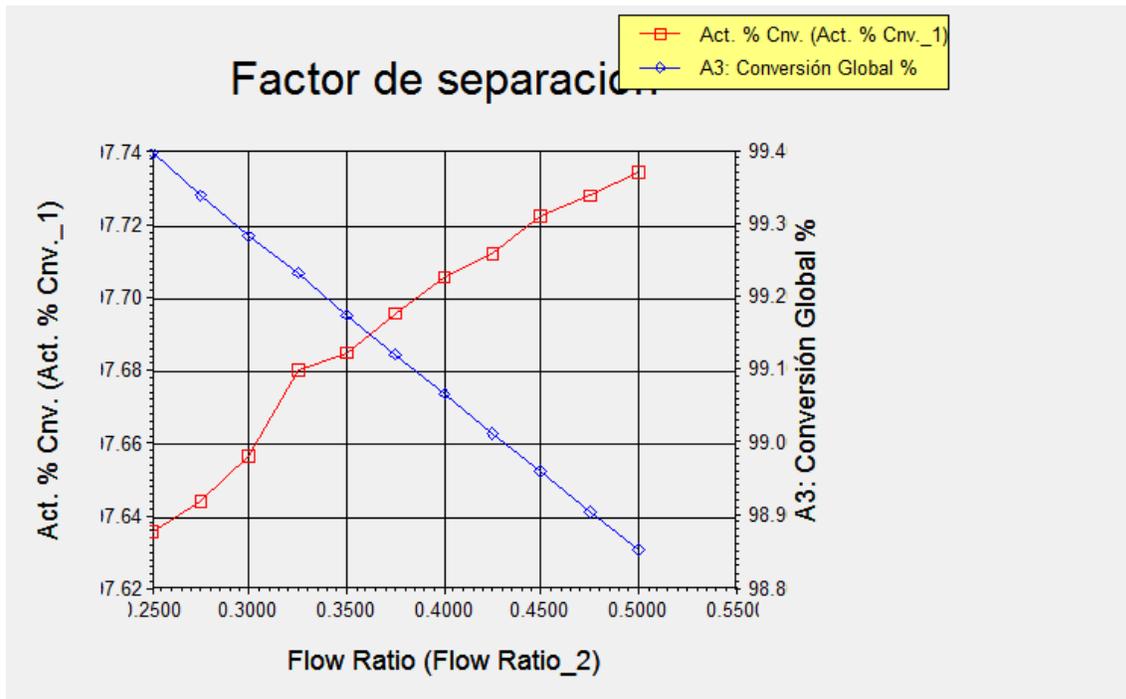
Anexo #4: Datos de las corrientes de la planta.

