

TRABAJO FINAL DE INGENIERÍA QUÍMICA

**ESTUDIO DE PREFACTIBILIDAD PARA LA
PRODUCCIÓN DE ACETALDEHÍDO A PARTIR DE BIOETANOL**

**CUADRADO, MANUELA
KRUM, FRANCO
MESIANO, IAN
PÉREZ, PAULA**

**FACULTAD DE INGENIERÍA
UNIVERSIDAD NACIONAL DE MAR DEL PLATA
AÑO 2023**



RINFI se desarrolla en forma conjunta entre el INTEMA y la Biblioteca de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Mar del Plata.

Tiene como objetivo recopilar, organizar, gestionar, difundir y preservar documentos digitales en Ingeniería, Ciencia y Tecnología de Materiales y Ciencias Afines.

A través del Acceso Abierto, se pretende aumentar la visibilidad y el impacto de los resultados de la investigación, asumiendo las políticas y cumpliendo con los protocolos y estándares internacionales para la interoperabilidad entre repositorios



Esta obra está bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-
NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/).

TRABAJO FINAL DE INGENIERÍA QUÍMICA

**ESTUDIO DE PREFACTIBILIDAD PARA LA
PRODUCCIÓN DE ACETALDEHÍDO A PARTIR DE BIOETANOL**

**CUADRADO, MANUELA
KRUM, FRANCO
MESIANO, IAN
PÉREZ, PAULA**

**FACULTAD DE INGENIERÍA
UNIVERSIDAD NACIONAL DE MAR DEL PLATA
AÑO 2023**

“Nada en la vida es para ser temido, es sólo para ser comprendido. Ahora es el momento de entender más, de modo que podamos temer menos”
Marie Curie

Queremos agradecer nuestros directores: Norma Marcovich, Ezequiel Soulé, Julieta Castañer y Manuel García de la Mata, por su valiosa colaboración y por la dedicación que han prestado a nuestro trabajo final y a nuestra formación;

A la Facultad de Ingeniería, por abrirnos sus puertas y brindarnos la oportunidad de formarnos como profesionales. También a nuestros docentes, que dedicaron su tiempo a enseñarnos y acompañarnos a lo largo de este trayecto;

A nuestros familiares, por acompañarnos y apoyarnos en esta etapa de nuestra vida. Sin ellos no hubiera sido posible alcanzar esta meta;

A nuestros compañeros y amigos que nos llevamos de la facultad. Por hacer más ameno nuestro proceso de aprendizaje y nuestro paso por la institución.

Resumen ejecutivo

Este trabajo desarrolla el estudio de prefactibilidad para la producción de acetaldehído a partir de bioetanol. El objetivo principal de este trabajo es diseñar la planta productiva y así poder dimensionar los equipos involucrados, con el fin de realizar, posteriormente, un estudio de rentabilidad y decidir si es conveniente continuar con el estudio del proyecto.

En un principio, se selecciona la ruta química de producción: la deshidrogenación catalítica del etanol. La razón principal es que no se requiere de otro reactivo para que se lleve a cabo la reacción y, además, porque tiene como co-producto un compuesto de alto valor agregado: el hidrógeno. Dentro de los productos secundarios, también se obtiene acetato de etilo en proporciones apreciables. Con estos productos, se analizan las tendencias que tienen sus mercados en el país y en el mundo.

En lo que respecta al producto principal, se conoce que, a nivel nacional, el acetaldehído no se produce desde el año 2017, cuando la única empresa que lo elaboraba cerró sus puertas. En cambio, a nivel global, este mercado estuvo en alza los últimos años debido a que este producto es intermediario para la síntesis de otros compuestos importantes en la industria, tales como la piridina y sus bases, resinas poliméricas y tinturas (producidas a partir de acetaldehído), así como también es utilizado como conservante en la industria alimenticia. Respecto a los productos secundarios, para el hidrógeno se observa que tanto a nivel nacional como global, su mercado se encuentra en auge. Esto, debido a que es considerado vector energético y uno de los combustibles del futuro. Actualmente, todas las tecnologías para su producción se encuentran en constante desarrollo y perfeccionamiento, por lo que es un producto de gran interés en el mercado. Es conveniente, entonces, comercializar este subproducto para poder aumentar el beneficio obtenido por la venta de acetaldehído. El acetato de etilo, por su parte, presenta una estructura de mercado similar a la del acetaldehído: a nivel nacional, este compuesto dejó de producirse debido al cierre de la empresa productora hasta el momento; a nivel global, este compuesto es ampliamente utilizado en la industria de las pinturas y los adhesivos (entre otros rubros), y se prevé que en el futuro su demanda se incremente considerablemente. Dado que este producto tiene un precio de venta competitivo en el mercado, se decide comercializarlo y de esta manera obtener un mayor beneficio.

Para definir la capacidad de producción, se cuenta con datos de mercado del producto principal para el año 2020, siendo China uno de los principales consumidores a nivel mundial, con aproximadamente un 50 % del consumo total de acetaldehído para ese año. Por este motivo, y teniendo en cuenta las fuertes relaciones comerciales de Argentina con este país, se decide producir un 1,5 % de la cantidad consumida por China -según los datos obtenidos para ese año- obteniéndose un valor de capacidad a instalar de 8.500 Ton/año para producir acetaldehído al 99,7 % p/p de pureza. En cuanto a la localización de la planta, se concluye que es conveniente que la planta permanezca en el mismo lugar que la planta productora de bioetanol, en la provincia de Tucumán.

La planta se divide, convenientemente, en cuatro subplantas: una subplanta de acondicionamiento de reactivos, una subplanta de reacción, una de separación y una subplanta de licuación de hidrógeno, para su almacenamiento y posterior venta.

En el diseño del sistema de reactores se propone emplear un reactor de lecho fijo para llevar a cabo la reacción, debido a que resulta ser el más adecuado. Luego de un análisis de los posibles modelos a plantear para su diseño, se concluye que para esta etapa del proyecto la mejor decisión es elegir una opción que describa el proceso de la forma más precisa posible, sin necesidad de realizar cálculos y determinaciones demasiado complejas. Por lo tanto, se elige un modelo heterogéneo y unidimensional. Para contemplar los efectos de transporte en el reactor y dentro de las partículas del lecho, se cuenta con un factor de efectividad global, extraído de bibliografía. Esto permite simplificar los cálculos y aún así poder estimar correctamente los parámetros del reactor.

Con un análisis termodinámico, se obtiene que las condiciones óptimas de operación se dan a temperaturas altas, debido a que la reacción es endotérmica, y a presiones bajas, debido al cambio en el número de moles del sistema. Se fija entonces, una temperatura de operación de 285 °C y una presión de 1 bar, más un factor de seguridad, todo en concordancia con los estudios consultados, de donde se extrae la expresión cinética de la reacción. En base a la bibliografía estudiada, se toma una conversión de diseño del 50 % y un rendimiento para el producto principal del 90 %. El único producto secundario considerado fue el acetato de etilo.

Mediante el simulador de procesos Unisim Design™ se diseña el reactor en condiciones isotérmicas con las condiciones mencionadas y se obtiene un volumen de 2,258 m³. Luego, se simula su operación en las condiciones reales del proceso, en condiciones NINA debido a que las condiciones isotérmicas no son posibles de lograr. Para calefaccionarlo, se selecciona un fluido térmico capaz de soportar la temperatura del proceso.

Luego, debido a la desactivación del catalizador, se decide implementar un segundo reactor para llevar a cabo la reacción. De esta manera, mientras uno de ellos se encuentra en operación, el otro se regenera, obteniéndose ciclos de operación y regeneración alternados.

Una vez diseñado el sistema de reactores, se procede con el sistema de separación. La corriente que sale del reactor se encuentra en estado gaseoso y presenta cinco sustancias que deben ser separadas en mayor o menor medida: acetaldehído, acetato de etilo, hidrógeno, agua y etanol.

La corriente de salida del reactor ingresa a un destilador flash a presión atmosférica y con una temperatura de -20 °C. De esta manera, la corriente presenta dos fases fácilmente separables y se obtiene por tope una corriente rica en hidrógeno que posteriormente deberá ser purificada, dado que luego ingresa a una subplanta de licuación. Dicha purificación es posible empleando un absorbedor en el cuál se utiliza etanol recirculado al 99 % en masa como líquido absorbedor; gracias a la solubilidad que este compuesto presenta con el acetaldehído, el acetato de etilo y, por supuesto, con el etanol. Por el tope de la torre se obtiene el hidrógeno purificado y por el fondo se recuperan los demás componentes casi en su totalidad, siendo el acetaldehído el producto de mayor importancia.

Posteriormente, las corrientes de fondo del destilador flash y del absorbedor se unifican y se las introduce en un destilador de platos. Este equipo tiene como objetivo expulsar por el tope la mayor cantidad posible de acetaldehído, de modo que esa corriente presente un 99,7 % en masa de dicho compuesto. El fondo, por su parte, contiene las demás sustancias en mayor medida.

La separación del etanol y el acetato de etilo presenta gran dificultad debido a la formación de un azeótropo binario. Dado que éste azeótropo es sensible a la presión, se propuso un sistema de destiladores a distintas presiones, tal que el primero de ellos opera a 1 bar y el segundo a 15 bares. De esta manera, es posible lograr una corriente de etanol del 99 % en peso por el fondo del primer equipo y una corriente del 99 % en peso de acetato de etilo por el segundo.

Una vez diseñados todos los equipos críticos de la planta de producción de acetaldehído, se procede con los requerimientos de energía que requiere el proceso. En primer lugar, se presenta la integración energética y se introduce un método de integración ampliamente utilizado en el diseño de procesos químicos: el Método Pinch. Por medio de criterios heurísticos utilizados en este método, es posible establecer las distintas alternativas posibles que el proceso permite. En particular, se analizan siete de estas alternativas, de las cuales sólo una queda seleccionada para la integración: juntar a la corriente que sale del reactor, corriente caliente, con la corriente de etanol que debe evaporarse antes de entrar al reactor. El intercambiador resultante consiste en un rehervidor.

Una vez definida la integración energética, se busca separar a las corrientes restantes en frías y calientes, para acondicionar mediante corrientes de servicios auxiliares. Respecto a las frías, se utilizan dos fluidos calefactores. Por un lado, vapor de agua para aquellas corrientes por debajo de los 100 °C y, por otro lado, el fluido térmico utilizado en el reactor, para aquellas con mayor temperatura. Finalmente, se obtienen cuatro intercambiadores de calor adicionales. Respecto a las corrientes calientes, se decide utilizar un refrigerante, R-717, con su respectivo ciclo de refrigeración. Además, se analiza la posibilidad de utilizar agua de enfriamiento para refrigerar a las corrientes que así lo permitan. Luego de analizar ambas alternativas, se opta por utilizar ambos fluidos, el agua para aquellas corrientes que se encuentran por encima de su temperatura y el refrigerante para todas las demás. Esto da como resultado otros ocho intercambiadores, siendo el total en todo el proceso de catorce.

Respecto a los equipos auxiliares, se tienen en cuenta las calderas para el vapor de agua y el fluido térmico, las bombas críticas, forzadores de gas, válvulas reductoras de presión, el sistema de refrigeración y una torre de enfriamiento.

Como paso siguiente, se aborda el diseño de la subplanta de licuación de hidrógeno. Primero se analizan las distintas alternativas existentes para su almacenamiento y resulta que la licuación es la más conveniente para adaptar al proceso. Dentro de los métodos para licuar a este compuesto a nivel industrial, el más adecuado es el ciclo de Claude, por lo que se lo elige para el diseño de la subplanta.

Previo a la entrada al ciclo, la corriente de hidrógeno debe ser purificada en un 99,99 %, como mínimo, debido a que en el proceso de licuación se alcanzan temperaturas muy bajas y

congelaría cualquier impureza, obstruyendo luego los equipos. Por este motivo, se decide instalar un sistema de purificación denominado PSA, o adsorción por cambio de presión, que permite obtener purezas de hasta el 99,9999 %, siendo este uno de los métodos más utilizados a nivel industrial para este compuesto.

Para el diseño del ciclo, se estudian distintas variables operativas de los elementos principales del mismo: la válvula de expansión J-T, la turbina de expansión, los compresores e intercambiadores de calor. Se analizan las condiciones óptimas de funcionamiento de cada uno de ellos y finalmente se seleccionan aquellas que permiten aumentar la eficiencia del ciclo y la recuperación de hidrógeno líquido a la salida. Por último, se dimensionan los tanques de almacenamiento de este producto y se seleccionan de catálogo los equipos involucrados en el sistema.

Como último paso en el proyecto, se realiza un análisis de rentabilidad. Secuencialmente, se obtienen los distintos parámetros que permiten, finalmente, establecer si este resulta rentable o no, y extraer conclusiones acerca de su viabilidad en el futuro.

En primer lugar, se determinan los costos de inversión, como los gastos necesarios para la operación y puesta en marcha de la planta. Se obtiene a partir de una estimación por el método de los factores, la cual utiliza el costo de los equipos instalados en la planta. En segundo lugar, se calculan los costos de producción, que como su nombre lo indica, son los gastos en los que se debe incurrir para producir en la planta. Luego, para poder estimar la rentabilidad, se confecciona el cuadro de fuentes y usos, que permite ver, año a año, los flujos de caja del proyecto. Seguido a esto, se emplean tres métodos para la estimación de la rentabilidad, a partir de estos flujos, que son el Valor Presente, la Tasa Interna de Retorno, y el Tiempo de Repago. Los valores que se obtienen para estos tres métodos indican que **el proyecto no resulta rentable**, siendo el valor presente menor a cero y la TIR menor a la TRMA. Por lo tanto, se desaconseja continuar con el estudio del proyecto en estas condiciones.

Finalmente, se propone una alternativa para poder alcanzar niveles de rentabilidad aceptables: en lugar de vender el hidrógeno como se propuso desde un principio, podría ser utilizado como recurso energético dentro de la planta, evitándose así los elevados costos de la planta de licuación. Con esta modificación el proyecto resultaría rentable, por lo que se aconsejaría continuar con su estudio en estas condiciones, sin tener en cuenta el acondicionamiento y venta del hidrógeno.

Índice

Resumen ejecutivo	2
CAPÍTULO 1	13
1.1 - Objetivos del capítulo	14
1.2 - Introducción	14
1.3 - Materia prima: Bioetanol	16
1.3.1 - Bioetanol en el mundo	18
1.3.2 - Bioetanol en Argentina	19
1.4 - Producto principal: Acetaldehído	21
1.4.1 - Grupo funcional: Aldehídos	21
1.4.2 - Propiedades y Características	22
1.4.3 - Antecedentes	22
1.4.4 - Usos y aplicaciones	23
1.4.5 - Acetaldehído en el mundo	24
1.4.6 - Acetaldehído en Argentina	25
1.4.7 - Obtención de acetaldehído	26
1.4.7.1 - Deshidrogenación catalítica del Etanol	27
1.4.7.2 - Oxidación parcial de Etanol	27
1.4.8 - Elección de la ruta de reacción	28
1.4.8.1 - Conversión, selectividad y rendimiento	28
1.4.8.2 - Subproductos	28
1.4.8.3 - Separación de productos y subproductos	29
1.4.8.4 - Catalizador	29
1.5 - Subproductos	30
1.5.1 - Hidrógeno	30
1.5.1.1 - Propiedades y Características	30
1.5.1.2 - Hidrógeno como vector energético	31
1.5.1.3 - El color del hidrógeno: características de la producción	31
1.5.1.4 - Usos y aplicaciones	33
1.5.1.5 - Hidrógeno en el mundo	34
1.5.1.6 - Hidrógeno en Argentina	36
1.5.2 - Acetato de etilo	37
1.5.2.1 - Propiedades y características	37
1.5.2.2 - Usos y aplicaciones	37
1.5.2.3 - Acetato de etilo en el mundo	38
1.5.2.4 - Acetato de etilo en Argentina	39
1.6 - Definición de la capacidad de la planta	40
1.6.1 - Análisis de Mercado	40

1.6.2 - Capacidad de la planta	41
1.6.3 - Requerimiento de materia prima	42
1.6.4 - Subproductos	43
1.7 - Localización de la planta	44
1.8 - Justificación preliminar del proyecto	46
CAPÍTULO 2	51
2.1 - Objetivos del capítulo	52
2.2 -Análisis cinético y termodinámico de la reacción	52
2.2.1 - Definición de la ruta química de producción	52
2.2.1.1 - Oxidación catalítica del etanol	52
2.2.1.2 - Deshidrogenación catalítica del etanol	53
2.2.2 - Sistema de reacciones	54
2.2.3 - Catalizadores	58
2.2.3.1 - Catálisis	58
2.2.3.2 - Propiedades de los catalizadores	60
2.2.3.3 - Fase activa	60
2.2.3.4 - Soportes	61
Alúmina	61
Sílica gel	61
Carbón activado	62
2.2.3.5 - Promotores	62
2.2.3.6 - Desactivación	63
2.2.3.7 - Comercialización	64
2.2.3.8 - Disponibilidad de datos	64
2.2.3.9 - Análisis de posibles catalizadores	65
2.2.3.10 - Elección del catalizador	67
2.3 - Diagrama de flujo de la planta	68
2.3.1 - Subplantas	68
2.4 - Balances de masa	70
2.4.1 - Capacidad de producción	70
2.4.1.1 - Efectividad general del proceso (EGP)	70
Disponibilidad	70
Porcentaje de producto conforme	71
Performance	71
2.4.2 - Planteo y resolución de los balances	72
2.4.2.1 - Consideraciones	73
2.4.2.2 - Suposiciones	74
2.4.2.3 - Cálculos	75
2.4.2.4 - Datos	76
2.4.2.5 - Resultados	76
CAPÍTULO 3	79

3.1 - Objetivos	80
3.2 - Introducción	80
3.2.1 - Reactores heterogéneos a escala industrial	80
3.2.2 - Comparación de reactores	81
3.2.3 - Modelos para lechos fijos	82
3.2.3.1 - Balance de masa	84
3.2.3.2 - Balance de energía	85
3.2.3.3 - Modelos	86
3.2.3.4 - Caída de presión en el lecho	87
3.3 - Diseño del reactor	89
3.3.1 - Expresión cinética	89
3.3.2 - Método de resolución	92
3.3.3 - Procedimiento empleado para el diseño	93
3.3.3.1 - Efecto de la temperatura de operación	96
3.3.3.2 - Efecto de la presión de operación	97
3.3.4 - Simulación y resultados	99
3.3.5 - Dimensionamiento	103
3.4 - Intercambio de calor	107
3.4.1 - Operación NINA	109
3.5 - Desactivación	113
3.6 - Aislamiento	114
3.7 - Sistemas de control	118
3.7.1 - Sistema de control de temperatura	118
3.7.2 - Sistema de control de presión	119
CAPÍTULO 4	121
4.1 - Objetivos	122
4.2 - Introducción	122
4.3 - Secuencia de etapas de separación	122
4.3.1 - Separación de hidrógeno	123
4.3.1.1 - Efecto de la temperatura y la presión de operación	125
4.3.2 - Purificación de la corriente de hidrógeno y recuperación del acetaldehído	128
4.3.3 - Purificación de acetaldehído	135
4.3.4 - Purificación de etanol y de acetato de etilo	140
4.3.4.1 - Diseño y optimización de las torres	143
CAPÍTULO 5	152
5.1 - Objetivos	153
5.2 - Introducción	153
5.3 - Integración energética: Método PINCH	154
5.3.1 - Definición de corrientes calientes y frías de proceso	155
5.3.2 - Elección de la mínima diferencia de temperaturas (ΔT_{min})	156
5.3.3 - Construcción de la curva compuesta	157

5.3.4 - Red de intercambiadores de calor	158
5.3.4.1 - Introducción	158
5.3.4.2 - Diseño	160
5.3.4.3 - Análisis de alternativas	162
5.4 - Intercambio de calor con servicios auxiliares	168
5.4.1 - Corrientes Frías	168
5.4.1.1 - Elección del fluido calefactor	169
5.4.1.2 -Red de intercambiadores	172
5.4.2 - Corrientes Calientes	174
5.4.2.1 - Elección del refrigerante	176
5.4.2.2 - Red de intercambiadores	177
5.5 - Equipos auxiliares	183
5.5.1 - Calderas	183
5.5.1.1 - Caldera de vapor de agua	183
5.5.1.2 - Caldera de fluido térmico	185
5.5.2 - Bombas	186
5.5.2.1 - Bomba B1	189
5.5.2.2 - Bomba B2	191
5.5.2.3 - Bomba B3	193
5.5.2.4 - Bomba B4	195
5.5.3 - Sopladores	198
5.5.3.1 - Soplador S1	198
5.5.3.2 - Soplador S2	200
5.5.4 - Válvulas de reducción de presión	201
5.5.4.1 - Válvula 1	203
5.5.4.2 - Válvula 2	205
5.5.5 - Equipo de refrigeración	206
5.5.5.1 - Temperatura mínima	207
5.5.5.2 - Temperatura máxima	208
5.5.5.3 - Trabajo de compresión	209
5.5.5.4 - Capacidad de refrigeración	210
5.5.5.5 - Compresor	210
5.5.5.6 - Condensador	211
5.5.5.7 - Válvula de expansión	212
5.5.6 - Torre de enfriamiento de agua	214
5.5.6.1 - Temperatura de salida	216
5.5.6.2 - Temperatura de entrada	218
5.5.6.3 - Selección de la torre	220
CAPÍTULO 6	223
6.1 - Objetivos	224
6.2 - Introducción	224

6.3 - Almacenamiento del hidrógeno	224
6.3.1 - Hidrógeno comprimido	225
6.3.2 - Hidrógeno líquido	226
6.3.3 - Hidrógeno sólido	227
6.3.4 - Comparación entre los sistemas de almacenamiento	229
6.4 - Licuación - métodos	230
6.4.1 - Ciclo de Linde-Hampson simple	231
6.4.2 - Ciclo de Linde-Hampson con pre-enfriamiento	232
6.4.3 - Ciclo de Claude	233
6.5 - Diseño de la subplanta	234
6.5.1 - Purificación de la corriente de hidrógeno	234
6.5.1.1 - Membranas	234
6.5.1.2 - Destilación criogénica	236
6.5.1.3 - Adsorción por cambio de presión (PSA)	236
6.5.2 - Ciclo de licuefacción	239
6.5.2.1 - Elementos del ciclo	240
6.5.2.1.1 - Válvula Joule-Thompson	240
6.5.2.1.2 - Turbina de expansión	246
6.5.2.1.3 - Compresor I	248
6.5.2.1.4 - Intercambiador de calor I	249
6.5.2.1.5 - Intercambiador de calor II	249
6.5.2.1.6 - Intercambiador de calor III	250
6.5.2.1.7 - Tanque receptor	250
6.5.2.1.8 - Compresor II	250
6.5.2.2 - Balances de masa	251
6.5.2.3 - Presiones	251
6.5.2.4 - Balances de energía	252
6.5.2.5 - Resolución del ciclo	253
6.5.2.5.1 - Relación entre las variables	253
6.5.2.5.2 - Criterios de selección	253
6.5.2.5.3 - Procedimiento empleado para la resolución	254
6.5.2.5.4 - Resultados	254
6.6 - Dimensionamiento y selección de los equipos	255
6.6.1 - Sistema PSA	255
6.6.2 - Compresores	257
6.6.2.1 - Compresor 1	257
6.6.2.2 - Compresor 2	257
6.6.2.3 - Compresor 3	258
6.6.3 - Turbina de expansión	259
6.6.4 - Intercambiadores de calor	260
6.6.5 - Sistema de refrigeración	262

6.6.6 - Tanque receptor	263
6.6.7 - Tanque de almacenamiento	263
CAPÍTULO 7	268
7.1 - Objetivos	269
7.2 - Introducción	269
7.3 - Costos de inversión (CapEx)	269
7.3.1 - Estimación de la inversión fija	271
7.3.1.1 - Método de los factores (Chilton)	271
7.3.1.2 - Costo de los equipos	274
Índice de costos	274
Factor costo - capacidad (x)	275
Costos de importación	275
7.3.1.3 - Costo del terreno	278
7.3.1.4 - Estimación de la Inversión en Capital de Trabajo (IW)	279
7.3.1.5 - Inversión Total (IT)	279
7.4 - Costos de producción (OpEx)	281
7.4.1 - Costos variables	282
7.4.1.1 - Costo de materia prima	282
7.4.1.2 - Costo de mano de obra directa	282
7.4.1.3 - Costo de supervisión	284
7.4.1.4 - Costo de servicios	284
Energía eléctrica	284
Combustible	286
Agua de red	288
7.4.1.5 - Costo de mantenimiento	288
7.4.1.6 - Costo de suministros	288
7.4.1.7 - Costo de laboratorio	289
7.4.1.8 - Costo de regalías y patentes	289
7.4.1.9 - Conclusiones respecto a los Costos Variables	289
7.4.2 - Costos fijos	290
7.4.2.1 - Costo de inversión	290
Depreciación	291
Impuestos	292
Seguros	292
Financiación	292
7.4.2.2 - Costo de venta y distribución	293
7.4.2.3 - Costo de dirección y administración	293
7.4.2.4 - Costo de investigación y desarrollo	293
7.4.2.5 - Conclusiones respecto a los Costos Fijos	294
7.5 - Cronograma	296
7.6 - Justificación de la inversión	297

7.6.1 - Ingresos por ventas	297
7.6.2 - Cuadro de fuentes y usos del proyecto	298
7.6.3 - Rentabilidad	300
7.6.3.1 - Valor Presente (VP)	301
7.6.3.2 - Tasa Interna de Retorno (TIR)	301
7.6.3.3 - Tiempo de Repago (nR)	302
7.6.4 - Alternativa propuesta	304
7.6.5 - Análisis de sensibilidad	307
Anexo A	310
Anexo B	311
Anexo C	312
Anexo D	313
Anexo D (continuación)	314
Anexo E	315
Anexo F	316



CAPÍTULO I

ESTUDIO DE MERCADO

1.1 - Objetivos del capítulo

- Estimar la cantidad de materia prima a utilizar, incluyendo la calidad de la misma;
- Determinar la capacidad de producción en base a una investigación de mercados;
- Investigar usos del producto a ser elaborado;
- Especificar calidad del/los producto/s;
- Describir el proceso de producción y compararlo respecto a otros procesos posibles;
- Definir y justificar la ubicación de la planta productiva;
- Realizar una justificación preliminar del proyecto.

1.2 - Introducción

Desde mediados del siglo XX, la mayor parte de la energía producida a nivel mundial se obtiene a partir de los combustibles fósiles. Sin embargo, como se trata de recursos no renovables -finitos-, ha surgido la necesidad de investigar y desarrollar diversas maneras de producir energía prescindiendo de ellos. Esto es debido a que la demanda energética se ha visto en aumento con el paso de los años. Por otro lado, la utilización de los combustibles fósiles conlleva serios problemas medioambientales debido a la liberación de dióxido de carbono a la atmósfera durante el proceso de combustión. Estas emisiones afectan directamente a la capa de ozono, siendo entonces partícipes esenciales en la grave problemática que hoy en día preocupa a la población mundial: el cambio climático.

De allí nace el concepto de energía renovable, que representa una alternativa al consumo de los combustibles fósiles para la producción de energía. Se trata del uso de recursos naturales tales como la biomasa, el viento, la luz solar o el agua.

En los últimos años el precio del petróleo se vió en aumento; ésto, junto a la creciente preocupación sobre el calentamiento global causado por las emisiones de dióxido de carbono, fomentó el consumo de combustibles alternativos para poder disminuir la dependencia que se tiene sobre los combustibles fósiles. Estos se denominan biocombustibles y se trata de recursos energéticos procesados por el ser humano a partir de la biomasa obtenida a partir de recursos renovables.

Hoy, los biocombustibles más extendidos son el **bioetanol**, producido mediante la fermentación de productos vegetales como la caña de azúcar, el maíz o la remolacha, y el **biodiesel**, a partir de aceites vegetales (palma, girasol, lino), grasas animales o microalgas.

En las últimas décadas creció el interés a nivel mundial acerca de la producción y el consumo de estos combustibles, siendo actualmente el bioetanol el de mayor producción en el mercado. Los biocombustibles mencionados se utilizan generalmente en mezclas con nafta, según sea la normativa vigente en cada país referente al consumo y comercialización interna. Esto implica una limitación a la hora de producirlos debido a que la demanda estará sujeta a estas regulaciones. En particular, en Argentina se observó en los últimos años un aumento del precio de la materia prima utilizada para la producción de etanol y, dado que es un gran exportador de ellas a nivel mundial, eventualmente este precio superó al precio de venta del producto terminado haciendo que la producción de éste sea menos rentable. Este hecho produjo incertidumbre a la hora de analizar el mercado de bioetanol a futuro.

Por el motivo mencionado anteriormente es necesario proponer distintas alternativas que permitan un mejor aprovechamiento de los biocombustibles utilizados en Argentina, mediante la diversificación del producto obtenido y poder, así, insertarse en una amplia variedad de mercados con el fin de obtener mayores beneficios económicos.

En particular, este informe se centra en el análisis de rentabilidad para la ampliación de una planta que actualmente produce bioetanol a partir de caña de azúcar, planteando el agregado de una línea de producción de acetaldehído. La selección de este compuesto se debe a que es un intermediario muy importante a nivel mundial, utilizado en diversas síntesis orgánicas y con un valor agregado mucho mayor al del bioetanol. Este compuesto químico presenta una ventaja frente a otros gracias a que puede obtenerse a partir del etanol por varias vías y su tecnología es ampliamente conocida.

Actualmente la planta de producción de bioetanol está emplazada en la provincia de Tucumán, debido a que allí se encuentra la materia prima (caña de azúcar), y tiene una capacidad de producción de 200.000 m³/año. La pureza del bioetanol es del 99,9 %p/p debido a que es lo que se exige según la normativa vigente para el corte de naftas. En particular se desea destinar parte de este bioetanol para obtener acetaldehído de alta pureza (aproximadamente 99,7 %p/p). A lo largo de este capítulo se discutirán cuestiones acerca del mercado del acetaldehído, sus vías de obtención y un cálculo preliminar para la capacidad a instalar de la nueva planta propuesta.

1.3 - Materia prima: Bioetanol

El bioetanol es un alcohol etílico de alta pureza, anticorrosivo y oxigenante que puede ser empleado como combustible mezclándolo con las naftas en diferentes proporciones. Se corresponde con el alcohol etílico (C_2H_5OH), con el prefijo bio- para indicar que se obtiene a partir de biomasa de origen vegetal que contenga azúcares simples o algún compuesto que pueda convertirse en azúcares, como el almidón o la celulosa. Las especies vegetales a partir de las cuales se puede obtener el bioetanol son el maíz, trigo, sorgo, cebada, remolacha azucarera, caña de azúcar.

Al ser producido a partir de una biomasa de origen vegetal, el bioetanol es considerado una fuente de energía renovable y su empleo disminuye ampliamente la emisión de gases contaminantes a la atmósfera, lo que es un gran aporte para reducir la contaminación ambiental y como consecuencia, el calentamiento global. Tiene la ventaja de emitir entre un 40 % a 80 % menos de gases de efecto invernadero que los combustibles fósiles. Sin embargo, su gran desventaja es que para producirlo es necesario proporcionar energía adicional y ésta, en general, se suministra a partir de combustibles fósiles. De todas formas, este biocombustible consolida las bases para un futuro más sustentable.

Las principales ventajas del bioetanol como combustible son las siguientes¹:

- Es un recurso renovable, ya que proviene de la biomasa. Disminuye en forma importante por sustitución parcial o total las cantidades utilizadas de nafta. Esto lleva a una reducción en el uso y la importación de hidrocarburos y favorece el uso de recursos naturales renovables nacionales. Puede contrarrestar y reducir el impacto de los problemas recurrentes de precios y reservas de hidrocarburos en períodos de crisis energética.
- Puede promover una reactivación económica y productiva. Establece una cadena donde se integran eslabones públicos y privados, como la secuencia de los sectores agrícola, industrial, energético, social, económico y ambiental. Esta actividad fomenta el desarrollo de economías circulares en donde todos los sectores de la economía se ven favorecidos.
- Posee un alto grado de solubilidad y miscibilidad con la nafta. El etanol es líquido y adecuado para su uso en automotores, tiene un importante número de octanos y no deteriora la calidad de las naftas para su uso en los motores de combustión.
- Su utilización como combustible contribuye a reducir la polución y contaminación atmosférica, especialmente en los centros urbanos, por la menor producción de partículas carbonosas. Disminuye ligeramente la emisión del CO_2 con efecto invernadero, con respecto a la nafta, y disminuye la emisión de monóxido de carbono,

¹ Ref N° 1

óxidos de sulfuro y óxidos de nitrógeno. De esta manera, contribuye al mejoramiento de la salud y calidad de vida de la población.

En cuanto a las limitaciones en el uso del etanol como fuente energética, las más importantes son:

- Su producción y precio están directamente ligados al mercado nacional e internacional de la materia prima en cuestión (en nuestro país corresponde al de la caña de azúcar y al del maíz).
- El etanol posee un 30 % menos de densidad de energía que la nafta, lo que exige un consumo mayor de combustible. La nafta provee 42 MJ/kg, mientras que el etanol sólo 29 MJ/kg. Energéticamente, un litro de nafta equivale a 1,5 litros de etanol. La adición de un 10 % de etanol a la nafta reduce el calor de combustión solamente en un 3,8 %, lo que es prácticamente similar en cuanto a combustible consumido.
- Requerimientos de infraestructura especial para transporte y almacenaje. Se necesitan vehículos estructural y mecánicamente adaptados para operar con alcohol y con las mezclas dealconafta, lo que provee una operabilidad general inferior a la tradicional para las naftas.
- La producción agrícola de la biomasa requiere cultivos de grandes extensiones de tierra, las que podrían ser utilizadas con otro fin, por ejemplo para alimentación.

Históricamente, con el desarrollo de la industria automovilística, se utilizó al bioetanol como combustible puro, pero luego con el crecimiento de la industria petrolera fue reemplazado por combustibles fósiles debido a que presentaban un mejor rendimiento.

Sin embargo, en las últimas décadas, con el aumento en la incertidumbre sobre el curso de los recursos petrolíferos a futuro, así como también la preocupación por las emisiones de gases de efecto invernadero producto de su uso, los biocombustibles volvieron a ganar relevancia dentro del mercado y es por eso que hoy en día es una industria que continúa expandiéndose.

1.3.1 - Bioetanol en el mundo

A nivel internacional los mayores productores de bioetanol son Estados Unidos y Brasil, que en conjunto representan aproximadamente el 80 % de la producción mundial; los siguen en menor medida por China, India y Canadá (Figura 1.1). La principal diferencia entre las dos potencias productoras se da en su materia prima: Estados Unidos obtiene bioetanol a partir de maíz, mientras que Brasil lo obtiene a partir de la caña de azúcar, más precisamente de su jugo; a diferencia de Argentina que lo obtiene a partir de la melaza que es un punto intermedio en la producción de azúcar.

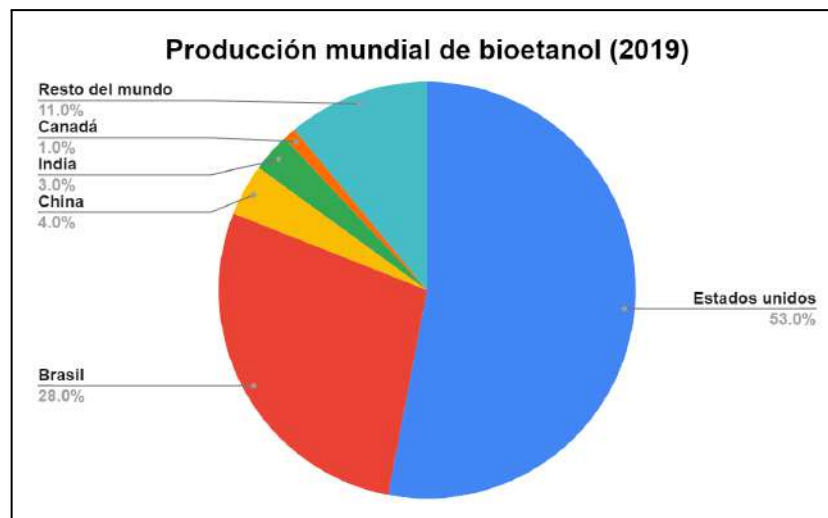


Figura 1.1 - Distribución porcentual de la producción de bioetanol en el mundo (año 2019).

La producción de bioetanol en el mundo mostró una tendencia creciente en la última década, llegando a 112 millones de m³ para el año 2019 ² (Figura 1.2).

Durante el año 2020, con la situación sanitaria que ocurrió a nivel global, la demanda de combustibles en general disminuyó drásticamente, lo que llevó a una disminución en su producción. Sin embargo, conforme las restricciones sanitarias cesaron, la producción de los biocombustibles se reanudó, volviendo a los valores habituales que se tenían previo al comienzo de la pandemia. Esto es debido al creciente interés que se tiene sobre los biocombustibles como alternativa más sustentable para la generación de energía y como una posible solución a la falta de combustibles fósiles que ya empieza a ser cada vez más relevante a nivel mundial.

² Ref. N° 2

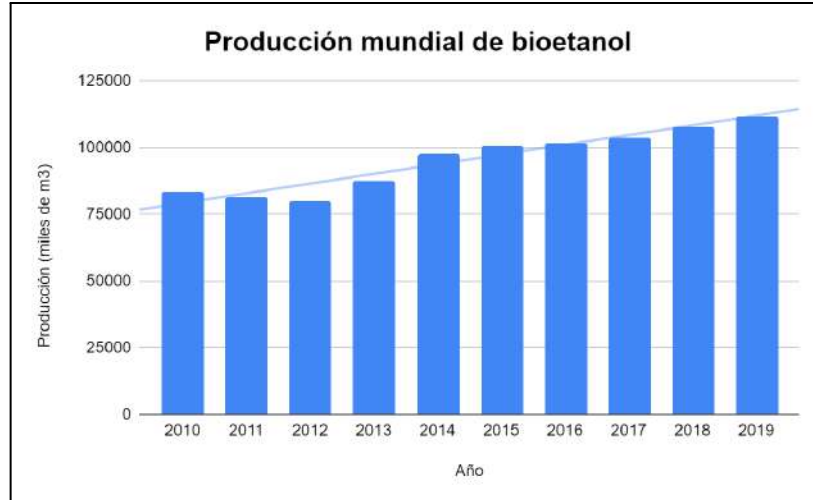


Figura 1.2 - Producción mundial de bioetanol para el período 2010 - 2019.

1.3.2 - Bioetanol en Argentina

Actualmente, la producción de bioetanol en la Argentina se elabora en base a la melaza (sub-producto de la obtención de azúcar), de jugo de caña de azúcar y de los cereales, principalmente el maíz, el cual fue incorporado con posterioridad a la caña.

La mayor concentración de plantas productoras de bioetanol se da, principalmente, en el noroeste argentino (NOA) debido a que las condiciones climáticas y los biomas que allí se tienen hacen que el cultivo de la materia prima sea propicio.

Argentina destina toda su producción al consumo interno³ y se encuentra regularizado mediante la ley 27.640 - “Marco regulatorio de biocombustibles”, que establece un porcentaje de corte de nafta del 12 % con bioetanol, conformado en partes iguales de bioetanol de caña y de maíz. Por lo tanto, los principales compradores de etanol a nivel nacional son las empresas petroleras que requieren de este producto para mezclar con la nafta y posteriormente comercializarla. Sumado a esto, el precio de venta del bioetanol se encuentra controlado por el gobierno nacional. Actualmente el precio del bioetanol se encuentra en \$129,309 (0,676 USD/L)⁴.

Estos factores implican una limitación en la producción y capacidad instalada de las plantas en Argentina. Dado que todo lo que se produce se destina al mercado interno, esta producción estará fijada, por un lado, por la demanda que las petroleras exijan según sea su producción y por otro lado, por el precio fijado en el mercado interno.

³ Ref. N° 3

⁴ Ref. N° 4

En la *Figura 1.3* se encuentra la variación en las ventas y en la producción a nivel nacional a lo largo de la última década, se puede apreciar lo explicado anteriormente: casi todo lo que se produce se vende. Además, se observa una tendencia creciente con el correr de los años en cuanto a la producción y el consumo. En el esfuerzo de lograr una matriz energética más sustentable, Argentina impuso desde 2010 un corte obligatorio de etanol en la nafta del 5 %.

En enero de 2014 la mezcla exigida aumentó al 9 % y en febrero se elevó el corte al 10 %. Dos años después, en 2016, el requerimiento de mezcla de etanol en naftas fue elevado al 12 % y se mantiene en ese porcentaje desde entonces. Esto necesariamente implicó un aumento en la producción debido a que ahora las petroleras debían agregar mayor cantidad de bioetanol a la nafta según la legislación, lo que hizo que el comercio interno de este biocombustible aumente significativamente.

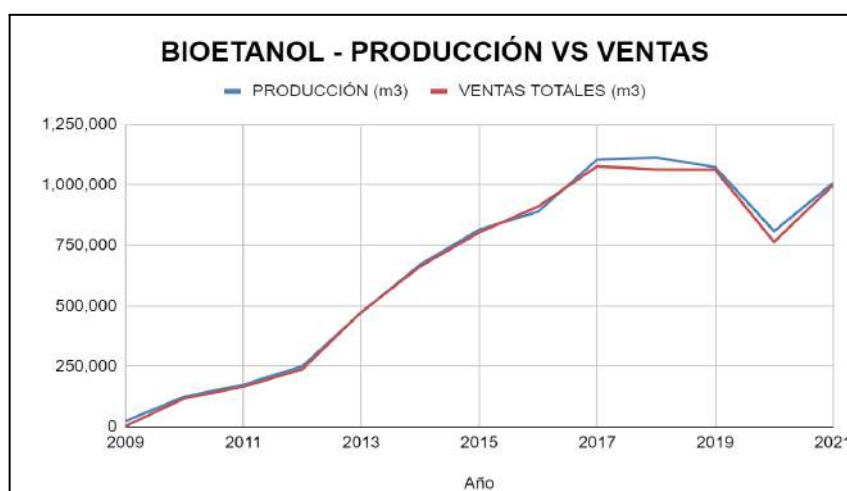


Figura 1.3 - Producción y Ventas de bioetanol en Argentina en el período 2009-2021⁵.

Asimismo, para el año 2020 se observa el mismo efecto que se dió a nivel mundial, debido al aislamiento preventivo y obligatorio, la demanda de combustibles a nivel nacional también disminuyó drásticamente por lo que los valores de producción en ese año siguieron esta tendencia. Conforme las restricciones fueron cesando, la industria nacional se reactivó volviendo a los valores de producción y ventas que se tenían en los años anteriores a la crisis sanitaria.

⁵ Ref. N° 5

1.4 - Producto principal: Acetaldehído

1.4.1 - Grupo funcional: Aldehídos

Los aldehídos son compuestos orgánicos caracterizados por poseer el grupo funcional -CHO (carbonilo), el cual resulta de la deshidrogenación u oxidación de un alcohol primario. Se clasifican en: alifáticos, R-CHO, o aromáticos, Ar-CHO. Cabe destacar que la mayoría son líquidos a temperatura ambiente, excepto el metanal que es un gas. Estos compuestos orgánicos presentan olores penetrantes, aunque, con el aumento de masa molecular, esos olores se van debilitando.

El grupo carbonilo le confiere una considerable polaridad a los aldehídos, provocando que éstos tengan puntos de fusión y ebullición más altos que los de hidrocarburos de análogo peso molecular; sin embargo, al no poder existir enlaces de hidrógeno (puente de hidrógeno) entre las moléculas de aldehídos, sus puntos de fusión y ebullición son más bajos que los de los correspondientes alcoholes.

Otra característica importante de éstas moléculas es su solubilidad: los de cadena hidrocarbonada más corta son completamente solubles en agua y ésta solubilidad disminuye rápidamente al aumentar la longitud de la cadena. Las moléculas de cadenas hidrocarbonadas más largas son muy solubles en disolventes orgánicos apolares, tales como éter etílico, benceno, etc. Los aldehídos son muy reactivos debido a la alta polaridad generada por su grupo funcional y, además, son buenos agentes reductores (se oxidan al correspondiente ácido carboxílico).

Por todas las propiedades mencionadas anteriormente los aldehídos son ampliamente utilizados en gran variedad de industrias para producir pinturas, tinturas, esencias, resinas, solventes y plásticos, entre otros elementos. También se utilizan como conservantes y para obtener compuestos como la melamina o la baquelita.

1.4.2 - Propiedades y Características

El Acetaldehído, también conocido como Etanal, es un compuesto orgánico de fórmula CH_3CHO . Se trata de un líquido incoloro con un olor característico ligeramente afrutado; es volátil e inflamable, miscible en agua, alcohol, éter, benceno, gasolina y otros solventes orgánicos.⁶

El Acetaldehído es un intermediario en el metabolismo de algunos organismos vegetales y animales, en los cuales se ha detectado en pequeñas cantidades; aparece como intermediario en los procesos de fermentación del alcohol y se ha detectado en el jugo de diferentes plantas, en aceites esenciales, en el café tostado y en el tabaco.

El Acetaldehído entra dentro de la categoría de líquidos inflamables de Categoría 1 - Líquidos y vapores altamente inflamables, y presenta riesgos graves para la salud de las personas, siendo este un compuesto carcinogénico. Es por esto que se debe tener especial cuidado a la hora de manipularlo y transportarlo a fin de evitar accidentes.

1.4.3 - Antecedentes

El acetaldehído fue sintetizado por primera vez en 1782 por Carl Wilhelm Scheele (1742-1786), químico alemán, mediante la oxidación de Etanol con Dióxido de Manganeso (MnO_2). La fórmula fue conocida recién en 1835 por Justus Von Liebig (1803-1873), otro químico alemán.

A través de los años se han utilizado diferentes materias primas para su obtención: etanol, etileno, acetileno y fracciones de hidrocarburos. La elección de éstas ha dependido de los países y ha estado influenciada por factores económicos e históricos.

En Estados Unidos, Gran Bretaña y Francia, a mediados de los años sesenta, desempeñaban un gran papel los procesos de obtención de acetaldehído que partían del etileno, con etanol como intermedio. En Alemania e Italia, en cambio, se prefería la hidratación de acetileno por el elevado precio del etanol. La oxidación de alcanos C3 y C4 constituyó una alternativa para la obtención de acetaldehído, que se utilizó con una extensión limitada en EE.UU. Con la oferta de etileno más barata, procedente de la disociación de gas natural y nafta por una parte, y el desarrollo de procesos industriales de oxidación directa por Wacker-Hoechst por otra parte, los antiguos procesos fueron perdiendo presencia a lo largo de los años, sobre todo en EE.UU. y Japón.

⁶ Ref. N° 6

1.4.4 - Usos y aplicaciones

Es utilizado principalmente como intermediario para producir otros químicos, tales como piridina y sus sales, ácido acético, desinfectantes, drogas y perfumes; también es producto de partida en la síntesis de plásticos, pinturas y lacas; se utiliza en la industria del caucho, del papel y la curtición de cuero; como conservante de carnes y otros productos alimenticios.