1	 U MCC Calgary, Alberta CANADA		Case Name: F:\Simulacion Final No tocar\Caso Base\CASO BASE FINAL NO TOCAR			
2			Unit Set: EuroSI			
3			Date/Time: Fri Jun 22 17:25:47 2012			
4						
5	<b>Workbook: Case (Main)</b>					
6	<b>Streams</b>					
7						
8						
9						
10						
11	Name	Prop Oxide	Agua E	S6	S7	S8
12	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000
13	Temperature (C)	23.89	23.89	24.87	60.00	60.00
14	Pressure (bar)	1.115	1.115	1.015	0.9729	0.9729
15	Molar Flow (kgmole/h)	88.04	72.18	151.3	0.0000	83.70
16	Mass Flow (kg/h)	3952	1300	5497	0.0000	5494
17	Liquid Volume Flow (m3/h)	4.730	1.303	6.291	0.0000	5.315
18	Heat Flow (kcal/h)	-1.968e+006	-4.915e+006	-7.590e+006	0.0000	-8.924e+006
19	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	-2.892e+004	-6.811e+004	-5.017e+004	-2.985e+004	-1.066e+005
20	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	1.0000	0.0000	0.4572	0.7953	0.0193
21	Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0228	0.8068
22	Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	1.0000	0.5428	0.1819	0.1740
23	Name	S10	S11	S1	S2	S3
24	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000
25	Temperature (C)	39.86	190.9	23.89	23.89	23.89
26	Pressure (bar)	1.034	1.172	1.115	1.115	1.115
27	Molar Flow (kgmole/h)	15.83	67.86	88.04	0.0000	72.18
28	Mass Flow (kg/h)	349.8	5144	3952	0.0000	1300
29	Liquid Volume Flow (m3/h)	0.3888	4.946	4.730	0.0000	1.303
30	Heat Flow (kcal/h)	-1.010e+006	-7.408e+006	-1.968e+006	0.0000	-4.915e+006
31	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	-6.382e+004	-1.092e+005	-2.892e+004	-2.220e+004	-6.811e+004
32	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.1018	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000
33	Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000	0.9950	0.0000	0.0000	0.0000
34	Comp Mole Frac (H2O)	0.8982	0.0050	0.0000	0.0000	1.0000
35	Name	S4	S14	S15	SS6	S10a Reciclo
36	Vapour Fraction	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0007
37	Temperature (C)	23.89	35.00	35.00	24.88	39.62
38	Pressure (bar)	1.115	1.014	1.014	0.9729	1.023
39	Molar Flow (kgmole/h)	0.0000	67.86	0.0000	151.2	11.08
40	Mass Flow (kg/h)	0.0000	5144	0.0000	5494	244.9
41	Liquid Volume Flow (m3/h)	0.0000	4.946	0.0000	6.288	0.2582
42	Heat Flow (kcal/h)	0.0000	-8.010e+006	0.0000	-7.587e+006	-7.073e+005
43	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	-5.758e+004	-1.180e+005	-9.236e+004	-5.017e+004	-6.382e+004
44	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.0000	0.0000	0.0000	0.4572	0.1018
45	Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000	0.9950	0.7990	0.0000	0.0000
46	Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	0.0050	0.2010	0.5428	0.8982
47	Name	S10b Purga	Agua2	Agua3	Agua4	Agua5
48	Vapour Fraction	0.0007	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
49	Temperature (C)	39.62	30.00	50.00	30.00	50.00
50	Pressure (bar)	1.023	1.013	1.013	1.013	1.013
51	Molar Flow (kgmole/h)	4.750	3674	3674	910.7	910.7
52	Mass Flow (kg/h)	104.9	6.619e+004	6.619e+004	1.641e+004	1.641e+004
53	Liquid Volume Flow (m3/h)	0.1106	66.32	66.32	16.44	16.44
54	Heat Flow (kcal/h)	-3.031e+005	-2.498e+008	-2.485e+008	-6.193e+007	-6.160e+007
55	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	-6.382e+004	-6.800e+004	-6.784e+004	-6.800e+004	-6.784e+004
56	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.1018	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
57	Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
58	Comp Mole Frac (H2O)	0.8982	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
59						
60						
61						
62						
63	Hyprotech Ltd.		HYSYS.Plant v2.2 (Build 3797)		Page 1 of 3	
	Licensed to: UMCC				* Specified by user.	