Como se mencionó anteriormente, el etanal tiene participación en diversas industrias, tales como:

- Industria Química
- Industria Alimentaria
- Industria Farmacéutica y cosmética
- Fabricación de papel
- Fabricación de plásticos y gomas sintéticas

En la *Figura 1.4* se muestra la participación porcentual del acetaldehído en las distintas industrias mencionadas.



Figura 1.4 - Participación porcentual del acetaldehído en las industrias. ⁷

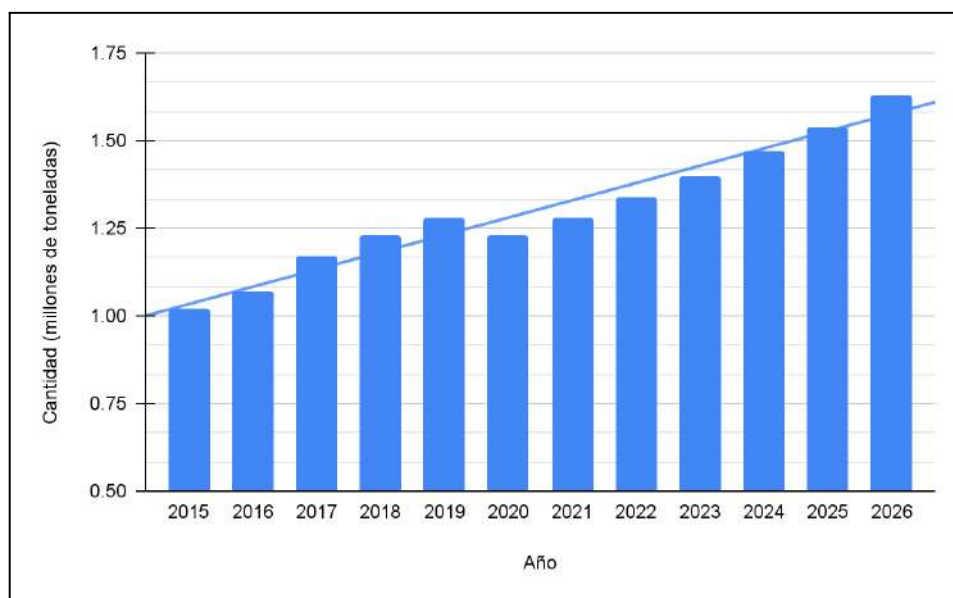
Cabe destacar que el acetaldehído fue un intermediario muy importante para la síntesis de acetato de etilo y ácido acético, pero hoy en día la producción de estos compuestos se realiza siguiendo otras rutas de reacción que permiten obtener mejores rendimientos y menores costos de producción. Sin embargo, el acetaldehído tiene una función muy especial en la industria farmacéutica, debido a que es precursor de la piridina y sus sales.

⁷ Ref. N° 7

1.4.5 - Acetaldehído en el mundo

La utilización de acetaldehído en el mundo ha mostrado una tendencia creciente durante los últimos años, llegando a 1.28 millones de toneladas en 2019 (*Figura 1.5*).

La pandemia de COVID-19 ha afectado negativamente la demanda, la producción y el consumo de acetaldehído en el mundo debido a la disminución de la actividad industrial. Sin embargo, se espera que la tendencia del mercado continúe en alza en los años venideros gracias al aumento de la demanda de productos tales como piridina y bases de piridina, resinas poliméricas y tinturas (producidas a partir de acetaldehído); además, el acetaldehído se utiliza para la cristalización de gelatina que, a su vez, es necesaria para impulsar la demanda del producto en las industrias de fotografía, farmacéutica y cosmética.



*Figura 1.5 - Mercado de Acetaldehído en el mundo.*⁸

Sin perder de vista el panorama esperanzador del mercado de acetaldehído, hay razones para creer que el crecimiento del mercado no será tan marcado, tales como el aumento del uso de metanol en la producción de ácido acético (en lugar de acetaldehído) o el desarrollo de nuevos procesos para obtener sus derivados.

En cuanto a los principales productores de acetaldehído a nivel mundial se encuentran⁹ Estados Unidos, con las empresas Celanese Corporation y Eastman Chemical Company, seguido de países de Asia: Japón, con la empresa Sumitomo Chemical Company Ltd., y Taiwán, con la empresa LCY Group.

⁸ Ref. N° 8

⁹ Ref. N° 9

La región de Asia-Pacífico (principalmente países como China y Japón) lidera el mercado debido a la creciente demanda de las industrias de alimentos y bebidas causada por el aumento de población; le sigue EEUU con el 14 % del consumo mundial y países de Europa Occidental con el 12 % (Figura 1.6).

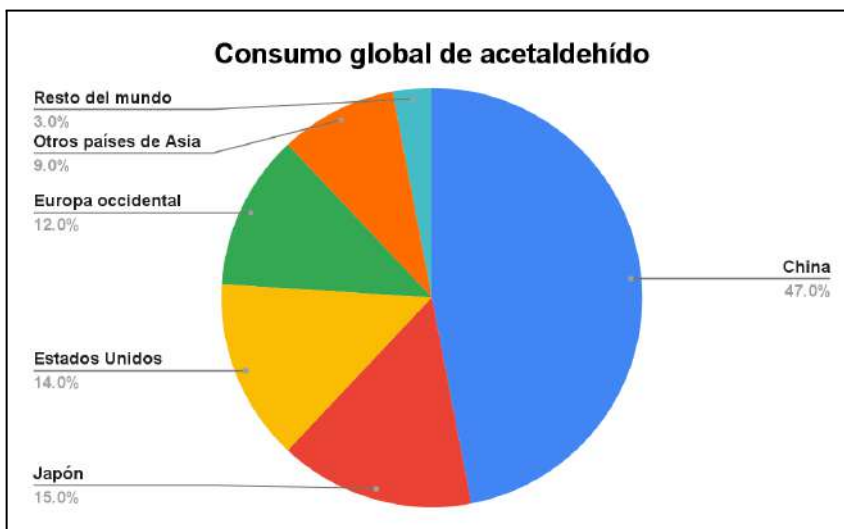


Figura 1.6 - Principales países consumidores de acetaldehído.

1.4.6 - Acetaldehído en Argentina

Actualmente no se elabora acetaldehído en Argentina. La única empresa que lo producía, ATANOR S.A., cerró su planta productora en 2017 y optó por la importación de los químicos que desarrollaba debido a que resultaba más rentable.

Hasta la fecha de cierre, ésta empresa proveía casi la totalidad del acetaldehído usado en el país y a partir de 2017 todo lo necesario comenzó a importarse. De la Figura 1.7 se aprecia que el consumo nacional no representa un porcentaje significativo del consumo mundial (aproximadamente un 0,00002 % para el 2020).

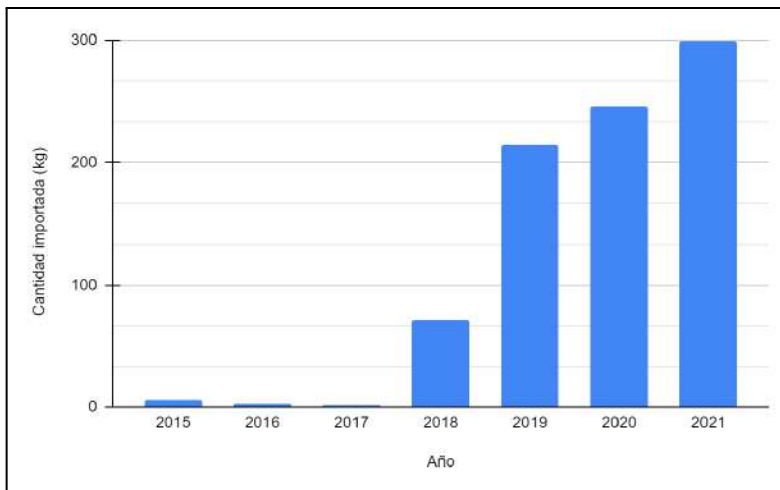


Figura 1.7 - Importaciones de Acetaldehído en Argentina en el período 2015-2021.¹⁰

1.4.7 - Obtención de acetaldehído

Como se detalló anteriormente, el Acetaldehído es un compuesto orgánico, y como tal, presenta una gran variedad de formas de obtenerlo. Algunas de ellas se nombran a continuación:

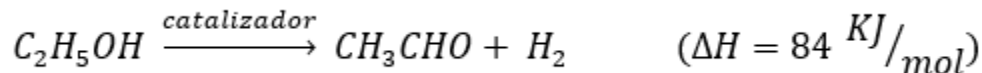
- Deshidrogenación de Etanol
- Hidratación de Acetileno
- Oxidación de alcanos
- Por vía biotecnológica
- Oxidación parcial de Etanol
- Oxidación de Etileno (Proceso Hoechst)
- A partir de gas de síntesis

Debido a que este proyecto busca aumentar el valor agregado a la producción de Bioetanol, se lo utiliza como materia prima, necesariamente. Por lo tanto, de las opciones mencionadas, se debe poner la mirada sobre aquellas en las que el Etanol es la materia prima: deshidrogenación de Etanol y oxidación parcial de Etanol. Se deben estudiar, entonces, ambas alternativas y decidir cuál es la más conveniente.

¹⁰ Ref. N° 10

1.4.7.1 - Deshidrogenación catalítica del Etanol

La reacción de deshidrogenación tiene como único reactivo al Etanol, el cual reacciona sobre un catalizador para dar acetaldehído e hidrógeno.



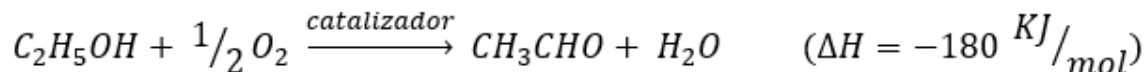
La elección del catalizador es crucial para determinar la velocidad de reacción, su conversión y rendimiento. Entre los catalizadores más usados se destacan: Zn, Co, Cr y Cu, estos suelen estar soportados sobre materiales con gran área superficial, como por ejemplo, carbón activado o asbestos.

Como subproductos principales se puede obtener acetato de etilo, butanol y ácido acético. Sin embargo, como el acetato de etilo es proporcionalmente mayor al resto de los subproductos, y por falta de información, su reacción es la única que se considera en las reacciones secundarias. A continuación, se resumen las reacciones que se llevan a cabo en serie durante la producción de acetaldehído.

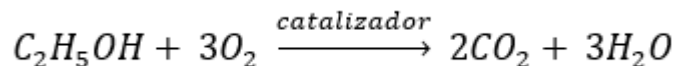


1.4.7.2 - Oxidación parcial de Etanol

Además del etanol, el oxígeno participa como reactivo en la reacción, para dar como productos acetaldehído y agua



Al igual que la deshidrogenación, la elección del catalizador es crucial para obtener resultados óptimos. Entre los más utilizados se encuentran: Cu, Ag, Au, Pt, Fe, Ni y sus respectivos óxidos. Esta reacción compete principalmente con la oxidación total del etanol:



En literatura se ha encontrado valores de conversión y selectividad en torno al 70 y 95 % respectivamente con una temperatura cercana a 250 °C¹¹.

¹¹ Ref. Nº 11

1.4.8 - Elección de la ruta de reacción

Para determinar qué ruta de reacción implementar, se deben considerar no sólo los parámetros de la reacción, sino también, los subproductos obtenidos y la facilidad para separarlos.

1.4.8.1 - Conversión, selectividad y rendimiento

Es preciso definir estos parámetros, ya que son nombrados y utilizados en todo el informe:

$$\textit{Conversión} = \frac{\textit{moles de etanol que reaccionaron}}{\textit{moles de etanol alimentados}}$$

$$\textit{Selectividad} = \frac{\textit{moles de acetaldehído obtenidos}}{\textit{moles de producto obtenido}}$$

$$\textit{Rendimiento} = \frac{\textit{moles de acetaldehído obtenidos}}{\textit{moles de etanol que reaccionaron}}$$

En base a los datos recopilados, la reacción de deshidrogenación presenta un rendimiento superior a la oxidación parcial, es decir, se obtiene mayor cantidad de acetaldehído con la misma cantidad de etanol.

1.4.8.2 - Subproductos

Ambas reacciones, además de producir el compuesto de interés, generan subproductos, los cuales repercuten en gran medida en las etapas de separación posteriores. Algunos subproductos representan desechos sin valor en el mercado, mientras que otros pueden utilizarse dentro del mismo proceso productivo y/o comercializarse.

La reacción de deshidrogenación tiene como co-producto al hidrógeno. Este compuesto puede utilizarse dentro del propio proceso productivo, por ejemplo, como combustible para la caldera, o también se puede comercializar, gracias a su valor en el mercado.

De las reacciones secundarias, se obtiene una cantidad considerable de acetato de etilo, el cual también posee valor de venta en el mercado, aunque a priori no será tenido en cuenta en la sección de justificación preliminar.

La oxidación parcial tiene como co-producto al agua. La misma es indeseable, dado que dificulta la separación posterior y corroe los metales no preparados.

La reacción competitiva es la oxidación total, la cual convierte al etanol en agua y dióxido de carbono. El dióxido de carbono, en las cantidades obtenibles, no tiene valor comercial.

1.4.8.3 - Separación de productos y subproductos

Cuanto mayor sea la dificultad de separar el compuesto deseado de la mezcla (a la salida del reactor), mayor será el costo fijo y operativo de los equipos necesarios.

En la reacción de oxidación parcial, el acetaldehído formado está mezclado con nitrógeno, agua, oxígeno y etanol. Es necesario absorber el acetaldehído en una solución de alcohol a baja temperatura y posteriormente destilarla, separarla y purificarla.

Por otro lado, en la reacción de deshidrogenación el acetaldehído formado está mezclado, principalmente, con hidrógeno y etanol, y en menor medida con acetato de etilo. Se requiere primero un condensador para separar el hidrógeno de la mezcla. La ausencia de agua facilita la posterior separación del acetaldehído del alcohol que no reaccionó y el acetato de etilo¹².

En base a los aspectos analizados, se opta por implementar la *reacción de deshidrogenación catalítica*, debido a que posee una mayor productividad, tiene subproductos con valor en el mercado y es más simple la separación de los productos.

1.4.8.4 - Catalizador

La elección del catalizador es crucial en el desempeño de la reacción y su elección dependerá de parámetros tales como: conversión y selectividad alcanzada, temperatura y presión de operación, tiempo de vida útil y reactivación del catalizador, información cinética disponible, entre otros factores.

No es posible obtener todos los datos necesarios de un único estudio, por lo que se dispone de diversas fuentes de información. Por ende, es preciso encontrar la forma de combinar la información disponible. Este análisis se efectúa en detalle en el *Capítulo 2*.

¹² Ref. N° 12

1.5 - Subproductos

Una vez definida la ruta química a seguir para producir el compuesto de interés, surge la necesidad de estudiar el mercado de los distintos subproductos que se obtienen. Esto permite hacer un análisis preliminar y analizar la posibilidad de comercializarlos.

Como se mencionó en la *Sección 1.4.7*, los subproductos principales que se obtienen a partir de la deshidrogenación de etanol son el hidrógeno y el acetato de etilo. Sólo se tienen en cuenta estos dos compuestos para el análisis, debido a que se obtienen en mayor proporción. En el *Capítulo 2* se tratarán con más detalle las cuestiones referidas a la ruta química.

1.5.1 - Hidrógeno

1.5.1.1 - Propiedades y Características

El hidrógeno atómico es el primer elemento de la tabla periódica y el más abundante, formando parte de aproximadamente el 75 % de la materia visible del universo. En condiciones normales (así como también en un amplio intervalo de presiones y temperaturas), se presenta en forma molecular constituyendo el gas diatómico H_2 .

Este gas es incoloro, inodoro, insípido, inflamable e insoluble en agua; difunde en aire más rápido que cualquier otro gas, lo cual, teniendo en cuenta los aspectos de la seguridad, es la mayor ventaja que tiene. En cuanto a sus propiedades químicas, cabe resaltar que el átomo de hidrógeno es altamente reactivo, por lo cual no se lo encuentra en estado libre en la naturaleza sino ligado, en mayor medida a átomos de oxígeno o carbono.

Es por ello que, para obtener hidrógeno a partir de recursos naturales, es necesario invertir energía. Esta es la razón por la cual se considera al hidrógeno como un vector energético (Ver *Sección 1.5.1.2*), diferenciándolo de las treinta fuentes de energía primaria. Al ser un potente agente reductor, el hidrógeno atómico reacciona con óxidos y cloruros de muchos metales, reduce diversas sales como nitritos o nitratos de sodio y potasio, produce hidruros a partir de metales o no metales, reacciona con moléculas orgánicas, con oxidantes, con hidrocarburos no saturados. En su reacción con oxígeno, ya sea por conversión electroquímica o por combustión, genera vapor de agua y calor.

Respecto de su inflamabilidad, la llama del hidrógeno es poco visible, muy rápida (1,85 m/s) y muy caliente (2207 °C en aire). Su inflamabilidad es mucho mayor que la del metano, el propano u otros combustibles. Dependiendo de la energía de ignición, la presión, la temperatura y la concentración de diluyentes, las mezclas de hidrógeno con aire u oxígeno pueden diluirse hasta que sus concentraciones caigan por debajo del límite inferior de

inflamabilidad (LII), o por encima del límite superior de inflamabilidad (LSI). En condiciones estándar, el hidrógeno tiene un intervalo de inflamabilidad en aire de 4 a 75 %. Tiene una baja energía de ignición de tan solo 0,02 mJ en relación estequiométrica, comparado con los 0,24 mJ de la gasolina o los 0,28 mJ del metano. Es por ello que se puede encender fácilmente con una pequeña cantidad de energía, cuando su concentración se encuentra en el intervalo de inflamabilidad. El hidrógeno detona en un amplio intervalo de concentraciones, sin embargo, es difícil detonarlo si no está confinado. Esta característica también es muy significativa desde el punto de vista de la seguridad.

A pesar de que su utilización es una realidad, el hidrógeno presenta actualmente restricciones tecnológicas y económicas como, por ejemplo, sus elevados costos de producción, las dificultades en su almacenamiento o la seguridad en su manipulación, que pueden limitar un uso más extensivo y su participación en un futuro escenario energético.

1.5.1.2 - Hidrógeno como vector energético

De acuerdo a la norma ISO 13600, un vector energético es una sustancia o fenómeno que puede ser utilizado para producir trabajo mecánico o calor, u operar procesos químicos o físicos. En otras palabras, los vectores o portadores energéticos son todos aquellos materiales y dispositivos que almacenan energía producida a partir de una fuente primaria, de modo de poder transportarla y liberarla controladamente en aplicaciones y usos posteriores. De esta manera, el concepto de vectores energéticos incluye condensadores, baterías eléctricas, resortes, volantes de inercia, aire comprimido, campos magnéticos, agua embalsada, carbón, madera, combustibles líquidos, hidrógeno y gas natural. Es elemental entonces la clara distinción entre los vectores energéticos y las fuentes de energía primaria. Éstas últimas, son aquellos recursos naturales o formas de energía que están disponibles directa o indirectamente en la naturaleza, que no sufren ninguna modificación química o física para su uso energético. Dentro de ellas podemos incluir a los combustibles fósiles, la energía nuclear, la hidroeléctrica, la energía eólica, la solar, la geotérmica, la proveniente de la biomasa.

1.5.1.3 - El color del hidrógeno: características de la producción

Existen diferentes procesos por los cuales se puede obtener hidrógeno. Al presentarse este compuesto mayormente en otros elementos y compuestos químicos como el metano o el agua, su obtención involucra el procesamiento de los mismos a partir de distintas reacciones para lograr la separación del hidrógeno en forma pura. Estas técnicas son variadas y se encuentran en distintas etapas de desarrollo tecnológico y escala, pero entre ellas se puede señalar al reformado con vapor del gas natural, reformado con vapor de biocombustibles, gasificación del carbón, gasificación de la biomasa, electrólisis, pirólisis o separación termoquímica, entre otros. El método de producción más difundido a nivel global es el reformado con vapor del gas

natural, el cual representa al menos el 90 % de la oferta global de hidrógeno y el 95 % de la producción de hidrógeno en Estados Unidos (Office of Energy Efficiency and Renewables Energy (2021)), siendo asimismo una de las técnicas de producción de hidrógeno con mayor impacto ambiental, junto con las de la obtención a partir de otros combustibles fósiles.

La necesidad de avanzar en la agenda de descarbonización de la matriz energética pone en evidencia que impulsar el uso del hidrógeno como alternativa a los combustibles fósiles no implica necesariamente una reducción de emisiones de carbono. De allí radica el creciente interés en la maduración de tecnologías alternativas existentes y el desarrollo de nuevas que permitan avanzar en la producción de hidrógeno neutro o libre de emisiones de carbono, y la mitigación de las emisiones de la producción tradicional. A partir de esto, se comenzó a catalogar al tipo de hidrógeno producido en una serie de categorías según el proceso productivo que se trata y su impacto en términos de emisiones altas, bajas o neutras. Existen varias denominaciones para la obtención del hidrógeno, pero a fines prácticos, se consideran sólo tres de ellas: hidrógeno gris, azul y verde, siendo estas tres las más comunes en la industria actual. En la *Tabla 1.1* se resumen las características de estas denominaciones.

Tabla 1.1- Resumen de los tipos de hidrógeno según su producción.

Denominación (color)	Característica	Nivel de emisiones
Gris	Se obtiene mediante el reformado de combustibles fósiles, siendo el gas natural el más común. Es el hidrógeno más barato de producir por el momento, y el proceso emite una gran cantidad de CO ₂ a la atmósfera. También es el tipo de hidrógeno que más se utiliza actualmente.	Alto
Azul	Se obtiene mediante el reformado de combustibles fósiles, pero con un sistema de captura y almacenamiento de CO ₂ , sin liberarlo a la atmósfera.	Medio
Verde	Se obtiene mediante el uso de energías renovables en su producción, lo que lo convierte en un combustible limpio y sostenible.	Bajo

1.5.1.4 - Usos y aplicaciones

El principal destino del hidrógeno es su utilización para producción de amoníaco (en su mayoría para fertilizantes) y para la industria petroquímica –refinación de hidrocarburos– y la producción de metanol, el cual tiene diversos usos industriales y también interviene en la formulación de combustibles. Adicionalmente, tiene aplicaciones en la industria alimenticia y en la producción siderúrgica y metalúrgica. En la *Figura 1.8* se resumen las distintas aplicaciones de este compuesto.



Figura 1.8 - Aplicaciones del hidrógeno en el sector industrial.¹³

Otra aplicación que posee el hidrógeno es su uso como combustible tanto en el sector industrial como residencial. En cuanto a su uso doméstico, las alternativas con las que el hidrógeno puede ser aplicado son las calderas o calentadores y las celdas de combustibles para la combinación de calor y energía.

Una de las ventajas que posee el hidrógeno (y una de las claves para lograr costos competitivos en este aspecto) es la posibilidad de ser transportado en las redes existentes de gas, por lo que podría utilizarse una infraestructura ya desarrollada. Si bien no es previsible que los costos del calentamiento por hidrógeno desplacen al gas en el medio término, esta aparece como la opción más viable para la descarbonización en este rubro.

¹³ Ref. N° 13

1.5.1.5 - Hidrógeno en el mundo

En la actualidad casi todo el hidrógeno que se produce es hidrógeno “gris” (a partir de metano y en cuya producción se generan emisiones de CO₂). Para que el H₂ “verde” (a partir de energía renovable, principalmente mediante electrólisis) sea competitivo, deberá continuar bajando el costo de las energías renovables y se deberán producir innovaciones que den lugar a electrolizadores eficientes y de gran escala (en torno a 100 MW). Por otro lado, la competitividad del H₂ “azul” (H₂ “gris” con captura del CO₂ emitido) depende del desarrollo de tecnologías viables para la captura, almacenamiento y uso del CO₂.

A nivel mundial, la mayor parte del H₂ producido se consume en la industria (producción de amoníaco, industria del refinado y como materia prima en otros procesos de producción). El desarrollo de la demanda de hidrógeno en los próximos años dependerá de una mayor penetración en la industria y, sobre todo, de nuevos usos en sectores como el transporte o la edificación y para el almacenamiento de energía eléctrica. En el año 2021, este mercado se valoró en 129.850 millones de dólares y se espera que se expanda a una tasa de crecimiento anual compuesta (CAGR) del 6,4 % desde 2022 hasta 2030¹⁴. En la *Figura 1.9* puede observarse la distribución del mercado global de la generación de hidrógeno según su aplicación para este año.

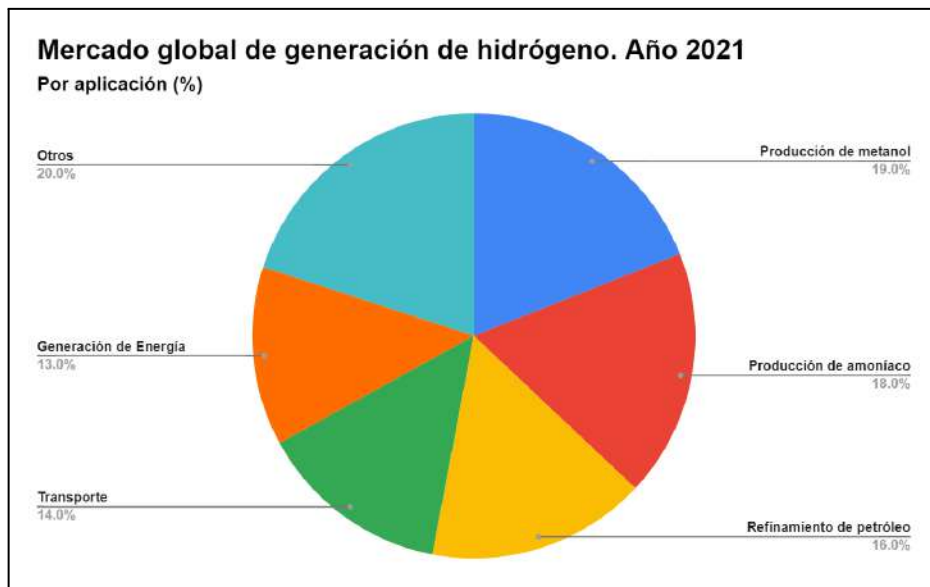


Figura 1.9 - Distribución del mercado global de generación de hidrógeno.

¹⁴ Ref. N° 14

Si bien se espera que este mercado crezca en los años venideros, las estimaciones sobre el crecimiento de su demanda están sujetas a una gran incertidumbre. Esto se debe a la falta de madurez de la industria del H₂ renovable, a la inexistencia de infraestructuras y a la ineficiencia energética en los procesos de conversión de energía requeridos para producir y utilizar el H₂. Sin embargo, en la actualidad los países están desarrollando mejoras a las alternativas existentes para poder revertir esta situación.

En la *Figura 1.10*, se muestra la distribución de la demanda del hidrógeno, por región, para el año 2020.

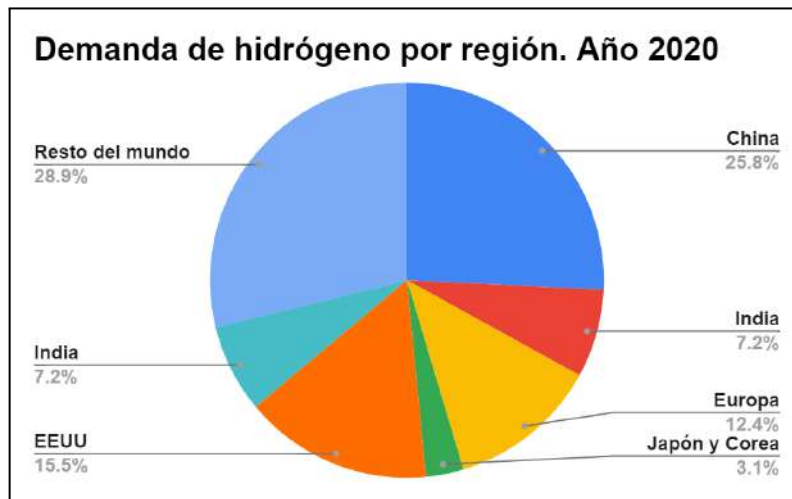


Figura 1.10 - Distribución de la demanda global del hidrógeno para el año 2020.

Puede observarse que la región que controla la demanda a nivel mundial es Asia, con un 29 % aproximadamente del total para ese año (26 % correspondiente a China, 3 % a Japón y Corea). Le siguen Estados Unidos y Europa con el 15,5 % y el 12,4 %, respectivamente. Para ese año, la demanda global fue de 97 millones de toneladas¹⁵.

¹⁵ Ref. N°15

1.5.1.6 - Hidrógeno en Argentina

El hidrógeno no es algo nuevo en Argentina, ya que, cada año, se producen más de 395 kton para cuatro procesos industriales principales: los fertilizantes basados en amoníaco/urea (33 %), los procesos de hidrotreatmento en la industria de la refinación del petróleo (27 %), la reducción directa de los óxidos de hierro en la siderurgia (16 %) y la producción de metanol (15 %). El 10 % restante se produce, principalmente, como subproducto de otros productos químicos (moléculas de cloruro y negro de carbón)¹⁶

Argentina posee excelentes condiciones naturales para la generación de hidrógeno limpio, ya sea a través de la electrólisis renovable del agua (hidrógeno verde), como a través del reformado de gas natural con captura y almacenamiento de CO₂ (hidrógeno azul). También posee los recursos y capacidades científicas para desempeñar un rol destacado en las cadenas globales de tecnología y bienes industriales que serán requeridos en la nueva economía del hidrógeno.

En particular, la demanda de hidrógeno en el país no es muy marcada. Para el año 2019 se registró una demanda de 0,4 Mt, representando el 0,5 % respecto al total demandado en el mundo, para ese año¹⁷. Sin embargo, se proyecta que este mercado crezca, no solo a nivel regional, sino también a nivel mundial, para el año 2030.

En cuanto a la oferta, Argentina podría posicionarse dentro de los líderes de generación de este combustible debido a la gran disponibilidad de recursos y energías renovables, como lo son la biomasa, la energía solar y eólica, entre otras.

Teniendo en cuenta que tanto a nivel mundial como a nivel regional el mercado del hidrógeno se encuentra en auge, y que todas las tecnologías se encuentran en constante desarrollo y perfeccionamiento, es conveniente comercializar este subproducto para poder aumentar el beneficio obtenido por la venta de acetaldehído. Las cuestiones referidas a su acondicionamiento para su posterior almacenamiento y comercialización serán tratadas con detenimiento en el *Capítulo 6*.

¹⁶ Ref. N°16

¹⁷ Ref. N° 17

1.5.2 - Acetato de etilo

1.5.2.1 - Propiedades y características

El acetato de etilo es un líquido incoloro no residual, con un olor suave o afrutado característico de los ésteres. Es miscible con hidrocarburos, cetonas, alcoholes y éteres y poco soluble en agua, pudiendo aumentar la solubilidad con la temperatura. Se trata de un disolvente moderadamente polar que es volátil, no tóxico (a no ser que se presente en elevada concentración) y no higroscópico. Es un producto altamente inflamable, por lo que no se debe manipular o almacenar cerca de llamas abiertas, calor o chispas, y requiere ventilación adecuada. No tampoco se debe almacenar o mezclar con oxidantes fuertes, como cloro líquido y oxígeno concentrado. Es irritante de la piel y de las vías respiratorias. Sin embargo, se trata del disolvente orgánico de uso industrial menos tóxico; de hecho, no ha habido casos de intoxicación humana por ingestión oral ni se han registrado efectos secundarios crónicos que pudiesen ser asignados al acetato de etilo. No es un compuesto corrosivo y puede ser almacenado en acero al carbono sin recubrimientos especiales.

1.5.2.2 - Usos y aplicaciones

Debido a su baja peligrosidad, el acetato de etilo se emplea en la industria química como disolvente universal en múltiples campos. Se puede utilizar para sintetizar productos destinados al recubrimiento superficial, como barnices o lacas basados en nitrocelulosa, ya que tiene una gran solubilidad en diluyentes aromáticos y alifáticos; como disolvente de compuestos utilizados para revestir y decorar objetos de cerámica; como reactivo para la manufactura de pigmentos; como base para la producción de numerosos compuestos explosivos; y es el disolvente de uso más extendido en arte.

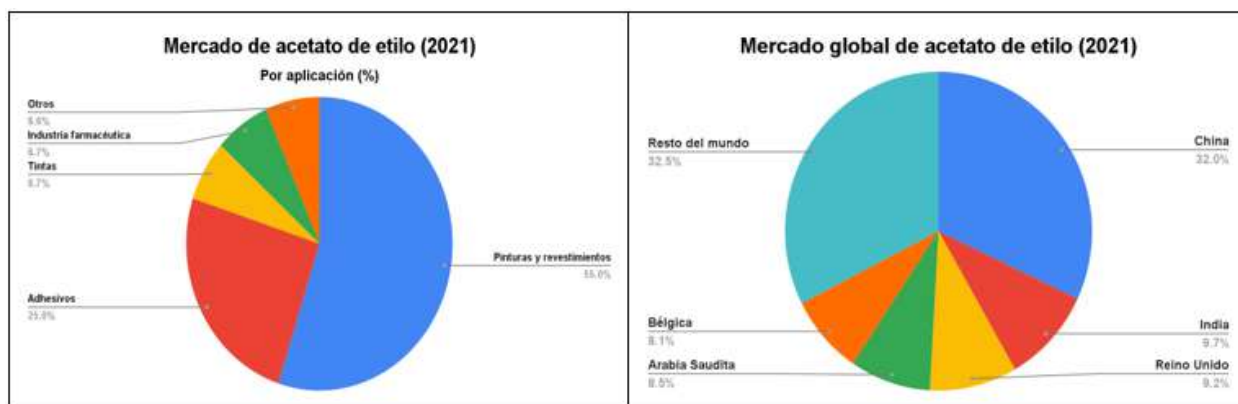
Sus aplicaciones también se extienden a la industria de los adhesivos y colas derivados de la celulosa, así como para producir compuestos destinados a la remoción de sustancias resinosas en la industria del caucho. Incluso en la industria papelera para recubrir y ornamentar objetos de papel o en la industria gráfica para la obtención de tintas de impresión. El acetato de etilo también se emplea en la industria textil para la preparación de tejidos de lana para teñido, en la elaboración, revestimiento y decoración de artículos de cuero y con fines de limpieza. Gracias a su baja toxicidad se utiliza tanto en las industrias farmacéutica como en la de los alimentos; algunas de sus aplicaciones en estos campos son la concentración y purificación de antibióticos (actuando como compuesto de trabajo en las etapas de extracción) o la preparación de esencias y sabores sintéticos.

En el laboratorio, las mezclas que contienen acetato de etilo se utilizan de manera muy habitual en las operaciones de cromatografía y extracciones; debido a que es ligeramente volátil a temperatura ambiente y tiene una temperatura de ebullición de 77 °C se puede retirar muy fácilmente de una muestra poniéndola en un baño maría, proporcionando la ventilación adecuada.

1.5.2.3 - Acetato de etilo en el mundo

En la *Figura 1.11* se resume la distribución del mercado del acetato de etilo, según aplicación, para el año 2021. Para ese año, la demanda global alcanzó, aproximadamente, 4 millones de toneladas métricas¹⁸.

A nivel mundial, en el año 2021, el mercado global de acetato de etilo alcanzó los 1700 millones de dólares, de acuerdo a estadísticas realizadas por TrendEconomy.com. Los principales países que controlan la demanda de este compuesto son China, India y Reino Unido, entre otros. En la *Figura 1.12* se muestra la distribución del mercado global de este compuesto.



*Figura 1.11 - Distribución del mercado global del acetato de etilo, por aplicación. Elaboración propia.*¹⁹ *Figura 1.12 - Distribución del mercado global del acetato de etilo. Elaboración propia.*²⁰

Puede observarse que China lidera el mercado de este producto, con un 32 % aproximadamente del total demandado para ese año. Le siguen India y Reino Unido con un 9,6 y 9,2 %, respectivamente.

¹⁸ Ref. N° 18

¹⁹ Ref. N° 18

²⁰ Ref. N° 18

1.5.2.4 - Acetato de etilo en Argentina

En lo que respecta a la Argentina, la producción de acetato de etilo cesó en el año 2017, cuando la única empresa productora, Atanor S.A., cerró sus instalaciones. Esto implicó que las exportaciones de este producto disminuyeran gradualmente con los años, hasta volverse nulas para el año de cierre. Sin embargo, hasta ese año, las importaciones en el país aumentaron, como puede observarse en la *Figura 1.13*.

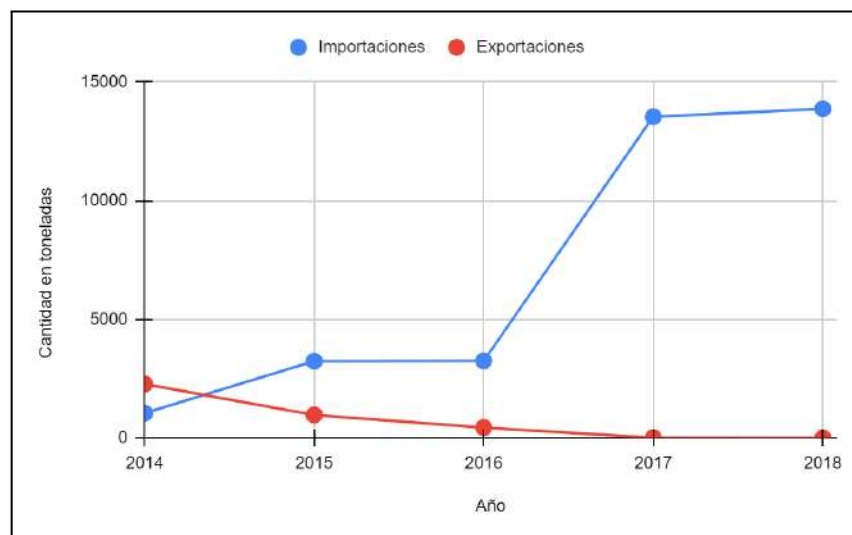


Figura 1.13 - Importaciones y exportaciones de acetato de etilo en Argentina. Elaboración propia. ²¹

Si bien sólo se registraron valores para el mercado de este producto hasta el año 2018, puede notarse el drástico aumento que tuvo su demanda para el fin del período considerado, por lo que se considera que esta tendencia se mantuvo en los años venideros. De ser cierta esta consideración, se podría comercializar al subproducto formado con la producción del acetaldehído en el mercado interno, abasteciendo parte de la demanda del país. De esta manera, se podría aumentar el beneficio total obtenido por la venta del producto principal.

²¹ Ref. N° 18

1.6 - Definición de la capacidad de la planta

1.6.1 - Análisis de Mercado

Para establecer el precio de los productos involucrados en la producción de acetaldehído, se analizaron datos a nivel internacional, procurando consultar fuentes confiables y valores actualizados. Sin embargo, gran parte de las fuentes no ofrecen su información de manera gratuita, por ende, es escaso el material disponible, y no es posible establecer un promedio preciso. Con los datos que se lograron obtener, así estén desactualizados, es posible establecer una estimación para el precio de venta de estos productos y luego, en caso de que el proyecto se acepte, se realizarán los estudios de mercado correspondientes para contar con mayor precisión en la estimación.

Además del precio, es necesario especificar la pureza y condiciones de venta de los productos, para luego poder diseñar los equipos involucrados en el proceso en base a estos parámetros.

En cuanto al precio del producto principal, acetaldehído, se ha decidido recurrir a la página web “Chemanalyst”, que ofrece valores de este producto para distintos países y actualizados a diciembre del año 2022. Dada la variación en los precios, se promedian los valores para los distintos países entre los años 2021 y 2022. El valor final es de **1,749 USD/kg (1,378 USD/L)**.

La pureza requerida es del 99,7 % en masa, y su comercialización a granel se realiza a presión y temperatura ambiente.

En cuanto al precio del hidrógeno, es difícil contar con una estimación directa debido a dos factores, principalmente: por un lado, el mercado se encuentra en pleno desarrollo, por lo que no hay precios regulados y establecidos; por otro lado, no se puede categorizar al hidrógeno obtenido en este proceso dentro de las categorías mencionadas, dado que se encuentra entre las categorías de hidrógeno azul y verde. Se considera, entonces, un promedio entre los precios de mercado para estos dos tipos. En base a bibliografía consultada, se puede estimar un precio para el hidrógeno azul de 1,4 a 1,8 USD/kg, mientras que para el verde de 1,6 a 2,7 USD/kg. Se considera entonces, un **precio promedio para el hidrógeno de 2 USD/kg**.

En cuanto a las condiciones de almacenamiento y venta, se tratarán en detalle en el *Capítulo 6*.

Con respecto al acetato de etilo, se ha recurrido al mismo método que para el acetaldehído, es decir, promediar los precios obtenidos en Chemanalyst entre el año 2021 y el 2022. El valor final es de **1,504 USD/kg (1,357 USD/L)**. La pureza comercial de este producto suele estar en torno al 99 % en masa y su comercialización a granel también se realiza a presión y temperatura ambiente.

1.6.2 - Capacidad de la planta

A la hora de definir la capacidad de producción de la planta propuesta es necesario realizar un análisis económico a nivel nacional y global acerca de las cantidades aproximadas que se manejan dentro de sus respectivos mercados. Como se mencionó anteriormente, el análisis del mercado interno de acetaldehído nos indica que actualmente ninguna empresa lo produce en el país, sino que todo lo que se consume es importado, siendo estas importaciones del orden de las 0,25 Ton/año. Este resultado también se repite en los países de América del Sur, con excepción de Brasil que posee una participación activa en el mercado internacional de este producto, sin embargo no es significativa con respecto a los mayores productores y consumidores a nivel mundial.

Teniendo en cuenta que China es uno de los principales consumidores de acetaldehído a nivel mundial (le corresponde aproximadamente el 47 % del consumo total en el año 2020), y sabiendo que en los últimos años Argentina ha fortalecido las relaciones comerciales con este país, se define la capacidad de la planta fijando un 1,5 % de las cantidades consumidas en ese año por China, como sigue:

La *Figura 1.6* informada en la *Sección 1.4.5* muestra que el consumo de acetaldehído por parte de China representa un 47 % del consumo mundial: 564.000 Ton/año.

$$\text{Consumo en China (año 2020)} = 1.200.000 \text{ ton/año} * 0,47 = 564.000 \text{ ton/año}$$

Luego, la capacidad (Q) necesaria resulta:

$$Q = 564.000 \text{ ton/año} * 0,015 = 8460 \text{ ton/año}$$

Teniendo en cuenta el mercado interno y otros posibles importadores de Latinoamérica, se define una **capacidad de diseño de 8500 ton/año**.

Este valor es acorde a las capacidades instaladas para plantas similares: una de ellas es la correspondiente a la empresa Atanor S.A., que se encontraba en operación en Argentina hasta el año 2017, con una capacidad de 9000 Ton/año. Otra de las plantas consideradas para la comparación es la de Cloroetil S.A., con una capacidad de 10.000 Ton/año.

1.6.3 - Requerimiento de materia prima

Definida la capacidad de la planta, es preciso conocer la cantidad de bioetanol que será empleada en el proceso productivo. Para dicho cálculo se debe conocer la conversión y selectividad de la reacción de deshidrogenación, parámetros que se verán afectados por las condiciones de reacción y la elección del catalizador.

Para obtener la cantidad de etanol requerida, se utiliza la siguiente ecuación:

$$Etanol (ton/año) = \frac{Acetaldehído (ton/año) * P_{Metanol}}{P_{Macetaldehído} * Rendimiento \left(\frac{\text{moles de acetaldehído obtenidos}}{\text{moles de etanol que ingresaron}} \right)}$$

Luego para obtener la cantidad de etanol en volumen se debe dividir el resultado por su densidad.

$$Etanol (m^3/año) = Etanol (ton/año) \cdot 1000 (kg/ton) / 780 (kg/m^3)$$

Finalmente, este valor volumétrico representa un porcentaje del uso de bioetanol que la planta produce.

$$\% \text{ de producción} = \frac{Etanol (m^3/año)}{200.000 (m^3/año)} \cdot 100\%$$

Idealmente, la planta recircula al reactor el total del etanol no reaccionado, por lo tanto, la conversión global es del **100 %**. La aplicación del reciclo se detalla en el *Capítulo 2*.

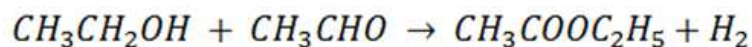
Del artículo publicado por Church²² se obtiene que el rendimiento de la reacción es del 90 % aproximadamente para el acetaldehído (Y_{AcH}). La elección de este valor será objeto de estudio en el *Capítulo 2*.

Estos resultados serán útiles para la justificación preliminar del proyecto que se muestra más adelante. Finalmente, la cantidad de etanol requerida para producir las 8500 ton/año de acetaldehído es de **9877,5 ton/año** (o **12.663,5 m³/año**). En estas condiciones, se estaría utilizando un 6,5 %, aproximadamente, respecto a la producción total de bioetanol.

²² Ref. N° 12

1.6.4 - Subproductos

Como se explica en el apartado “Deshidrogenación catalítica del etanol”, sólo se consideran dos reacciones. La principal, que produce acetaldehído e hidrógeno, y la secundaria, que produce acetato de etilo e hidrógeno.



Es importante considerar que el etanol se consume en ambas reacciones y que parte del acetaldehído de la primera reacción se consume en la segunda, por ende, por cada mol que se produce de acetato de etilo, se requieren, en total, dos de etanol.

$$\text{Etanol total (mol/tiempo)} = \text{Acetaldehído(mol/tiempo)} + 2 * \text{Acetato de etilo(mol/tiempo)}$$

Para calcular la producción de acetato de etilo se hace uso del rendimiento para el acetaldehído (Y_{AcH}):

$$Y_{AcH} = \frac{\text{Acetaldehído (mol/tiempo)}}{\text{Etanol (mol/tiempo)}}$$

$$Y_{AcH} = \frac{\text{Acetaldehído (mol/tiempo)}}{\text{Acetaldehído (mol/tiempo)} + 2 * \text{Acetato de etilo (mol/tiempo)}}$$

Luego, se despeja la producción molar del acetato de etilo:

$$\text{Acetato de etilo (mol/tiempo)} = \frac{\text{Acetaldehído (mol/tiempo)} * (1 - Y_{AcH})}{2 * Y_{AcH}}$$

Finalmente, multiplicando el resultado por el peso molecular del acetato de etilo, se obtiene la masa producida: **944,4 Ton/año**

Para el hidrógeno, los moles producidos son iguales a los moles totales consumidos de etanol. Luego, se afecta el resultado por el peso molecular del hidrógeno: **428,8 Ton/año**

1.7 - Localización de la planta

A continuación se resumen algunos factores a considerar para la localización de la planta:

<i>Geograficos</i>	Clima Comunicaciones Medio ambiente
<i>Institucionales</i>	Tratamiento impositivo Marco legal, seguridad jurídica Políticas de desarrollo industrial
<i>Sociales</i>	Facilidades habitacionales Educación, salud, seguridad Aceptación social
<i>Economicos</i>	Disponibilidad y costo de: - Mano de obra - Materia prima - Insumos y suministros - Terrenos
<i>Comerciales</i>	Proximidad a: - Mercados de productos - Mercados de materias primas Facilidades de exportación
<i>Laborales</i>	Capacitación de la mano de obra Clima sindical
<i>Infraestructura</i>	Disponibilidad de agua, energía eléctrica, combustibles (gas, diésel)
<i>Operacionales</i>	Existencia y características de: - Parques industriales - Facilidades para la eliminación de desechos - Rutas, puertos, aeropuertos, etc.