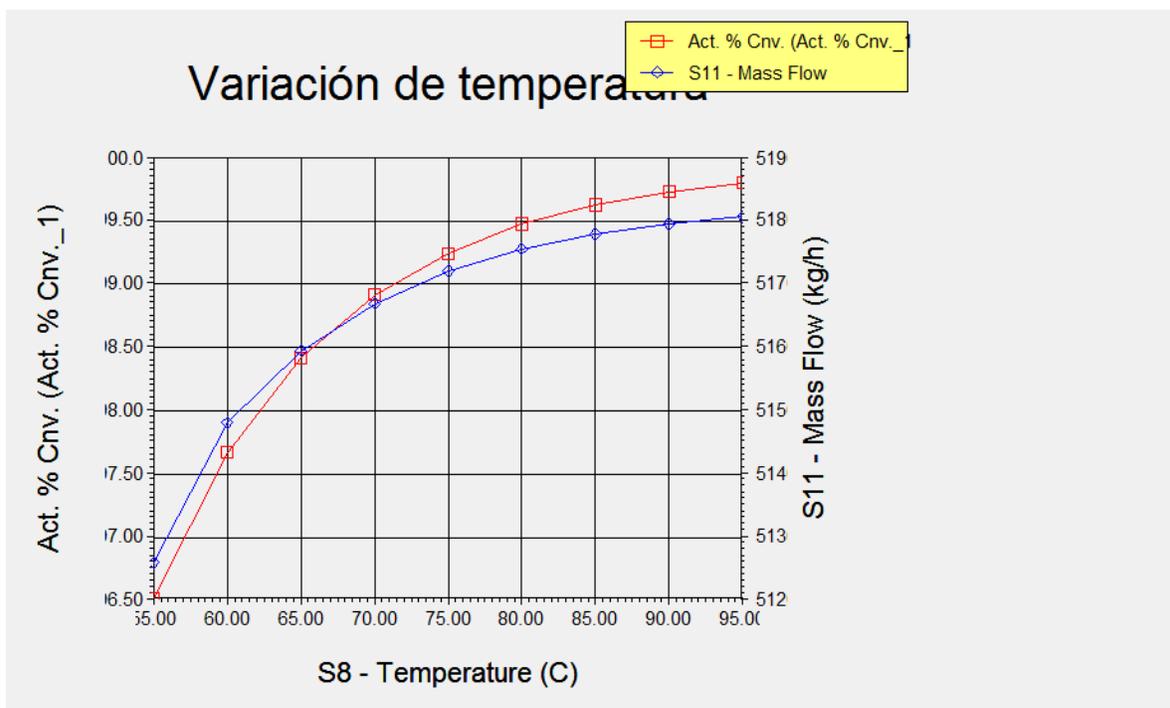
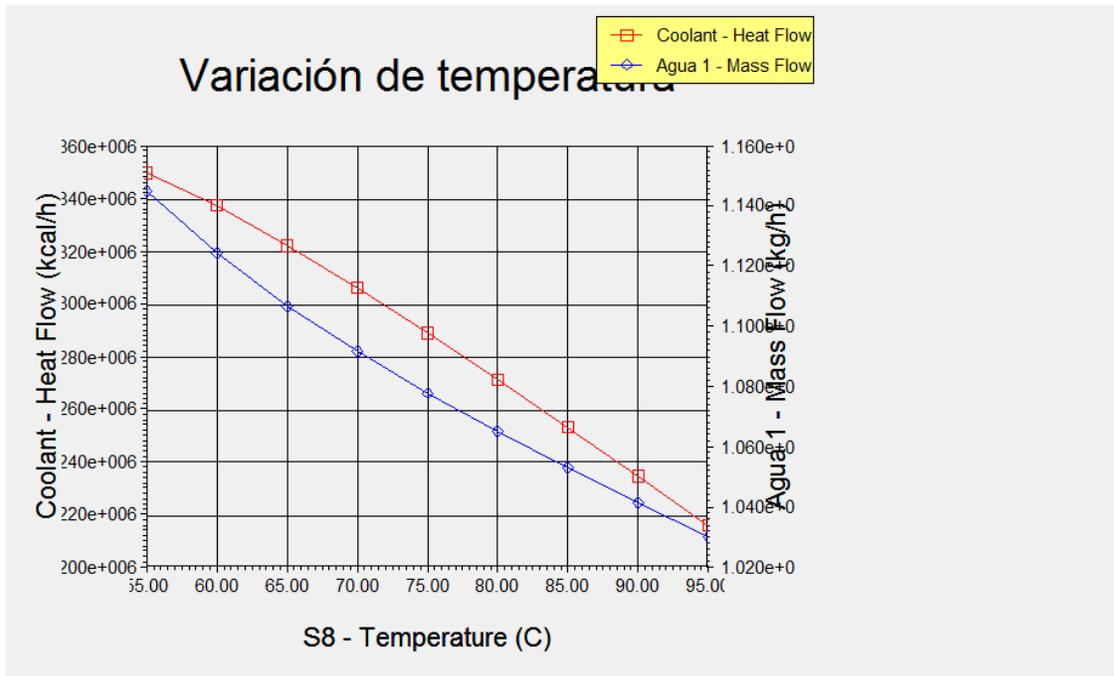
1	 UMCC Calgary, Alberta CANADA		Case Name: F:\Simulacion Final No tocar\Caso Base\CASO BASE FINAL NO TOCAR			
2			Unit Set: EuroSI			
3			Date/Time: Fri Jun 22 17:25:47 2012			
4						
5	<b>Workbook: Case (Main) (continued)</b>					
6	<b>Streams (continued)</b>					
7						
8						
9						
10						
11	Name	Vapor1	Agua6	S3t	S1t	S10at
12	Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0013
13	Temperature (C)	230.0	230.0	23.89	23.89	39.42
14	Pressure (bar)	28.00	28.00	1.094	1.044	1.015
15	Molar Flow (kgmole/h)	106.9	106.9	72.16	68.04	11.08
16	Mass Flow (kg/h)	1926	1926	1300	3952	244.9
17	Liquid Volume Flow (m3/h)	1.930	1.930	1.303	4.730	0.2582
18	Heat Flow (kcal/h)	-6.033e+008	-6.870e+008	-4.915e+008	-1.968e+008	-7.073e+005
19	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	-6.644e+004	-6.427e+004	-6.811e+004	-2.892e+004	-6.382e+004
20	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.1018
21	Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
22	Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.8982
23	Name	S6t	S8t	S8p	S10t	S11t
24	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0007	0.0000
25	Temperature (C)	24.87	60.02	60.01	39.62	190.9
26	Pressure (bar)	0.9734	1.500	1.121	1.023	1.314
27	Molar Flow (kgmole/h)	151.3	83.70	83.70	15.83	67.86
28	Mass Flow (kg/h)	5497	5494	5494	349.8	5144
29	Liquid Volume Flow (m3/h)	6.291	5.315	5.315	0.3888	4.946
30	Heat Flow (kcal/h)	-7.590e+008	-8.924e+008	-8.924e+008	-1.010e+008	-7.408e+008
31	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	-5.017e+004	-1.066e+005	-1.066e+005	-6.382e+004	-1.092e+005
32	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.4572	0.0193	0.0193	0.1018	0.0000
33	Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000	0.8068	0.8068	0.0000	0.9950
34	Comp Mole Frac (H2O)	0.5428	0.1740	0.1740	0.8982	0.0050
35	Name	S12	Agua7	Agua8	S11p	Agua9
36	Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
37	Temperature (C)	35.00	30.00	50.00	190.9	50.00
38	Pressure (bar)	1.014	1.013	0.7132	1.350	0.7132
39	Molar Flow (kgmole/h)	67.86	1655	1655	67.86	6239
40	Mass Flow (kg/h)	5144	2.981e+004	2.981e+004	5144	1.124e+005
41	Liquid Volume Flow (m3/h)	4.946	29.87	29.87	4.946	112.6
42	Heat Flow (kcal/h)	-8.010e+008	-1.125e+008	-1.119e+008	-7.408e+008	-4.220e+008
43	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	-1.180e+005	-6.800e+004	-6.764e+004	-1.092e+005	-6.764e+004
44	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
45	Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.9950	0.0000	0.0000	0.9950	0.0000
46	Comp Mole Frac (H2O)	0.0050	1.0000	1.0000	0.0050	1.0000
47	Name	Agua 1	Coolant	CondDuty	RebDuty	q3
48	Vapour Fraction	0.0000	---	---	---	---
49	Temperature (C)	30.00	---	---	---	---
50	Pressure (bar)	1.013	---	---	---	---
51	Molar Flow (kgmole/h)	6239	---	---	---	---
52	Mass Flow (kg/h)	1.124e+005	---	---	---	---
53	Liquid Volume Flow (m3/h)	112.6	---	---	---	---
54	Heat Flow (kcal/h)	-4.243e+008	1.337e+008	3.314e+005	8.375e+005	0.0000
55	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	-6.800e+004	---	---	---	---
56	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	0.0000	---	---	---	---
57	Comp Mole Frac (12-C3diol)	0.0000	---	---	---	---
58	Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	---	---	---	---
59						
60						
61						
62						
63	Hyprotech Ltd.		HYSYS.Plant v2.2 (Build 3797)		Page 2 of 3	
	Licensed to: UMCC				* Specified by user.	