Entre estos factores, se da especial interés al comercial:

La cercanía a los mercados repercute en la necesidad de transporte, cuyo gasto se verá reflejado en los costos de producción. Como regla general, cuanto menor sea la distancia y la cantidad de materia a transportar, menor será el costo.

Ubicación de los mercados:

Dada las características del proyecto, la materia prima (bioetanol) sólo podrá obtenerse de la planta actual, ubicada en Acherál, Tucumán. Y dado el bajo consumo de acetaldehído a nivel nacional, se plantea su exportación a los principales mercados del mundo, por ende, se debe considerar el transporte de los productos hasta el puerto mercante más cercano, el mismo corresponde al puerto Enapor en Rosario, Santa Fe.

Cantidad de materia a transportar:

En base a los valores de rendimiento reportados se observa que necesariamente la cantidad de producto es menor a la de materia prima. Teniendo en cuenta que la densidad de ambos compuestos es muy similar, se puede concluir que transportar el producto formado es más conveniente que la materia prima

Desde el punto de vista del transporte, es más económico ubicar la planta junto a la existente, a fin de movilizar menos carga.

Otra ventaja de instalar la planta junto a la existente es en relación a la infraestructura, dado que la planta actual cuenta con los suministros necesarios de electricidad, agua y combustible que pueden ser aprovechados por la nueva planta.

La planta actual de bioetanol se encuentra emplazada en una superficie de 12 hectáreas, y se considera que la subplanta para la producción de acetaldehído puede adicionarse en este mismo terreno. Este es otro motivo que impulsa a seleccionar esta localización para la planta propuesta, ya que, además, todas las modificaciones necesarias para contar con acceso a los diferentes servicios e insumos ya fueron previamente tenidas en cuenta, y sólo bastaría contar con una adición a las existentes.

Por lo expuesto, **se decide situar la planta en la localidad de Acherál, Tucumán**, junto a la planta de producción de bioetanol.

1.8 - Justificación preliminar del proyecto

Como primera justificación para el avance del proyecto, se comprueba si los ingresos por la venta del acetaldehído y los subproductos, el hidrógeno y el acetato de etilo, superan a los del bioetanol, su materia prima.

1º) Ingresos por venta del acetaldehído, hidrógeno y acetato de etilo

Anteriormente, se definió una capacidad de producción de 8500 Ton/año de acetaldehído y, en base al análisis del mercado, un precio de venta de 1,749 USD/kg.

$$\text{Ingresos} = 8500 (\text{ton/año}) * 1000 (\text{kg/ton}) * 1,749 (\text{USD/kg})$$

$$\text{Ingresos} = 14.866.500 (\text{USD/año})$$

La producción de hidrógeno se calculó en 428,8 ton/año y se toma como precio de venta 2 USD/kg.

$$\text{Ingresos} = 428,8 (\text{ton/año}) * 1000 (\text{kg/ton}) * 2,0 (\text{USD/kg})$$

$$\text{Ingresos} = 857.600 (\text{USD/año})$$

Para el acetato de etilo se calculó una producción de 944,4 ton/año y un precio de venta de 1,504 USD/kg.

$$\text{Ingresos} = 944,4 (\text{ton/año}) * 1000 (\text{kg/ton}) * 1,504 (\text{USD/kg})$$

$$\text{Ingresos} = 1.420.444,4 (\text{USD/año})$$

$$\text{Ingresos totales} = \text{Ingresos por Acetaldehído} + \text{Ingresos por } H_2 + \text{Ingresos por Acetato}$$

$$\text{Ingresos totales} = 17.144.544 (\text{USD/año})$$

2º) Ingresos por venta del bioetanol

El precio del bioetanol en Argentina es de \$129,309 ²³ el litro, valor regulado por la Secretaría de Energía dependiente del Ministerio de Economía de la Nación.

A la fecha, el cambio del dólar oficial es de 184,12 \$/USD, es decir que el precio del bioetanol es de 0,69 USD/Lt.

Como se indicó en el apartado “requerimiento de materia prima”, para la producción deseada de acetaldehído se requieren 12.663,5 m³/año de bioetanol, entonces:

$$\text{Ingresos} = 12.663,5 \text{ (m}^3\text{/año)} * 1000 \text{ (lt/m}^3\text{)} * 0,69 \text{ (USD/Lt)}$$

$$\text{Ingresos} = 8.737.815 \text{ (USD/año)}$$

En base a los resultados, se observa que el ingreso obtenido por la venta del acetaldehído + hidrógeno + acetato de etilo, supera al ingreso por la venta de la materia prima en un 96,21 %.

En principio y sin considerar los costos fijos ni de producción, el proyecto permite aumentar el beneficio de la empresa. Por lo tanto, **se decide continuar con el análisis de este proyecto.**

En los capítulos siguientes, se desarrollarán con mayor nivel de detalle cada una de las secuencias necesarias para la producción, separación y purificación, con el fin de estimar los costos asociados y finalmente establecer si el proyecto resulta rentable en términos económicos.

²³ Ref. N° 4

Bibliografía Capítulo 1

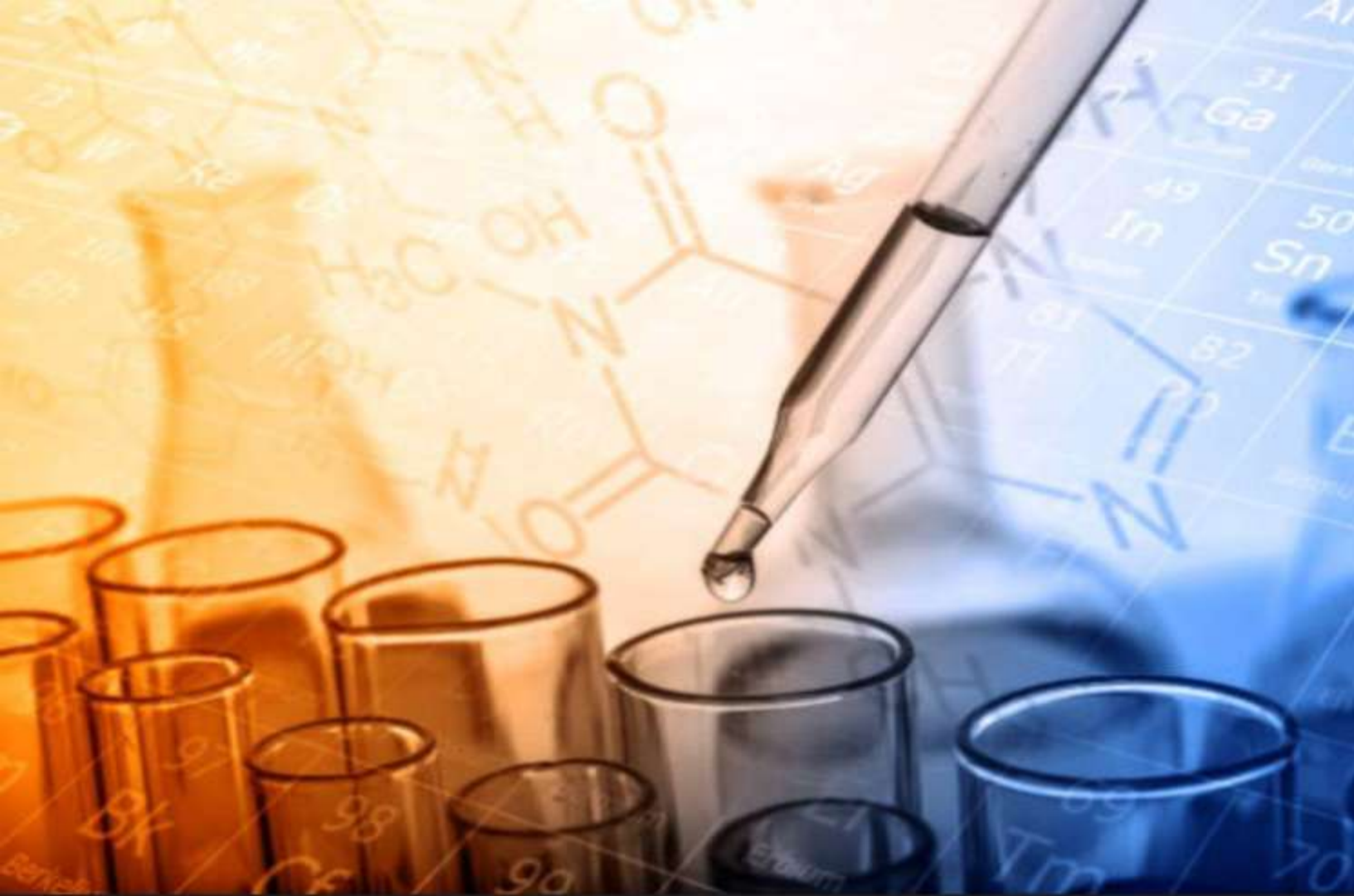
Bibliografía Específica - Capítulo 1

1. “Etanol: El combustible del futuro”. Disponible en:
http://repositorioubasib.uba.ar/gsdll/collect/encrucci/index/assoc/HWA_280.dir/280.PDF.
Fecha de consulta: 04/04/2022
2. Atlas de los biocombustibles líquidos - 2019/2020. Instituto Interamericano de Cooperación para la Agricultura.
3. Ministerio de Agricultura, Ganadería y Pesca: Informes de biocombustibles.
4. Reporte de precios de Bioetanol - Secretaría de Energía de la Nación.
https://glp.se.gob.ar/biocombustible/reporte_precios_bioetanol.php .Fecha de consulta: 16/01/2023
5. Se utilizan las estadísticas disponibles en la página web de la Secretaría de Energía, en la dirección:
<https://www.argentina.gob.ar/economia/energia/hidrocarburos/biocombustibles>
<http://datos.energia.gob.ar/dataset/estadisticas-de-biodiesel-y-bioetanol>
6. “ Acetaldehyde Production by Ethanol Dehydrogenation”. Disponible en:
<https://richardturon.faculty.wvu.edu/files/d/c3e16aec-58ec-41c6-95eb-42764d491197/acetaldehyde.pdf> . Fecha de consulta: 01/04/2022
7. “Acetaldehyde” Chemical Economics Handbook. Disponible en:
<https://ihsmarkit.com/products/acetaldehyde-chemical-economics-handbook.html> .
Fecha de consulta: 06/04/2022
8. “Market volume of acetaldehyde worldwide from 2015 to 2020, with a forecast for 2021 to 2026”. Disponible en:
<https://www.statista.com/statistics/1245235/acetaldehyde-market-volume-worldwide/> .
Fecha de consulta: 06/04/2022
9. “Acetaldehyde market- growth, trends, Covid-19 impact, and forecast (2023 - 2028)”
Disponible en: <https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/acetaldehyde-market>
Fecha de consulta: 06/04/22
10. Datos obtenidos de Trade Map (Estadísticas del comercio para el desarrollo internacional de las empresas. Datos comerciales mensuales, trimestrales y anuales. Valores de importación y exportación, volúmenes, tasas de crecimiento, cuotas de mercado, etc). Fecha de Consulta: 06/04/2022
11. Francisco J. Sanchez C. M.Sc. Luis M. Carballo S. M.Sc. Ph.D. ““Estudio cinético para la oxidación selectiva de etanol a acetaldehído”
12. Church, J.M.; Joshi, H.K. *Industrial & Engineering Chemistry*, 43 (8).(1951) 1804-1811. “Acetaldehyde by Dehydrogenation of Ethyl Alcohol”. Disponible en:
<https://es.scribd.com/document/399865720/Church-1951>

13. Mateo, J. y Suster, M. Hacia la economía del hidrógeno: perspectivas de la agenda internacional y las oportunidades locales. Documentos de Trabajo del CCE N° 7, mayo de 2021, Consejo para el Cambio Estructural - Ministerio de Desarrollo Productivo de la Nación.
14. "Hydrogen Generation Market Size, Share & Trends Analysis Report By Systems (Merchant, Captive), By Technology (Steam Methane Reforming, Coal Gasification), By Application, By Source, By Region, And Segment Forecasts, 2022 - 2030"
15. Global Hydrogen Flows: Hydrogen trade as a key enabler for efficient decarbonization (2022) Hydrogen Council, McKinsey & Company. Disponible en:
<https://hydrogencouncil.com/wp-content/uploads/2022/10/Global-Hydrogen-Flows.pdf>
16. Consorcio para el desarrollo de la economía del hidrógeno en Argentina - Resumen de resultados 2021. Disponible en:
https://y-tec.com.ar/wp-content/uploads/2022/03/Informe-de-resultados-2021_web.pdf
17. Hydrogen in Latin America From near-term opportunities to large-scale deployment (2021) - International Energy Agency. Disponible en:
<https://www.iea.org/reports/hydrogen-in-latin-america>
18. Anuario del Instituto Petroquímico Argentino - 2019. Disponible en:
<https://noticiasutnfrn.files.wordpress.com/2020/04/anuario-ipa-2019.pdf>

Bibliografía General - Capítulo 1

- Gago Baronio, Lucía; Orofino Rosella, Aldana; Santucho, María Agustina. “Diseño de una planta de producción de bioetanol”. Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional de Mar del Plata. 2018.
- Amarelle, María Serrano; Hernández Lizarraga, Alesander; Haeffner Murt, Juli; Reyes León, Cecilia; Buscio Olivera, Valentina; Solé i Garrigós, Aran; Martínez Ramón, Eduardo Nicolás. “Planta producción acetaldehído”. Facultad de Ingeniería - Universidad Autónoma de Barcelona. 2009/2010.
- “Aldehídos y Cetonas”. Disponible en: http://agrega.juntadeandalucia.es/repositorio/06072017/36/es-an_2017070612_9130145/0005/cac.htm . Fecha de consulta: 04/04/2022
- “Acetaldehyde Market Analysis: Plant Capacity, Production, Operating Efficiency, Technology, Demand & Supply, End-User Industries, Distribution Channel, Regional Demand”. Disponible en: <https://www.chemanalyst.com/industry-report/acetaldehyde-market-652> . Fecha de consulta: 05/04/2022
- “Atanor cerró dos plantas y despidió 136 trabajadores”. Disponible en: <https://www.cronista.com/negocios/Atanor-cerro-dos-plantas-y-despidio-a-136-trabajadores-20170222-0095.html> . Fecha de consulta: 06/04/2022
- “Forecast global green hydrogen projects’ retail prices 2021”. Disponible en: <https://www.statista.com/statistics/1260117/projected-selling-prices-of-large-scale-hydrogen-green-projects/>. Fecha de consulta: 07/04/2022



CAPÍTULO II

ANÁLISIS CINÉTICO Y
BALANCES GLOBALES DE LA PLANTA

2.1 - Objetivos del capítulo

- Definir la ruta química a seguir para la producción de acetaldehído a partir de bioetanol.
- Analizar la red de reacciones involucradas.
- Especificar la estructura general del proceso y las variables operativas principales.

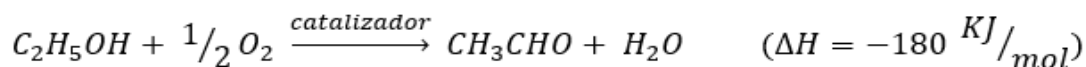
2.2 -Análisis cinético y termodinámico de la reacción

2.2.1 - Definición de la ruta química de producción

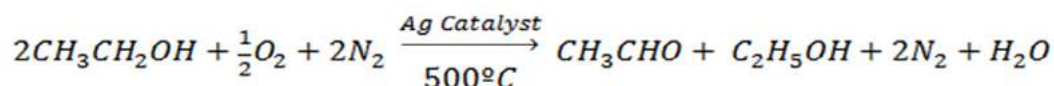
En el *Capítulo 1* se dieron a conocer las distintas maneras de obtener acetaldehído a partir de etanol u otros compuestos. Teniendo presente que la materia prima debe ser necesariamente bioetanol, se definieron dos rutas posibles para la producción: la oxidación y la deshidrogenación, ambas catalizadas por sólidos. Si bien se comentaron aspectos generales acerca de las ventajas que presenta la deshidrogenación sobre a la oxidación, no se mencionaron aspectos relacionados con la termodinámica y condiciones de operación de estas rutas. A continuación se detallan ambas rutas.

2.2.1.1 - Oxidación catalítica del etanol

La reacción principal es la siguiente:



Sin embargo, a nivel industrial este proceso se lleva a cabo mediante la siguiente reacción catalizada:



La reacción se efectúa con etanol en exceso junto a una corriente de aire a, aproximadamente, 500 °C y con un catalizador de plata. En este proceso, el acetaldehído producido se encuentra diluido en una mezcla de agua, nitrógeno y exceso de etanol, siendo la relación entre estos 1:4 (acetaldehído:productos).

La oxidación presenta varias desventajas desde el punto de vista de la termodinámica, condiciones de operación y posterior separación del producto deseado. Las mismas se puntualizan a continuación.

- Por un lado, el calor de reacción es negativo, es decir, se trata de una reacción exotérmica. Esto implica una dificultad a la hora de diseñar el reactor debido a que es necesario tener especial cuidado a la hora de seleccionar los materiales (por las temperaturas elevadas), así como también un adecuado diseño del sistema de enfriamiento del mismo; incluyendo un control de temperatura robusto que permita mantenerse dentro del rango deseado y de esta manera no favorecer la formación de otros productos.
- Por otro lado, en consecuencia de la gran dilución que tiene el acetaldehído en los demás productos, siendo la mayoría de ellos no condensables (principalmente nitrógeno y dióxido de carbono), provoca que su separación sea dificultosa y costosa.
- La presencia de agua en los productos, junto con cantidades apreciables de productos de oxidación tales como ácido acético y ácido fórmico, conllevan a grandes problemas de corrosión en la etapa de condensación y recuperación de productos.
- Sumado a estos efectos, como se tiene una corriente de aire en la alimentación, terminan siendo favorecidas las reacciones secundarias de la oxidación del acetaldehído, lo que en definitiva disminuye el rendimiento del proceso.

2.2.1.2 - Deshidrogenación catalítica del etanol

La reacción principal es la siguiente:



Este proceso se lleva a cabo a temperaturas cercanas a los 300 °C y se emplean, por lo general, catalizadores de cobre, con o sin soporte, con distintos promotores, siendo el más utilizado en la industria el catalizador de cromita de cobre.

Se detallan a continuación las ventajas que presenta esta reacción con respecto a la oxidación del etanol, según sus características termodinámicas.

- La reacción es endotérmica, lo cual implica que la temperatura es más fácil de controlar gracias a que, a medida que la reacción transcurre, consume energía y genera que la temperatura disminuya. Por lo tanto, es más sencillo mantener la temperatura deseada mediante un sistema de calefacción. Además, la temperatura de operación es significativamente menor a la de la oxidación (500 °C), por lo que permite tener una mayor flexibilidad a la hora de seleccionar los materiales de construcción del reactor.
- Los productos son acetaldehído e hidrógeno y se obtienen en relación 1:1. Esto es ventajoso frente a la oxidación donde el acetaldehído se obtiene en relación 1:4 con los demás productos y dificulta su separación final. En este sentido, en la deshidrogenación, el hidrógeno puede separarse fácilmente del producto deseado, el etanol sin reaccionar y demás trazas, mediante una condensación a baja temperatura y un lavado con una solución diluida de alcohol. Este proceso se detalla más adelante en el capítulo.
- Se obtiene, además, un producto de gran interés comercial, el hidrógeno, en relación estequiométrica con el producto deseado.

Analizadas las ventajas de ambas posibles rutas de reacción, se concluye que la forma más conveniente de obtención del acetaldehído es mediante la **deshidrogenación no oxidativa del bioetanol**.

2.2.2 - Sistema de reacciones

En la síntesis de un compuesto orgánico, la reacción deseada se encuentra en competencia junto con otras reacciones, formando una red de reacciones. En la *Figura 2.1* se muestra el set de reacciones posibles durante la producción de acetaldehído. Si bien estas reacciones no deseadas en competencia son posibles, no todas se producen bajo las mismas condiciones de operación, sino que es posible modificar las variables operativas y de diseño como temperatura, presión, tiempo de residencia en el reactor y el tipo de catalizador, para hacer más selectivo el proceso hacia la reacción deseada. Estas condiciones se irán definiendo a lo largo de este capítulo.

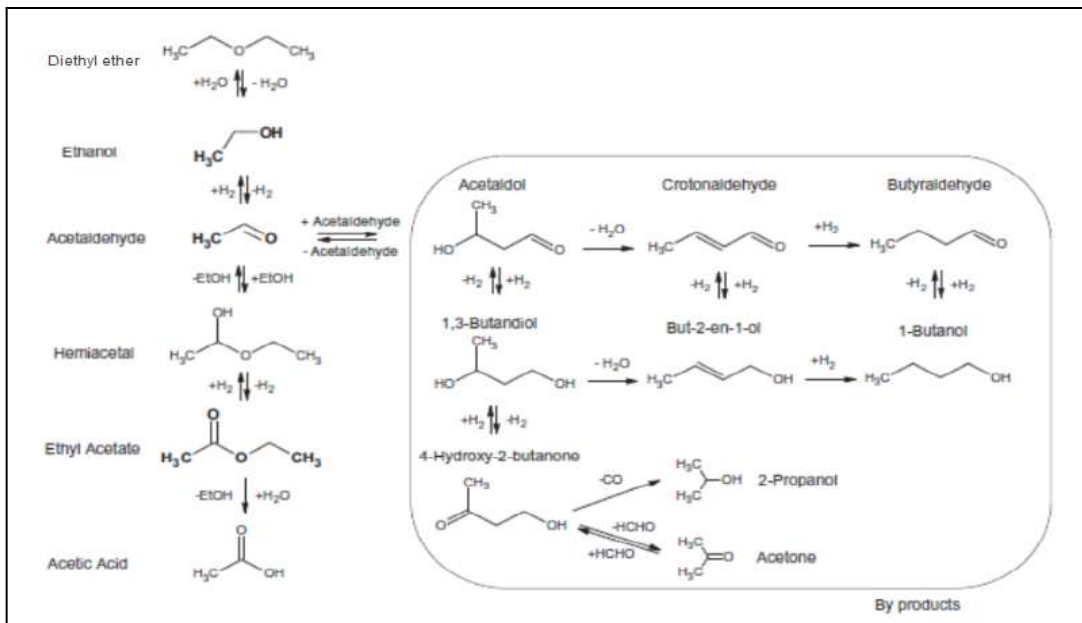


Figura 2.1 - Red de reacciones vinculadas a la deshidrogenación de etanol.²⁴

Esta red de reacciones se obtuvo en base a estudios realizados para la producción de acetaldehído sobre catalizadores de cobre, los cuales son los más utilizados a nivel industrial para llevar a cabo este proceso. En la Sección 2.2.3 se explica con mayor detalle las ventajas que tiene este catalizador para este tipo de reacciones.

De acuerdo a la Figura 2.1, se extraen las siguientes observaciones: el etanol reacciona para dar el acetaldehído e hidrógeno acorde a la reacción expuesta en la Ecuación 2.1. A su vez, el etanol se puede descomponer en éter dietílico a partir de la deshidratación bi-molecular.

A medida que el acetaldehído se forma, éste reacciona con el etanol disponible para dar acetato de etilo, siendo esta la principal reacción en competencia presente en este proceso y se dispone en paralelo con respecto a la deshidrogenación. Dicho compuesto se forma de la siguiente manera: una molécula de acetaldehído reacciona con una de etanol para dar un compuesto intermediario que se denomina hemiacetal, que luego se deshidrogena para dar el acetato de etilo. La reacción es exotérmica, en contraste con la reacción principal que es endotérmica, y esta es la principal diferencia entre ellas. Por último, el acetato de etilo puede sufrir una esterificación reversible para formar ácido acético y etanol.

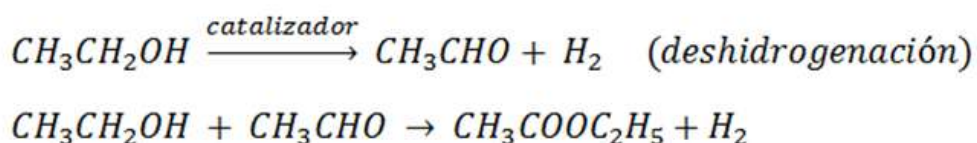
El acetaldehído formado también puede sufrir una condensación, dando lugar a un compuesto llamado acetaldol, que luego tiene distintas ramificaciones para dar diversos productos no deseados. Todos los productos secundarios obtenidos a partir del acetaldol se obtienen en trazas (en las condiciones de trabajo), siendo los componentes más registrados el crotonaldehído y el 1-butanol. Para simplificar el análisis se definió a esta familia de subproductos como “aldoles”.

²⁴ Ref. N° 1

Si bien este sistema de reacciones es extenso, en el estudio realizado para este tipo de catalizador, los productos principales obtenidos son acetaldehído, hidrógeno y acetato de etilo, mientras que los demás productos como: éter dietílico, ácido acético, y productos de condensación (aldoles), se obtuvieron en proporciones muy pequeñas comparadas con los productos principales²⁵.

Como se mencionará en el *Capítulo 3*, no es posible contar con expresiones cinéticas que contemplen la formación de estos compuestos secundarios no deseados. Sumado a que en la bibliografía consultada tampoco se obtienen datos consistentes acerca de cuál es su producción, se decide desestimar a estos componentes del análisis del proceso. En esta etapa preliminar del diseño sólo se tendrán en cuenta los productos principales: acetaldehído, hidrógeno y acetato de etilo. En caso de que se desee continuar con el estudio del proyecto, deberán realizarse los ensayos de laboratorio correspondientes, para poder obtener mayor precisión para la determinación de estos componentes no deseados.

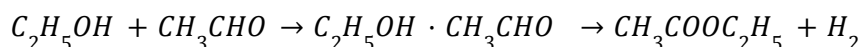
A continuación se resume la red de reacciones propuesta, exponiendo aquellas que tendrán relevancia posteriormente en los balances de masa de la planta:



Como se puede apreciar, la reacción principal de formación de acetaldehído compite en paralelo con la de formación de acetato de etilo. Esto es fundamentalmente una limitación operativa a la hora de definir la conversión que se quiere alcanzar en el proceso debido a que, conforme la reacción avance, el producto deseado formado reacciona para dar el no deseado. Por lo tanto, conversiones altas de reactivo implican bajas selectividades hacia el producto deseado. Es por esto que se debe tomar la decisión de operar hasta conversiones intermedias, maximizando la selectividad hacia el acetaldehído, obteniendo así la menor cantidad posible del acetato de etilo. Esto se logra minimizando el tiempo de residencia que tiene el acetaldehído dentro del reactor, de manera de evitar que siga reaccionando. Se explicará esta variable con mayor profundidad en el capítulo siguiente.

Por otra parte, es necesario analizar la influencia de la presión y temperatura que se tiene sobre estas reacciones. Respecto a la presión de trabajo, dado que se trata de reacciones en fase gaseosa, es posible analizar su influencia de manera cualitativa observando la variación del número de moles, considerando que todas las reacciones son reversibles. Para la reacción de deshidrogenación, 1 mol de gas produce 2 moles de gas, por lo que a presiones bajas la reacción directa se ve favorecida; y sucede lo contrario a presiones elevadas. Si se observa la reacción en competencia, de formación de acetato de etilo, se puede pensar que se tiene el mismo comportamiento, sin embargo, es importante remarcar que este compuesto se forma a partir de la deshidrogenación del compuesto intermedio formado por el etanol y el acetaldehído (hemiacetal), como sigue:

²⁵ Ref. N° 2



La primer reacción (formación de hemiacetal) tiene un cambio en el número de moles Δn negativo, por lo que la reacción directa se ve favorecida a altas presiones. Por lo tanto, la formación de acetato de etilo estará limitada a la formación de este compuesto intermedio favorecido a altas presiones. Esta es una de las principales ventajas que se tienen en el sistema de reacciones en cuanto a las variables operativas que se deben tomar para llevar a cabo el proceso: para favorecer la selectividad hacia acetaldehído se debe trabajar a presiones bajas.

Respecto a la temperatura, se mencionó anteriormente que los calores de reacción para las dos reacciones principales tienen comportamientos opuestos, la deshidrogenación hacia acetaldehído es endotérmica mientras la formación de acetato de etilo exotérmica. Altas temperaturas de operación favorecen ambas reacciones, sin embargo la reacción no deseada se verá más favorecida debido a su calor de reacción negativo. Esto implica que se debe seleccionar un rango de temperaturas acorde a lo que se mencionó anteriormente con respecto a las conversiones a alcanzar; es decir, lo suficientemente alta como para tener una buena velocidad de reacción para la obtención de acetaldehído, pero sin beneficiar por demás la reacción en competencia. Sumado a esto, las temperaturas de trabajo están condicionadas por los materiales a utilizar en el reactor, el material del catalizador, los puntos de ignición o descomposición de los compuestos, así como también la posibilidad de obtener productos de otras reacciones secundarias no deseadas.

Del análisis termodinámico se destaca que la reacción de deshidrogenación no ocurre a condiciones normales de presión y temperatura (CNPT). Esto se debe a que la Energía Libre de Gibbs en tales condiciones es positiva, lo cual implica que la reacción no es espontánea. A medida que la temperatura se incrementa, la energía de Gibbs disminuye hasta pasar a valores negativos, donde la reacción es espontánea.

Del análisis cualitativo del sistema de reacciones a emplear surgen las siguientes conclusiones: se debe operar hasta conversiones intermedias de reactivo, a presiones bajas y a temperaturas intermedias. A lo largo de este capítulo se definirán con mayor precisión estas variables, pero se espera que sigan la tendencia analizada.

Es pertinente comentar, que un co-producto de gran importancia es el hidrógeno. El mismo, como se ha comentado en varias oportunidades, tiene tanto valor comercial como valor energético para ser utilizado dentro de la planta. Ya sea por la obtención del acetaldehído como la del acetato de etilo, en ambas ocasiones se genera hidrógeno gaseoso de alta calidad. Todas las propuestas mencionadas para optimizar la producción de acetaldehído son válidas para el hidrógeno dado que se produce en relación estequiométrica con el producto deseado.

2.2.3 - Catalizadores

2.2.3.1 - Catálisis

La catálisis es el proceso mediante el cual se puede modificar la velocidad de una reacción química a partir de la incorporación de un compuesto conocido como catalizador. Este catalizador participa dentro de alguna de las etapas en que se lleva a cabo la reacción, sin formar parte de la estequiometría del proceso global, pero que cambia las propiedades cinéticas del sistema reaccionante. En catálisis heterogénea, el catalizador tiene un estado de agregación diferente a la de los reactivos y productos. Generalmente es sólido, los reactivos y productos están en una o más fases fluidas (gas o líquida) y la reacción catalítica se lleva a cabo sobre la superficie del sólido. Es decir, el catalizador provee un camino alternativo para la reacción.

El catalizador actúa como intermediario de reacción, proporcionando un mecanismo distinto para que se lleve a cabo la misma. Este mecanismo resulta ser más conveniente desde el punto de vista cinético. La energía necesaria para llevar a cabo la reacción con este nuevo mecanismo ahora es menor que para el caso de la reacción sin catalizar. Entonces, la energía de activación de la reacción catalizada es menor, lo cual implica que la velocidad de reacción sea mayor. Esta situación se ve representada en la *Figura 2.2*: sin catalizador, la energía de activación es la energía necesaria para la formación del complejo activado, mientras que para catálisis heterogénea esta energía es el resultado de todas las etapas involucradas en su mecanismo de acción, que siempre termina siendo más favorable desde el punto de vista energético.

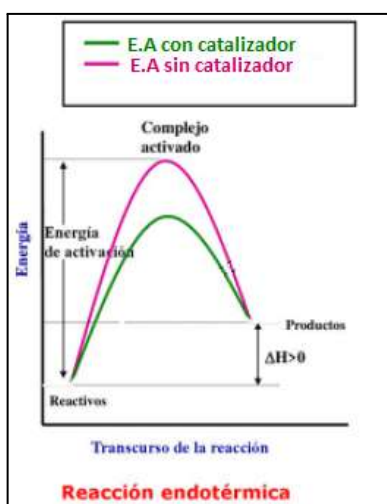


Figura 2.2 - Comparación de la energía de activación (E.A) empleando o no un catalizador.

Es necesario aclarar que el catalizador no modifica las condiciones termodinámicas de la reacción, es decir, tanto la entalpía de la reacción como el cambio en la energía libre no se ven modificadas. Si una reacción no es favorable desde el punto de vista termodinámico, introducir un catalizador no hará que sea viable.

La reacción catalítica incluye tres etapas elementales: adsorción del reactivo, formación y descomposición del complejo activado en la superficie y desorción del producto. Cada una de estas etapas tiene su propia energía de activación. En la *Figura 2.3* se observa que la etapa que mayor energía requiere es la adsorción del complejo activado, siendo ésta mucho menor a la energía de activación de la reacción sin catalizar.

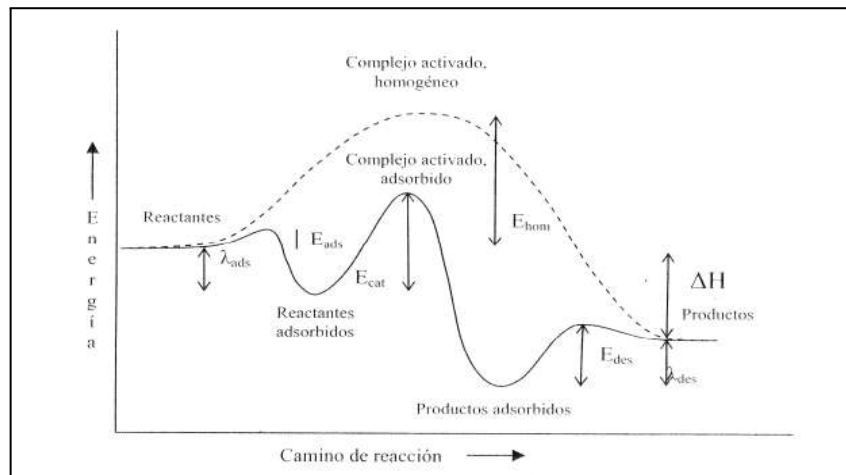


Figura 2.3 - Etapas de una reacción química con y sin catalizador.

Como se mencionó anteriormente, el reactivo debe absorberse sobre la superficie y, entonces, es muy importante disponer de una gran superficie de contacto para que el reactivo pueda absorberse y posteriormente reaccionar. Es por esto que se emplean sólidos porosos, los cuales proveen una gran superficie de contacto para llevar a cabo la reacción.

Evidentemente, es ventajoso utilizar catalizadores sólidos para favorecer la velocidad de las reacciones llevadas a cabo en un proceso. A continuación se profundizará el análisis sobre el catalizador para evaluar las distintas variables que entran en juego a la hora de seleccionar el más indicado para la producción de acetaldehído.

2.2.3.2 - Propiedades de los catalizadores

Los parámetros más importantes a la hora de seleccionar un catalizador son los siguientes: selectividad respecto al producto deseado, conversión que puede alcanzar y vida útil. Para que el uso de un catalizador a nivel industrial sea conveniente, éste debe ponderar de forma adecuada estas tres propiedades.

La industria actual se enfoca principalmente en un principio: los procesos se deben llevar a cabo implementando la menor cantidad de energía posible, con el mayor aprovechamiento de la materia prima posible, de manera de minimizar los costos de operación y tener una mejor rentabilidad final. Por este motivo, a la hora de seleccionar un catalizador, se priorizan sus propiedades de la siguiente manera:

$$\textit{selectividad} > \textit{vida útil} > \textit{actividad}$$

Esto dependerá principalmente de la estructura y composición del catalizador, así como también de las variables operativas del proceso en el que se desarrolla la reacción.

Típicamente, los catalizadores están compuestos por un componente o fase activa, un soporte y uno o varios promotores. A continuación se describe cada una de sus partes para analizar la influencia que tienen sobre la selección final del mismo.

2.2.3.3 - Fase activa

El componente activo es el responsable de acelerar la reacción principal, es decir es el catalizador en sí. El reactivo interactúa con este material al depositarse sobre sus sitios activos formando un intermediario de reacción, para luego dar el producto deseado y, así, desorberse liberando el sitio activo. Existen varios tipos de compuestos que actúan como la fase activa del catalizador, y a cada uno de ellos se los utiliza para catalizar distintas reacciones, a continuación en la *Tabla 2.1* se mencionan algunos ejemplos:

Tabla 2.1 - Tipos de catalizadores comunes.

	Tipo de fase activa	Reacciones catalizadas
Metales	Fe, Co, Ni, Cu, Rh, Ru, Pd, Ir, Pt, Au	Hidrogenación, deshidrogenación, síntesis, oxidación
Óxidos	V, Mn, Fe, Cu, Mo, Al, Si, Sn, Pb, Bi	Oxidación de hidrocarburos y CO, craqueo, isomerización, alquilación
Sulfuros	Co, Mo, W, Ni	Hidrodeshidrosulfuración, hidrodeshidnitración, hidrogenación
Carburos	Fe, Mo, W	Hidrogenación

2.2.3.4 - Soportes

Un soporte consiste en un material inerte en el cual se deposita o impregna el catalizador. Se utiliza por dos motivos: para poder distribuir de manera más eficiente el catalizador y así aumentar su efectividad a la hora de llevar a cabo la reacción; y para mejorar la estabilidad y resistencia del catalizador, así como también su actividad.

Si bien estos soportes son fabricados a partir de materiales inertes, puede contribuir a la actividad catalítica total, es decir, junto con el catalizador, y esto depende principalmente del tipo y las condiciones de reacción.

La selección de un soporte se basa en ciertas características:

- Propiedades mecánicas deseables: resistencia al desgaste, dureza, resistencia a la compresión.
- Estabilidad bajo condiciones de reacción y regeneración.
- Gran superficie de contacto y porosidad.
- Bajo costo.

Dentro de una gran variedad de materiales posibles, sólo algunos de ellos reúnen estas características de manera óptima. Entre ellos se pueden mencionar: alúmina, sílica gel, zeolitas y carbón activado, siendo la alúmina el soporte más utilizado a nivel industrial. A continuación se detallan las características principales de estos soportes de manera de tener un mayor alcance a la hora de seleccionar el catalizador para llevar a cabo el proceso. En la *Tabla 2.2* se resumen las propiedades físicas de esos soportes..

Alúmina

La alúmina (Al_2O_3) es el soporte más utilizado a nivel industrial debido a que es barato, estructuralmente estable y se lo puede preparar con una amplia variedad de tamaños de poros y distribución de los mismos. Este soporte se encuentra generalmente en la forma $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ y ofrece una gran área superficial (típicamente entre 250 y 350 m^2/g). En la industria los procesos llevados a cabo con este soporte no exceden temperaturas mayores a los 600 °C, debido a que a mayores temperaturas el soporte se descompone dando lugar a otras estructuras.

Sílica gel

Los soportes de sílica gel utilizados comercialmente tienen una elevada área superficial, tanto como 700 m^2/g en las mejores condiciones, en contraste con una mala distribución de poros y un reducido tamaño de poros promedio. Esta es la principal diferencia con la alúmina ya que posee mejor distribución y tamaño de los poros en su interior, lo que implica que la sílica presente mayores resistencias a la difusión interna de las moléculas y, por lo tanto, disminuya la efectividad del catalizador. Sin embargo, la sílica presenta un mejor desempeño y estabilidad respecto a la alúmina en condiciones de reacción ácidas, por ser un material muy inerte.

Carbón activado

El carbón activado es ampliamente usado en la industria en diferentes formas tales como: material absorbente, filtrante, entre otros, y una pequeña fracción es utilizada en catálisis heterogénea. Por lo general este material se utiliza como soporte para catalizadores de metales nobles.

En este soporte, el área superficial puede llegar hasta valores de 1200 m²/g pero la gran parte de este se encuentra formado por poros muy finos, los cuales son muy susceptibles a ser estrangulados por depósitos. Si bien el área superficial que ofrece este soporte es elevada, el hecho de que suceda dicho fenómeno en su interior tiene consecuencias negativas a la hora de llevar a cabo la reacción porque la difusión interna en la partícula se ve dificultada. Entonces, habrá una concentración menor de reactivos y la velocidad de reacción será menor consecuentemente.

Otra desventaja que tiene el carbón activado es que por lo general no puede ser regenerado, sino que el catalizador se recupera quemando el soporte.

Tabla 2.2 - Propiedades físicas de soportes comerciales comunes.

Soporte	Superficie específica [m²/g]	Volumen de poros [cm³/g]	Tamaño medio de poros [nm]
Alúmina	100 - 300	0,4 - 0,5	6 - 40
Sílice	200 - 600	0,4	3 - 20
Carbón activado	500 - 1500	0,6 - 0,8	0,6 - 2

2.2.3.5 - Promotores

El término promotor, se refiere en general a una sustancia que, cuando se agrega en cantidades relativamente pequeñas durante la preparación del catalizador, tiene un efecto positivo sobre la actividad, selectividad o estabilidad del mismo.

Entre la gran variedad de promotores que existen, se los puede clasificar en promotores texturales y promotores estructurales. Los texturales, también llamados estabilizadores, actúan mediante un efecto físico, mientras que los estructurales lo hacen mediante un efecto químico.

Los promotores texturales se utilizan con el objetivo de estabilizar el conjunto componente activo-soporte. Este promotor actúa dispersando de manera efectiva la fase activa sobre todo el soporte, previniendo que se den efectos de sinterizado al trabajar a altas temperaturas. Esto facilita la fabricación de los componentes del catalizador. Este proceso no altera la estructura química del metal que se utilice como catalizador, ya que se trata de un proceso físico. La característica principal que debe tener una sustancia para ser un promotor textural es tener un punto de ebullición relativamente alto con respecto al catalizador. Los más utilizados en la industria son los óxidos de: silicio, aluminio, zirconio, cromo, cerio, magnesio, titanio.

Por otro lado, los promotores estructurales se utilizan como aditivos para mejorar la actividad o selectividad del componente activo del catalizador, la principal diferencia con los texturales, es que los estructurales actúan mediante un efecto químico, modificando la composición química del catalizador. El mecanismo de acción de estos promotores se da por una quimisorción en los sitios activos, previniendo que otras sustancias no deseadas se depositen sobre los mismos. De esta manera, se previene que el catalizador se desactive con facilidad, si se trata de sustancias que produzcan ensuciamiento o envenenamiento, o bien se favorece la selectividad de el producto deseado , si se trata de sustancias que compiten con el reactivo de la reacción deseada para ocupar los sitios activos y formar otros productos.

2.2.3.6 - Desactivación

La actividad de un catalizador está asociada a la velocidad de consumo del reactivo. Se entiende por *desactivación* a la pérdida de actividad del catalizador, lo cual ocurre cuando los sitios activos del mismo dejan de ser accesibles para el reactivo. La desactivación se genera por diversas causas, entre las cuales se destacan las siguientes:

→ *Desactivación por ensuciamiento*: se produce por la deposición física de sustancias provenientes de la fase fluida sobre la superficie del catalizador. Esto ocasiona la pérdida de actividad catalítica debido al bloqueo de los sitios activos o al bloqueo del sistema de poros para acceder hasta el sitio activo.

La pérdida de actividad por el ensuciamiento es reversible.

→ *Desactivación por envenenamiento*: ocurre cuando tiene lugar una quimisorción fuerte de reactivos, productos o impurezas sobre sitios activos disponibles para llevar a cabo la reacción.

Esta desactivación puede ser reversible o irreversible, dependiendo de la fuerza con la que están quimisorbidas las especies.

→ *Desactivación por sinterización*: se genera por la dilatación térmica de los metales catalíticos a altas temperaturas ($\sim 40\% T_{\text{fusión,cat}}$), provocando el colapso de los poros e impidiendo acceso a los sitios catalíticos

→ *Desactivación por degradación química*: es consecuencia de la reacción química del catalizador, produciendo una especie inactiva para la catálisis.

→ *Desactivación por fallas mecánicas*: puede ocurrir por obstrucción de los sitios activos, como sucede en el aplastado y fractura del catalizador; o por la pérdida del catalizador en la corriente de productos, como sucede en el desgaste y erosión, donde parte del catalizador se pierde en pequeñas partículas.

La desactivación del catalizador debe ser considerada en el diseño del sistema de reacción de la planta, dado que representa una pérdida de la conversión con el tiempo. Se debe contar con información suficiente acerca de esta desactivación para el diseño del reactor o sistema de reactores, dado que la velocidad de desactivación del catalizador y su posterior regeneración son condicionantes de la elección de uno u otro tipo de reactor. Esta situación se expondrá en detalle en el *Capítulo 3*.

2.2.3.7 - Comercialización

Si bien es posible sintetizar el catalizador en la propia planta, la elección de un catalizador comercial cuenta con numerosas ventajas:

- No es necesario disponer de los equipos para sintetizarlo.
- El catalizador está estandarizado, lo cual es garantía de que sus parámetros no cambian entre cada compra.
- Dispone de mayores estudios.
- El costo de fabricación es menor, debido a su producción en mayor escala.

2.2.3.8 - Disponibilidad de datos

Con el fin de lograr un diseño preciso, que presente el menor margen al error, es necesario obtener la mayor cantidad de datos respecto al catalizador, desde su conversión y selectividad máxima hasta sus características estructurales: velocidad de envenenamiento, tiempo de regeneración, datos cinéticos, entre otros.

Son reducidas las fuentes que cuentan con estudios extensos sobre los catalizadores utilizados en la reacción de deshidrogenación del etanol. Sin embargo, dada la imposibilidad de realizar estudios propios, se debe contar con ellas de manera de obtener los datos necesarios para desarrollar el proyecto.

2.2.3.9 - Análisis de posibles catalizadores

La deshidrogenación de etanol se puede llevar a cabo sobre distintos catalizadores, los cuales se pueden clasificar principalmente en metales nobles, y otros metales no-nobles y sus óxidos.

Los catalizadores de metales nobles se aplican por lo general en los procesos de combustión y en la deshidrogenación de alcoholes debido a que son altamente activos y selectivos hacia los productos deseados. Dentro de los catalizadores de metales nobles se encuentran el platino, el oro, el paladio, entre otros. Si bien estos catalizadores son muy activos y selectivos, no son convenientes desde el punto de vista económico, y desde el punto de vista ambiental, debido a que no son compuestos que se encuentren en gran abundancia en la naturaleza.

Es por este motivo que a nivel industrial, la deshidrogenación de etanol se produce principalmente con catalizadores de metales no-nobles y sus óxidos. Esta reacción ha sido estudiada extensamente sobre varios catalizadores tales como: Cu, CuO, Zn, ZnO, Co, entre otros, sobre distintos soportes: principalmente alúmina y sílice.

Históricamente en la industria se utilizaron catalizadores de Cu reducido dado a que presentan la mayor selectividad hacia el acetaldehído respecto al acetato de etilo, y son los catalizadores óptimos para obtener hidrógeno de alta pureza, como expone Santacesaria²⁶ en su estudio. Estos catalizadores tienen una principal desventaja y es su desactivación, la cual se da por dos motivos principales: el ensuciamiento por coque y el sinterizado.