1	 UMCC Calgary, Alberta CANADA		Case Name: F:\Simulacion Final No tocar\Caso Base\CASO BASE FINAL NO TOCAR			
2			Unit Set: EuroSI			
3			Date/Time: Fri Jun 22 17:25:47 2012			
4						
5	<b>Workbook: Case (Main) (continued)</b>					
6	<b>Streams (continued)</b>					
7						
8						
9						
10						
11	Name	q1	q10a	q6	q8	q10
12	Vapour Fraction	---	---	---	---	---
13	Temperature (C)	---	---	---	---	---
14	Pressure (bar)	---	---	---	---	---
15	Molar Flow (kgmole/h)	---	---	---	---	---
16	Mass Flow (kg/h)	---	---	---	---	---
17	Liquid Volume Flow (m3/h)	---	---	---	---	---
18	Heat Flow (kcal/h)	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *	0.0000 *
19	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	---	---	---	---	---
20	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	---	---	---	---	---
21	Comp Mole Frac (12-C3diol)	---	---	---	---	---
22	Comp Mole Frac (H2O)	---	---	---	---	---
23	Name	q11	Pot 2	Pot1		
24	Vapour Fraction	---	---	---		
25	Temperature (C)	---	---	---		
26	Pressure (bar)	---	---	---		
27	Molar Flow (kgmole/h)	---	---	---		
28	Mass Flow (kg/h)	---	---	---		
29	Liquid Volume Flow (m3/h)	---	---	---		
30	Heat Flow (kcal/h)	0.0000 *	36.37	98.18		
31	Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	---	---	---		
32	Comp Mole Frac (12C3Oxide)	---	---	---		
33	Comp Mole Frac (12-C3diol)	---	---	---		
34	Comp Mole Frac (H2O)	---	---	---		
35						
36						
37						
38						
39						
40						
41						
42						
43						
44						
45						
46						
47						
48						
49						
50						
51						
52						
53						
54						
55						
56						
57						
58						
59						
60						
61						
62						
63	Hyprotech Ltd.	HYSYS Plant v2.2 (Build 3797)			Page 3 of 3	
	Licensed to: UMCC				* Specified by user.	