La formación de éter dietílico producto de la deshidratación del etanol provoca que se deposite coque sobre las bocas de los poros conforme avanza el tiempo de operación, hasta tal punto que obstruye totalmente el paso del reactivo hacia los sitios activos del catalizador (en el peor caso posible). Esto se produce en un tiempo relativamente corto, del orden de las horas, y es por esto que es necesario regenerarlo constantemente para mantener los niveles de actividad relativamente constantes durante todo el proceso. Para regenerar el catalizador es necesario hacerle pasar una corriente de oxígeno asegurando un determinado tiempo de contacto, de manera de oxidar estas deposiciones de coque. El principal problema de esto es que esta regeneración se debe llevar a cabo a temperaturas elevadas, y el catalizador es sensible a los efectos de desactivación por sinterizado, proceso irreversible. Sin embargo, teniendo un adecuado sistema de control de temperatura que mantenga la misma dentro de rangos admisibles que no presenten amenaza para el catalizador, es posible desestimar este mecanismo de desactivación.

Con respecto a si este catalizador en esta reacción en específica es propenso a desactivarse por envenenamiento, no se han registrado datos que demuestren este suceso, por lo que se asume que la posibilidad de desactivación por este mecanismo no es una variable a tener en cuenta a la hora de elegirlo como potencial catalizador a utilizar. Esto presenta una ventaja dado que la fuente principal de desactivación es la de ensuciamiento, y el catalizador puede ser regenerado constantemente.

²⁶ Ref. N° 2

Con la finalidad de encontrar un catalizador que permita obtener mejores resultados, Santacesaria y sus colaboradores estudiaron el efecto de diferentes catalizadores comerciales, en principio para la obtención de acetato de etilo. Pero como se analizó anteriormente, a presión atmosférica y bajos tiempos de residencia del etanol, el principal producto obtenido es el Acetaldehído y es por ello que su trabajo resulta igualmente de utilidad para nuestro propósito.

Del trabajo mencionado se observa que los mejores resultados de actividad, selectividad y estabilidad térmica se obtienen utilizando catalizadores de cobre/cromita de cobre (CuCr_2O_4) soportados en Al_2O_3 ; los CrO_x (óxidos de cromo) aportan una mayor acidez y la dispersión del catalizador sobre el soporte aumenta el área superficial específica.

Otro estudio consultado²⁷ analiza la reacción de deshidrogenación catalítica a partir de este mismo catalizador, pero con un soporte de asbestos. El mismo indica que es una buena opción para ser utilizado en la deshidrogenación de etanol dado que presenta también alta selectividad hacia el acetaldehído y ha sido utilizado en la industria. A pesar de ser una opción prometedora, la presencia de asbestos no resulta confiable debido a sus características tóxicas. Ciertamente no existen muchos informes que desacrediten el uso de este catalizador pero se decide, de manera conservadora, no elegirlo para este proyecto.

Sin embargo, este estudio es útil para establecer los parámetros necesarios para llevar a cabo la reacción, así como los datos de desactivación del catalizador. Si bien se trata de un catalizador de cromita de cobre soportado en asbestos, si se supone que el soporte es inerte y no participa en el set de reacciones propuesto, es posible extrapolar los datos obtenidos al catalizador de cromita de cobre soportado en alúmina.

Por un lado se estudia el desempeño del catalizador de Cu con distintos óxidos promotores, entre ellos se destacan: ZnO, CoO, MgO, Cr_2O_3 , siendo el óxido de cromo el que presentó mejores valores de conversión, rendimiento y selectividad hacia el producto deseado. Sumado a esto, los ensayos registraron la variación del nivel de actividad con el tiempo de reacción para el catalizador promovido con cada uno de estos óxidos. De manera análoga, el que mejor desempeño tuvo en términos de actividad a lo largo del tiempo fue el promovido por óxido de cromo, perdiendo hasta un 20 % de su actividad en un período de 100 horas, operando a 275 °C. También, de este estudio se destaca la siguiente conclusión: la desactivación del catalizador depende fuertemente de la temperatura de trabajo, siendo que a 300 °C la pérdida de actividad con respecto al caso anterior aumenta un 10 %. Si bien aumentar la temperatura de operación permitiría, en principio, obtener mejores conversiones, es necesario realizar un correcto análisis con respecto a la actividad del catalizador, ya que es esta la que permitirá obtener la conversión de diseño a largo plazo.

Los ensayos realizados sobre este catalizador soportado confirman lo que se explicó con anterioridad con respecto a la desactivación que sufre en este tipo de reacciones, el ensuciamiento por depósitos de coque y posibles efectos de sinterizado. Además, propone un proceso a llevar a cabo para la posterior regeneración de este catalizador, que consiste en lo

²⁷ Ref. Nº 3

siguiente: hacer circular por el lecho que contiene al catalizador una corriente de aire de manera de realizar una oxidación de las partículas de coque depositadas sobre las partículas, asegurando un tiempo de regeneración de 1 hora, a temperaturas entre 350 °C y 400 °C. Este estudio propone realizar esta regeneración en intervalos de 24 horas, de manera de mantener la actividad en niveles aceptables, cercanos al 100 % en todo momento de operación.

2.2.3.10 - Elección del catalizador

De los diversos estudios, no se ha encontrado un catalizador que presente todas las características deseadas, tales como alta conversión y selectividad, disponibilidad de datos cinéticos para la reacción principal y secundarias, disponibilidad comercial, datos sobre tiempo de desactivación y reactivación, etcétera. Bajo este panorama, se ha de elegir el catalizador que reúna las características más convenientes.

Por ello, se escoge de forma preliminar, a fin de utilizar los datos de conversión y selectividad para el balance de masa del proceso y definir condiciones básicas de operación.

Teniendo en cuenta todo lo expuesto anteriormente, se toma la decisión de emplear el **catalizador de cromita de cobre soportado en alúmina**. No obstante, al ser una decisión preliminar, se tomarán valores de rendimiento y conversión de referencia, elegidos en base a los distintos estudios analizados. De esta manera, **el rendimiento de la reacción con respecto al acetaldehído es del 90 % y la conversión de etanol del 50 %** en la etapa de reacción. En cuanto a las condiciones de operación del reactor o sistema de reactores, se toma como primera aproximación trabajar a **presión atmosférica**, y en un entorno de **temperaturas cercanas a los 285 °C**. La elección de las condiciones de operación será objeto de estudio en el siguiente capítulo.

2.3 - Diagrama de flujo de la planta

El diagrama presentado en la *Figura 2.4* muestra la disposición de las subplantas que conforman el proceso global y se indican las corrientes que participan en cada una. En este sentido, se llama “E” a la corriente de ingreso de Etanol, “A” a la de salida de Acetaldehído, “H” a la de salida de Hidrógeno, “B” a la salida de Acetato de Etilo, “W” a la corriente de purga, “R” al reciclo de etanol y “J”, “K”, “L” a las corrientes intermedias del proceso. Esto no quiere decir que abandonen el proceso como una mezcla de productos. En los capítulos siguientes se definirán con mayor exactitud estos compuestos y sus composiciones de salida, ya que es fundamental poder identificar a estos compuestos para su posterior comercialización, en caso de que tenga valor comercial, o tratamiento, en caso de que no lo tenga. De esta manera, todas las salidas del proceso se encuentren contempladas.

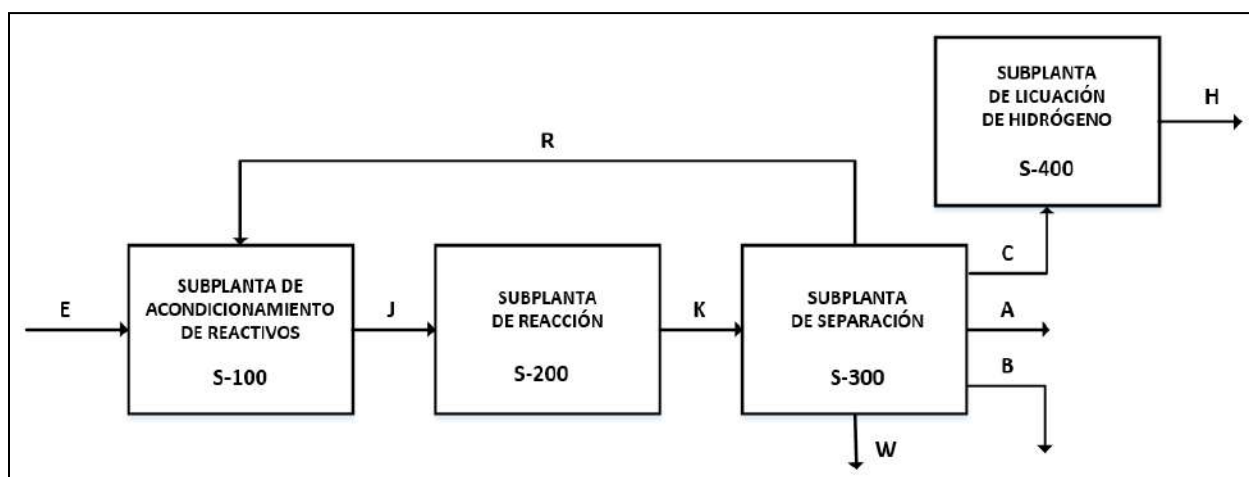


Figura 2.4 - Diagrama de flujo preliminar de la planta, indicando subplantas y corrientes.

2.3.1 - Subplantas

Subplanta de acondicionamiento de reactivos (S-100):

Esta subplanta consiste principalmente en la unión de las corrientes de bioetanol (E) a la entrada del proceso y la del reciclo (R), y una etapa posterior de calentamiento, previo a la entrada del reactor. Se agrega el reciclo de manera de aprovechar lo más posible todo el reactivo, las condiciones de esta corriente de reciclo se detallan posteriormente en esta sección. Cabe destacar que la adición de un reciclo puede o no resultar ventajosa a la hora de tener un mejor rendimiento y conversión del proceso global, esto dependerá de la influencia que tenga el reactor ante cambios en las condiciones de alimentación, es decir, si este reciclo posee impurezas que luego se mezclan con la corriente de reactivo puro puede que tenga un

efecto negativo sobre los valores de conversión y selectividad. Para los balances de este capítulo no se consideran estos efectos, ya que la entrada de impurezas está ligada a la efectividad de la planta de separación, que es objeto de estudio en el *Capítulo 4*.

Esta subplanta está compuesta por un evaporador y un intercambiador de calor. El primer equipo permite llevar a la mezcla de alimentación a fase vapor, que es la fase en que se produce la reacción deseada; el segundo equipo la calienta desde su temperatura de ebullición hasta la temperatura de reacción.

Subplanta de reactores (S-200):

En esta subplanta se producen las reacciones primaria y secundaria. Para ello se disponen dos reactores, los cuales operan de manera alternada, con ciclos de operación y regeneración. Las reacciones se llevan a cabo a 285 °C y a presión atmosférica. Los reactores son de tipo lecho fijo, cargados con el catalizador seleccionado previamente: cromita de cobre soportado en alúmina. De acuerdo a lo explicado en la *Sección 2.2*, la conversión con la que se diseñan estos reactores es del 50 %. Dado que la reacción principal es endotérmica, es necesario proporcionar calor al reactor con un adecuado sistema de calentamiento que mantenga la temperatura estable en el valor deseado. Un estudio detallado de esta subplanta se realiza en el *Capítulo 3*.

Subplanta de separación (S-300):

El objetivo de esta subplanta es la separación y distribución final de cada uno de los productos obtenidos en el proceso. Se trata de la subplanta con mayor número de operaciones. Se disponen varios equipos destinados a la separación de los diferentes productos y subproductos. Principalmente, está compuesta por los siguientes equipos: un separador flash, una torre de absorción, y torres de destilación. En el *Capítulo 4* se aborda en detalle la secuencia de etapas de separación.

Subplanta de licuación de hidrógeno (S-400):

En esta subplanta, como su nombre lo indica, se licua al hidrógeno separado en la subplanta de separación, con el fin de almacenarlo y luego poder comercializarlo. Consiste, principalmente, en un ciclo de licuación de gas, compuesto por: un compresor, intercambiadores de calor, una válvula de expansión y una turbina de gas. A la salida, se obtiene hidrógeno en estado líquido, que luego se almacena en tanques criogénicos. Las cuestiones referidas a su diseño serán tratadas en detalle en el *Capítulo 6*.

2.4 - Balances de masa

2.4.1 - Capacidad de producción

La capacidad de producción *nominal*, es la producción esperada por la planta en un determinado tiempo. En el *Capítulo 1*, se determinó una capacidad de producción de 8500 ton/año de acetaldehído, con pureza del 99,7 %. Esta cifra surge del estudio de mercado efectuado en dicho informe. No obstante, es importante diferenciar este valor de producción de la capacidad de diseño *instantánea*, la cual permite tener en cuenta posibles contingencias durante la operación normal y, aun así, mantener la producción estimada inicialmente. Cabe destacar que la capacidad de diseño instantánea es la que se utiliza como dato numérico para el dimensionamiento de los equipos, dado que debe contemplar estas eventuales pérdidas de producción y poder garantizar la capacidad establecida.

Para obtener la capacidad de diseño, la capacidad de producción debe ser afectada por la Efectividad General del Proceso, parámetro cuyo valor se determina en el siguiente apartado.

2.4.1.1 - Efectividad general del proceso (EGP)

La EGP permite cuantificar el porcentaje de tiempo en el que la planta es realmente productiva. Representa la diferencia entre la producción de un equipo real y la de un equipo ideal, donde no se producen pérdidas, opera en forma ininterrumpida y a su mayor rendimiento.

Además, la EGP contempla aquellos factores que reducen la efectividad del proceso, tales como los tiempos muertos y los productos fuera de especificación. Se determina en base a tres factores: disponibilidad, porcentaje de producto conforme y performance.

Disponibilidad

Consiste en el tiempo -en horas- en que la planta produce respecto al tiempo total disponible. Una disponibilidad del 100 % indica que se utiliza el total de las horas en la producción del producto. Se calcula en base a la siguiente ecuación:

$$\text{Disponibilidad} = \frac{\text{Horas de producción}}{\text{Horas totales}} * 100$$

Los aspectos que comprometen a la disponibilidad son los siguientes:

- Paradas de mantenimiento programadas: En este tiempo se incluyen las paradas de limpieza, revisión del equipo, cambio del catalizador, horas no operativas, entre otros;

- Paradas de mantenimiento imprevistas: Se dan en caso de fallas en el proceso que requieren corrección;
- Factores externos: Contempla posibles imprevistos externos, tales como cortes en los suministros;
- Otros.

En principio no se posee la información necesaria para estimar las horas de producción de la planta, por lo que se tomará un **valor del 98 %**, contemplando que las paradas de mantenimiento programadas se hagan en días no operativos

Porcentaje de producto conforme

Cuantifica la relación entre los productos bajo especificación respecto a los productos totales.

$$\text{Porcentaje de producto conforme} = \frac{\text{Producto en especificación}}{\text{Producto total}} \cdot 100$$

Entre los parámetros que afectan al porcentaje de producto conforme se destacan la calidad de materias primas, los desvíos de proceso, las fallas de equipos y similares.

A raíz de que no se dispone de suficiente información relacionada a estos parámetros para estimar este factor, se toma como **valor del 98 %**.

Performance

Tiene en cuenta las breves paradas o las ralentizaciones en la producción que impiden que el equipo opere al 100 % de su velocidad. Se calcula como:

$$\text{Performance} = \frac{\text{Producción instantánea}}{\text{Producción estandar}} \cdot 100$$

Entre los parámetros que afectan a la performance pueden identificarse la disponibilidad de materias primas, los desvíos del proceso, las fallas en equipos, la capacitación y las limitaciones externas.

En esta etapa del estudio, tampoco se cuenta con información suficiente para estimar este valor. Por lo tanto, se toma el **valor del 90 %** contemplando que siempre habrá materia prima disponible y que los equipos estarán mayormente automatizados.

2.4.2 - Planteo y resolución de los balances

Definidos los parámetros de *Disponibilidad*, *% Producto conforme* y *Performance*, es posible determinar el valor numérico de la EGP según la *Ecuación 2.2*:

$$EGP = Disponibilidad \cdot \% \text{ Producto conforme} \cdot Performance \quad \text{Ecuación 2.2}$$

Se obtiene una **EGP del 86,4 %**.

En base a la capacidad de producción y el factor de efectividad global, se obtiene la producción instantánea:

$$Producción \text{ instantánea [ton/hr]} = Producción \text{ nominal [ton/hr]} / EGP$$

Se obtiene una **producción instantánea de 1,708 ton/h**.

A fin de operar en unidades de *kmoles/h*, se divide la producción instantánea por el peso molecular de la mezcla en A. Para esto se considera que la producción de acetaldehído solo tiene trazas de acetato de etilo.

$$Producción \text{ instantánea [kmol/h]} = \frac{Producción \text{ instantánea [ton/hr]} \cdot 1000 \text{ [kg/ton]}}{PM_{mezcla} \text{ [kg/kmol]}}$$

Se obtiene una **producción instantánea de 38,7 kmol/h**.

Teniendo definida la EGP, la capacidad de producción y los datos cinéticos, es posible determinar las corrientes del proceso. Las mismas se encuentran representadas en el diagrama de la *Figura 2.4*.

Primero se definen las consideraciones y suposiciones que serán requeridas para resolver los balances, luego se plantean los balances globales y para el reactor y, finalmente, con los datos se resuelve el sistema.

2.4.2.1 - Consideraciones

- 1) En base a la *Figura 2.4*, se hace referencia a cada flujo molar total con la letra F acompañada por la letra de la corriente en el subíndice, por ejemplo: F_A .

Luego, para indicar el flujo de determinado compuesto, posterior a la letra de la corriente, se especifica el compuesto, por ejemplo: $F_{A, \text{Acetaldehído}}$.

- 2) Cabe destacar que el rendimiento no es igual a la selectividad en este sistema, dado que los moles de etanol que reaccionaron no son iguales a los moles de producto, la definición de ambas variables se da a continuación:

$$\text{Selectividad} = \frac{\text{moles de acetaldehído obtenidos}}{\text{moles de AcH} + \text{moles de A.E}}; \text{Rendimiento} = \frac{\text{moles de acetaldehído obtenidos}}{\text{moles de etanol que reaccionan}}$$

Del *Capítulo 1* se recuerda que el etanol se consume en ambas reacciones y que parte del acetaldehído de la primera reacción se consume en la segunda, por ende, por cada mol que se produce de acetato de etilo, se requieren, en total, dos de etanol.

$$\text{Etanol total (mol)} = \text{Acetaldehído(mol)} + 2 * \text{Acetato de etilo(mol)}$$

Luego para obtener la selectividad, en base al rendimiento, se plantea la siguiente ecuación:

$$\text{Selectividad AcH} = \frac{2 * \text{Rendimiento AcH}}{1 + \text{Rendimiento AcH}}$$

- 3) Se sabe que la concentración del bioetanol que ingresa al proceso es de 99,9 % y la requerida para el acetaldehído es de 99,7 %, ambas en unidades másicas. Es importante conocer estos valores en unidades molares debido a que la mayoría de los balances del proceso se efectúan en moles.

Por lo tanto, la pureza del bioetanol y la pureza del acetaldehído se definen también como:

$$x_{\text{Acetaldehído}} (\text{molar}) = \frac{\frac{x_{\text{acetaldehído}}(\text{másico})}{PM_{\text{acetaldehído}}}}{\frac{x_{\text{acetaldehído}}(\text{másico})}{PM_{\text{acetaldehído}}} + \frac{1 - x_{\text{acetaldehído}}}{PM_{\text{impurezas}}}}$$

$$x_{\text{bioetanol}} (\text{molar}) = \frac{\frac{x_{\text{bioetanol}}(\text{másico})}{PM_{\text{bioetanol}}}}{\frac{x_{\text{bioetanol}}(\text{másico})}{PM_{\text{bioetanol}}} + \frac{1 - x_{\text{bioetanol}}}{PM_{\text{trazas}}}}$$

2.4.2.2 - Suposiciones

En esta etapa del análisis, no es posible saber con certeza la concentración que se obtiene de cada compuesto en cada corriente, por ende, es preciso simplificar el sistema mediante suposiciones que estén lo más cercanas a la realidad. Posteriormente, mediante la implementación del simulador Unisim, los resultados se arrimaran más al del sistema real (*Capítulos 3 y 4*).

1. En el sistema solo se considera la presencia de etanol, acetaldehído, hidrógeno, acetato de etilo y agua. Otros compuestos no son considerados dada su baja producción y escasez de datos.
2. En la corriente de salida (A) se encuentran únicamente acetaldehído (99,7 %) y trazas de acetato de etilo.
3. La corriente de hidrógeno (H) se considera pura.
4. La concentración y el flujo de la corriente C son idénticos a los de la corriente H.
5. La corriente de acetato de etilo (B) se considera pura.
6. En la corriente de purga (W) únicamente sale agua (*).
7. En la corriente de reciclaje (R) se recirculan únicamente etanol y agua, y se tiene la misma concentración que en la alimentación fresca (**).
8. Las impurezas que ingresan junto con el etanol en la corriente E se consideran únicamente como agua.

(*) En el *Capítulo 4* se observa que no existe propiamente un corriente de agua, sino que la misma se elimina del sistema entre las distintas corrientes.

(**) Esta suposición se realiza como una primera aproximación al diseño del proceso y no tiene en cuenta cuestiones relativas a la separación final de los productos en cuanto a su eficiencia, y a la dificultad de separación de los mismos. En principio se supone que el etanol puede separarse de los productos hasta una concentración tal que resulte igual a la corriente de alimentación del proceso. En los capítulos siguientes se discutirá con mayor detalle esta suposición.

2.4.2.3 - Cálculos

Por medio de la producción instantánea (corriente A), es posible determinar el flujo molar de etanol que ingresa al sistema. Cabe destacar que al incorporar reflujo total, la conversión global es igual al 100 %.

$$F_{E, Etanol} = \frac{F_A \left(\frac{kmol}{h}\right) * x_{A, Acetaldehído}}{Y_{Acetaldehído}}$$

Además, como el flujo molar de acetaldehído que sale por A es igual al de K, es posible plantear:

$$F_{J, Etanol} = \frac{F_A \left(\frac{kmol}{h}\right) * x_{A, Acetaldehído}}{Y_{Acetaldehído} * X}$$

Luego, por medio del flujo molar de etanol en J y E, es posible conocer el flujo en R:

$$F_{R, Etanol} = F_{J, Etanol} - F_{E, Etanol}$$

La cantidad de acetato de etilo que se obtiene en la salida del reactor se puede calcular mediante el rendimiento para el acetaldehído:

$$F_{K, Acetato de etilo} = \frac{F_{K, Acetaldehído} \left(\frac{kmol}{h}\right) * (1 - Y_{Acetaldehído})}{2 * Y_{Acetaldehído}} = F_{B, Acetato de etilo}$$

Y la cantidad de hidrógeno producida es igual a lo que se convierte de etanol:

$$F_{K, Hidrogeno} = F_{J, Etanol} * X = F_{H, Hidrogeno}$$

En este sistema el agua es un producto inerte y, considerando estado estacionario, todo lo que ingresa de agua por E, debe salir por W.

$$F_{E, Agua} = F_{E, Etanol} * \frac{1 - x_{E, Etanol}}{x_{E, Etanol}} = F_{W, Agua}$$

Finalmente, como se definió la concentración para cada corriente, es posible determinar el resto de los flujos molares de cada corriente y compuesto.