Anexo #5: Resultados del caso estudio para el factor de separación en el divisor D2.



Anexo #6: Resultados del caso estudio para la temperatura en el reactor.



## Anexo #7: Índices de costos.

Tabla 1. TABULACIÓN DE LA VARIACIONES DE CEPCI (CHEMICAL ENGINEERING PLANT COST INDEX) DESDE 1950 HASTA EL 2009.

AÑO	CEPCI
1950	73,9
1953	84,7
1955	88,3
1958	99,7
1959	101,8
1960	102
1961	101,5
1962	102
1963	102,4
1964	103,3
1965	104,2
1966	107,2
1967	109,7
1968	113,6
1969	119
1970	125,7
1971	132,3
1972	132,3

AÑO	CEPCI
1973	144,1
1974	164,4
1975	182,4
1976	192,1
1977	204,1
1978	218,8
1979	238,7
1980	261,2
1981	297
1982	314
1983	316,9
1984	322,7
1985	325,3
1986	318,4
1987	323,8
1988	342,5
1989	355,4
1990	357,6

AÑO	CEPCI
1991	361,3
1992	358,2
1993	359,2
1994	368,1
1995	381,1
1996	381,7
1997	386,5
1998	389,5
1999	390,6
2000	394,1
2001	394,3
2002	395,6
2003	401,7
2004	442,2
2005	468,2
2006	499,6
2007	525,4
2008	575,4
2009	511,8

Anexo #8: Índices de costos, 2011.