Adicionalmente, es posible multiplicar cada flujo molar por el peso molecular correspondiente, de esta manera se obtienen los flujos másicos, mediante los cuales se comprueba el principio de conservación de la materia en el sistema.

2.4.2.4 - Datos

Conversión (X) = 0,5

Rendimiento del acetaldehído ($Y_{Acetaldehido}$) = 0,90

Selectividad del acetaldehído ($S_{Acetaldehido}$) = 0,947

Concentración másica de acetaldehído en la corriente de salida ($w_{A,Acetaldehido}$) = 0,997

Concentración másica de etanol en la corriente de entrada ($w_{E,Etanol}$) = 0,999

2.4.2.5 - Resultados

A continuación, en las *Tablas 2.3 y 2.4*, se presentan los resultados obtenidos para el balance de masa en base instantánea y nominal, respectivamente.

Tabla 2.3 - Resumen de las corrientes involucradas en el proceso (base instantánea)

Corrientes del proceso instantáneas[Ton/h] (*)								
	E	R	J	K	A	H	B	W
Etanol	1,978	1,978	3,956	1,978	-	-	-	-
Acetaldehído	-	-	-	1,702	1,702	-	-	-
Agua	0,002	0,002	0,004	0,004	-	-	-	0,002
Hidrógeno	-	-	-	0,087	-	0,087	-	-
Acetato de Etilo	-	-	-	0,189	0,005	-	0,184	-
TOTAL	1,980	1,980	3,960	3,960	1,707	0,087	0,184	0,002

(*) Dado el redondeo de unidades, el flujo total reportado no coincide en todas las corrientes con la suma de los flujos de cada componente.

Tabla 2.4 - Resumen de las corrientes involucradas en el proceso (base nominal).

Corrientes del proceso nominales [Ton/h] (**)								
	E	R	J	K	A	H	B	W
Etanol	1,710	1,710	3,419	1,710	–	–	–	–
Acetaldehído	–	–	–	1,471	1,471	–	–	–
Agua	0,002	0,002	0,003	0,003	–	–	–	0,002
Hidrógeno	–	–	–	0,075	–	0,075	–	–
Acetato de Etilo	–	–	–	0,163	0,004	–	0,159	–
TOTAL	1,712	1,712	3,422	3,422	1,475	0,075	0,159	0,002

(**) Dado el redondeo de unidades, el flujo total reportado no coincide en todas las corrientes con la suma de los flujos de cada componente. Por el mismo motivo, la suma del agua en E y R no es igual a el agua en J.

De las *Tablas 2.3 y 2.4*, es posible verificar el principio de conservación de la materia, tanto en el sistema completo como en el reactor, mediante los siguientes balances:

$$W_E = W_A + W_H + W_B + W_W$$

$$W_J = W_K$$

Bibliografía Capítulo 2

Bibliografía Específica

1. Inui, K.; Kurabayashy, T.; Sato, S. *Journal of Catalysts*, 212(2)(2002)207-215. "Direct Synthesis of Ethyl Acetate from Ethanol carried out under pressure".
2. E. Santacesaria, G. Carotenuto, R. Tesser, M. Di Serio, *Chemical Engineering Journal* 179 (2012) 209–220. "Ethanol dehydrogenation to ethyl acetate by using copper and copper chromite catalysts"
3. Church, J.M.; Joshi, H.K. *Industrial & Engineering Chemistry*, 43 (8).(1951) 1804-1811. "Acetaldehyde by Dehydrogenation of Ethyl Alcohol".

Bibliografía General

- Satterfield, C. (1996). *Heterogeneous Catalysis In Industrial Practice*. Krieger Publishing Company.
- Izquierdo, J. (2004). *Cinética de las reacción químicas*. Edicions Universitat de Barcelona.
- Téllez-Romero, J. G., Sarabia-Bañuelos, P., Hernández-González, S., & Nolasco-Arizmendi, V. A.. (2021). *Mecanismos de desactivación de catalizadores heterogéneos*. Mundo nano. Revista interdisciplinaria en nanociencias y nanotecnología, 14(26)



CAPÍTULO III

DISEÑO DEL SISTEMA DE REACTORES

3.1 - Objetivos

- Dimensionar el sistema de reactores para llevar a cabo la reacción de deshidrogenación catalítica.
- Realizar el diseño térmico de los reactores.
- Especificar acerca de cuestiones constructivas y sistemas de control de los mismos.

3.2 - Introducción

3.2.1 - Reactores heterogéneos a escala industrial

Los reactores catalíticos heterogéneos utilizados a escala industrial para reacciones en fase gaseosa se pueden dividir en dos grandes grupos: reactores de lecho fijo y reactores de lecho fluidizado. Tal como se analizará en este capítulo, los reactores de lecho fluidizado presentan ventajas en cuanto a la uniformidad de los gradientes de temperatura y de concentración, y la posibilidad de operar un único reactor en forma continua, entre otras. Sin embargo, son difíciles de controlar y el modelado matemático del régimen de flujo presenta una gran complejidad, dificultando su diseño.

Los reactores de lecho empacado son aquellos que se utilizan más frecuentemente en la industria gracias a su simplicidad y relativamente bajos costos de construcción, operación y mantenimiento. Estos reactores se pueden encontrar en diferentes configuraciones como, por ejemplo, reactores tubulares, múltiples tubulares en serie o multitubulares. Algunas características generales de cada uno de ellos se presentan a continuación:

- *Reactor tubular de lecho fijo*: Posee un único lecho con catalizador y su principal desventaja es la imposibilidad de mantener un buen control de temperatura debido a su gran diámetro.
- *Reactor de múltiples lechos fijos en serie*: Este reactor se forma por varios lechos fijos consecutivos. La refrigeración o calentamiento de la corriente reaccionante se produce entre lecho y lecho, mejorando el control de temperatura con respecto al reactor tubular simple. Otra ventaja de este tipo de reactor es la facilidad de limpieza y retirada del catalizador.
- *Reactor multitubular (tipo tubos y coraza)*: En este caso la carga del catalizador se distribuye en varios tubos por donde pasará la corriente reaccionante, y el fluido de intercambio térmico se sitúa en la coraza (es la configuración más común, aunque también puede invertirse). Esta configuración permite el control de temperatura más eficiente a causa del menor diámetro de tubos y su principal desventaja es la limpieza y recambio de catalizador.

3.2.2 - Comparación de reactores

Ambos reactores mencionados operan permitiendo el flujo del reactivo a través de la cámara de reacción donde se encuentra el catalizador. La principal diferencia radica en el estado del catalizador: en el reactor de lecho fijo las partículas del catalizador permanecen estáticas, mientras que en el reactor de lecho fluidizado, las partículas se mantienen suspendidas por la corriente *Figura 3.1*.

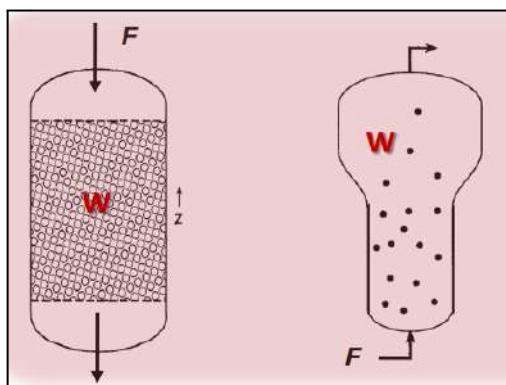


Figura 3.1 - Distribución de las partículas catalíticas en lechos fijos y en lechos fluidizados.

La disposición del catalizador en el reactor repercute en numerosos aspectos, los cuales se detallan en la *Tabla 3.1*.

Tabla 3.1 - Comparación entre lecho fijo y lecho fluidizado.

	Lecho fijo	Lecho fluidizado
Temperatura	Gradiente de temperatura importante	Temperatura uniforme en el reactor
Tamaño de partícula del catalizador	Grande	Pequeño (50 - 250 μm)
ΔP	Moderado	Alto
Abrasión del catalizador	Despreciable	Importante
Dificultad de operación	Sencillo de operar	Difícil de operar
Cambio de escala	Sencillo	Difícil
Coste energético	Relativamente bajo	Relativamente alto
Desactivación del catalizador	Baja	Alta
Coefficiente de transferencia de masa externo	Bajo	Alto
Tamaño del reactor	Inferior	Superior

Como se observa en la *Tabla 3.1*, ambos reactores presentan ventajas y desventajas importantes. En principio, se opta por la utilización de un reactor de lecho fijo y los motivos se exponen a continuación:

- En el reactor de lecho fluidizado está presente el riesgo de arrastre del catalizador en la corriente de salida, situación que se ve incrementada al considerar el efecto abrasivo del reactor, el cual provoca el desprendimiento de partículas aún más pequeñas. Las partículas de catalizador en la corriente de producto dificultan su posterior separación y representan una pérdida de material útil.
- Si bien el catalizador de lecho fijo provoca gradientes de temperatura, dado que en este proceso se trata de una reacción endotérmica y al calentar el reactivo previamente, se disminuye el riesgo de un gradiente considerable. Este conflicto sería relevante en una reacción exotérmica, donde el control de temperatura es más riguroso.
- El menor tamaño del reactor de lecho fijo y su menor requerimiento energético, lo hace una opción más económica.
- El reactor de lecho fijo es más sencillo de operar y posibilita el cambio de escala sin mayores inconvenientes

Una importante ventaja del reactor de lecho fluidizado sobre el de lecho fijo es la posibilidad de cambiar y/o reactivar el catalizador de forma continua, sin detener el proceso. La desactivación del catalizador seleccionado en el *Capítulo 2* (Cromita de cobre soportado en alúmina) es relativamente rápida (~1 día); esta característica es la que pone al reactor de lecho fluidizado en ventaja por sobre el lecho fijo. Sin embargo, si se trabaja con más de un reactor de este tipo, es posible regenerar al catalizador en uno de ellos mientras el otro opera y realizar esta operación de manera alternada.

Al ponderar las ventajas y desventajas de ambos reactores sobre el proceso analizado, finalmente se decide continuar el proyecto empleando un **reactor de lecho fijo**.

3.2.3 - Modelos para lechos fijos

A la hora de diseñar un reactor de lecho fijo es preciso contar con modelos que describan adecuadamente su funcionamiento y así establecer los parámetros de diseño óptimos que permitan llevar a cabo el proceso deseado. Para el modelado de este tipo de reactores se plantean balances de masa, energía y cantidad de movimiento tanto para la fase fluida que atraviesa el lecho catalítico como para la fase sólida que se encuentra fija en el mismo. El planteo de estos balances conforma un conjunto de ecuaciones diferenciales que deben resolverse de forma acoplada, generalmente de manera numérica. Su resolución permite hallar la variación de la concentración de las especies que intervienen en la reacción, así como la temperatura y la presión a lo largo de la posición en el lecho.

Dentro de los modelos para lechos fijos existen dos categorías principales: modelos heterogéneos y modelos pseudo-homogéneos. La diferencia principal radica en que los *modelos heterogéneos* tienen en cuenta las resistencias presentes a la transferencia de masa de las especies desde el seno del fluido hasta los sitios activos del catalizador, es decir, la concentración y temperatura en el seno del fluido - C_{Ab} y T_b , respectivamente - no son iguales a las que se tienen en el interior del sólido; mientras que los *pseudo-homogéneos* consideran que la concentración que ve el catalizador es igual a la del seno del fluido (lo mismo para la temperatura). Esto marca una principal diferencia a la hora de plantear los balances en base a qué modelo se seleccione: como la concentración se puede asumir constante entre el seno del fluido y el sólido, para un modelo pseudo-homogéneo sólo deben plantearse balances para la fase fluida (de ahí su nombre), mientras que para uno heterogéneo deben plantearse balances tanto para la fase fluida como la sólida.

La principal diferencia entre los modelos heterogéneos y pseudo-homogéneos radica en cómo se expresa la velocidad de reacción observada en el reactor. Para esto es necesario evaluar las resistencias al transporte de materia y energía tanto externas como internas a las partículas. En caso de que sean significativas, es decir, la concentración y/o temperatura del seno del líquido es distinta a la que se tiene en la partícula, se deben utilizar *modelos heterogéneos*. Se pueden presentar distintos casos:

- a) La resistencia controlante se da en la película externa a la partícula, luego r_{obs} resulta:

$$r_{obs} = k_m a_p (C_{Ab} - C_{As})$$

Donde k_m es el coeficiente promedio de transporte de materia, a_p es el área externa de la pastilla, C_{Ab} es la concentración en el seno del fluido y C_{As} es la concentración en la superficie de la pastilla.

- b) La resistencia controlante es la difusión en el interior de la partícula y r_{obs} resulta:

$$r_{obs} = k_r |_{T_b} \eta_c C_{Ab}$$

Siendo η_c el factor de efectividad catalítico y $k_r |_{T_b}$ es la constante cinética.

- c) Caso general: ambas resistencias son significativas, r_{obs} resulta:

$$r_{obs} = k_m a_p (C_{Ab} - C_{As})$$

Para hallar C_{As} se debe resolver el balance de masa intraparticular para A para cada posición en el reactor. En caso de que puedan despreciarse las resistencias y se considere que la concentración en la partícula es igual a la del seno del fluido, se trata de *modelos pseudo-homogéneos* y la velocidad de reacción se expresa en todos los casos como:

$$r_{obs} = k_r \Big|_{T_b} C_{Ab}^n$$

Si bien se consideró a la reacción como cinética de tipo ley de la potencia, esto es válido para cualquier cinética.

A su vez, estos modelos pueden dividirse en: bidimensionales y unidimensionales. Los bidimensionales tienen en cuenta variación de las propiedades en ambas direcciones del reactor, es decir, la axial (eje z) y a la radial (eje r); mientras que los unidimensionales sólo contemplan variaciones en la dirección axial.

A continuación se describen los balances que permiten hallar las ecuaciones de los modelos mencionados, los cuales se plantean en función del reactivo A en forma general.

3.2.3.1 - Balance de masa

Se parte de la siguiente expresión general del balance de masa bidimensional para el reactivo A:

$$D_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial C_{Ab}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{Ab}}{\partial r^2} \right) - u_z \frac{\partial C_{Ab}}{\partial z} + D_L \frac{\partial^2 C_{Ab}}{\partial z^2} - r_{obs} = 0 \quad (\text{Ecuación 3.1})$$

A continuación se explica el significado físico de cada término:

- $D_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial C_{Ab}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{Ab}}{\partial r^2} \right)$ Representa el aporte de la dispersión radial. Esto es: existe una variación en la concentración del fluido debido al retromezclado que se produce en esta dirección, implicando que la concentración no sea constante en el radio (para un mismo z) y se presenten desviaciones respecto a la idealidad del flujo (flujo pistón).
- $u_z \frac{\partial C_{Ab}}{\partial z}$ Representa el aporte convectivo, es decir, la variación en la concentración debido al flujo del fluido dentro del reactor.
- $D_L \frac{\partial^2 C_{Ab}}{\partial z^2}$ Representa el aporte de la dispersión en la dirección axial. De manera análoga al efecto que se tiene por la dispersión en la dirección radial, se observa el mismo efecto, pero ahora en la dirección del eje del reactor (z).

3.2.3.2 - Balance de energía

En el lecho existen gradientes axiales y radiales de temperatura. El calor se transfiere mediante diferentes mecanismos (conducción, convección y radiación). Se asume que el lecho es un sólido hipotético en el cual el calor se transfiere solo por conducción en la dirección radial. La conductividad térmica efectiva para el lecho en la dirección radial es ke_r y engloba todos los mecanismos de transferencia de calor que se dan en el lecho, teniendo en cuenta al fluido y a las partículas. El balance de energía para el reactivo A se plantea en un elemento diferencial anular del lecho para la fase fluida de manera análoga al balance de masa, y se llega a la siguiente expresión:

$$ke_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T_b}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_b}{\partial r^2} \right) - \rho_f u_z c_p \frac{\partial T_b}{\partial z} + r_{obs}' (-\Delta H) = 0 \quad (\text{Ecuación 3.2})$$

El significado físico de cada término se explica a continuación:

- $ke_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T_b}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_b}{\partial r^2} \right)$ Representa a la transferencia de calor radial por conducción que se tiene considerando al reactor como un sólido hipotético con conductividad térmica ke_r .
- $\rho_f u_z c_p \frac{\partial T_b}{\partial z}$ Representa el cambio en el calor sensible del fluido.
- $r_{obs}' (-\Delta H)$ Representa al calor generado/consumido por la reacción química.

Para la operación adiabática, como no hay intercambio de calor con los alrededores, no hay variación de la temperatura en el radio y el balance se puede definir de la siguiente manera:

$$-\rho_f u_z c_p \frac{\partial T_b}{\partial z} + r_{obs}' (-\Delta H) = 0$$

3.2.3.3 - Modelos

Acoplando las Ecuaciones 3.1 y 3.2 se llega al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

$$D_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial C_{Ab}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{Ab}}{\partial r^2} \right) - u_z \frac{\partial C_{Ab}}{\partial z} + D_L \frac{\partial^2 C_{Ab}}{\partial z^2} - r_{obs}' = 0$$

$$ke_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T_b}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_b}{\partial r^2} \right) - \rho_f u_z c_p \frac{\partial T_b}{\partial z} + r_{obs}' (-\Delta H) = 0$$

Dichas ecuaciones representan al *modelo bidimensional* para un lecho fijo y, en función de cómo se exprese la velocidad observada, puede tratarse de un modelo bidimensional heterogéneo o pseudo-homogéneo, tal como se explicó anteriormente. Estas deben resolverse de forma acoplada debido a que la constante cinética de la ecuación de velocidad depende de la temperatura y, a su vez, r_{obs} depende de la concentración de reactivo, lo que implica una dependencia en ambos balances.

A partir de estas ecuaciones, si se desprecia el aporte a la dispersión radial de masa y energía, se llega a la siguiente expresión:

$$-u_z \frac{\partial C_{Ab}}{\partial z} + D_L \frac{\partial^2 C_{Ab}}{\partial z^2} - r_{obs}' = 0 \quad \text{(Ecuación 3.3)}$$

$$-\rho_f u_z c_p \frac{\partial T_b}{\partial z} + r_{obs}' (-\Delta H) = 0 \quad \text{(Ecuación 3.4)}$$

Las Ecuaciones 3.3 y 3.4 representan al *modelo unidimensional* para un lecho fijo, el cual no tiene en cuenta el aporte radial tanto en el balance de masa como en el de energía. Nuevamente, en función de cómo se exprese la velocidad observada, se trata de un modelo unidimensional heterogéneo o uno pseudo-homogéneo.

Según Froment y Bischoff²⁸, siempre y cuando el reactor se pueda considerar isotérmico, el aporte a la dispersión radial puede despreciarse si se cumple la siguiente condición:

$$\frac{D_R}{d_p} \geq 10$$

siendo D_R el diámetro del reactor, y d_p el diámetro de la partícula.

²⁸ Ref. Nº 1

Este criterio asegura que la influencia de la dispersión radial en la conversión es despreciable, cuando la desviación entre la velocidad real en cualquier radio y el valor promedio para todo el tubo es pequeña.

Para sistemas no isotérmicos, el término de dispersión radial nunca es despreciable, dado que existen gradientes radiales de concentración debido a los gradientes de temperatura radiales, que inducen distintos grados de conversión en la dirección radial.

Si se desprecia el término de dispersión axial en el balance de masa de la *Ecuación 3.3*, se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{d}{dz}(-u_z C_{Ab}) = r_{obs}' \quad (\text{Ecuación 3.5})$$

La *Ecuación 3.5* junto con la *Ecuación 3.4* (balance de energía unidimensional) representan el modelo unidimensional básico, en el cual se considera una idealidad del flujo (flujo pistón), donde la concentración y temperatura varían únicamente a lo largo de la dirección axial del lecho por el aporte convectivo del flujo, sin considerar ningún tipo de dispersión.

Otro criterio establecido por estos autores está referido al aporte de la dispersión axial, informan que esta puede despreciarse si se cumple la siguiente condición:

$$\frac{L}{d_p} > 50$$

siendo L el largo del reactor, y d_p el diámetro de la partícula.

Por lo general, la influencia de la dispersión axial en la conversión es significativa para los siguientes casos: reactores cortos, bajas velocidades lineales (u_z), y conversiones intermedias.

3.2.3.4 - Caída de presión en el lecho

Las pérdidas de carga que sufre el fluido nunca son despreciables en este tipo de reactores, debido a que atraviesa un lecho relleno y las partículas del mismo oponen una resistencia al flujo apreciable. Para evaluar estas pérdidas, se utiliza la ecuación de Ergun (1952), como sigue:

$$-\frac{dP}{dz} = \frac{f \cdot \rho_f \cdot u_z^2}{d_p} \quad (\text{Ecuación 3.6})$$

siendo ρ_f la densidad del fluido y f el factor de fricción.

De manera de dimensionar un lecho, sea cual sea el modelo que se utilice, se deben resolver de manera acoplada los balances de masa, energía y cantidad de movimiento (presión).

A continuación se extraen algunas conclusiones generales:

- Dentro de los modelos mencionados, el modelo bidimensional heterogéneo representa el comportamiento del lecho con mayor exactitud, gracias a que tiene en cuenta la variación de la concentración y temperatura de la fase fluida en ambas direcciones (radial y axial), así como también su variación en el interior de las partículas. Sin embargo, su resolución implica conocer ciertos parámetros que no son fáciles de estimar (coeficientes de dispersión, conductividad térmica efectiva). Entonces, debido a la complejidad matemática de sus expresiones, se debe resolver mediante métodos numéricos robustos como diferencias finitas.
- Los modelos unidimensionales, si bien no tienen en cuenta los efectos de dispersión en la dirección radial del lecho, sirven para obtener una primera estimación del volumen de reactor a diseñar y la carga de catalizador a utilizar. Para diseños preliminares en los que se desea tener una idea de la magnitud de los equipos a utilizar, es conveniente plantear los modelos más sencillos para luego poder hacer una estimación económica y decidir si se desea profundizar con el estudio del proyecto. En caso que se desee continuar con el proyecto, se efectúa un análisis más detallado del comportamiento del reactor y se incluyen modelos más representativos de la realidad.
- En cuanto a la diferencia entre los modelos heterogéneos y los pseudo-homogéneos, es necesario contar con información suficiente para poder estimar las posibles resistencias al transporte de materia que se dan con la presencia de las partículas de catalizador, y en base a la importancia que tengan las mismas sobre la velocidad de reacción, evaluar cuál de estos modelos es el más conveniente para representar el lecho elegido. Nuevamente, la etapa de diseño en la que se encuentre el proyecto también definirá qué modelo seleccionar en función del grado de exactitud que se requiera para dimensionar al reactor.
- Por último, es necesario no desestimar la caída de presión que se tiene en el reactor. Debido a que se trata de lechos rellenos, la pérdida de carga es significativa y se debe tener especial cuidado en el diseño del reactor para trabajar con caídas de presión que no afecten el desempeño del catalizador y tampoco generen costos de bombeo/compresión excesivos.

3.3 - Diseño del reactor

3.3.1 - Expresión cinética

Tal como se mencionó en el *Capítulo 2*, la producción de Acetaldehído se ve favorecida a altas temperaturas y bajas presiones; en esas condiciones, las reacciones que cobran principal importancia son la de producción de Acetaldehído y la de producción de Acetato de Etilo (en menor medida).

Para plantear un modelo que permita diseñar el reactor de lecho fijo propuesto, es necesario contar con un modelo cinético adecuado que describa correctamente la evolución de las reacciones a lo largo del mismo, adecuado al catalizador elegido (*Tabla 3.2*).

Tabla 3.2 - Catalizador comercial seleccionado BASF-Cu-1234-1/16-3F

Composición	CuCrO ₄ /CuO/Cu/BaCrO ₄ /Al ₂ O ₃ 45:1:13:11:30% en masa
Densidad de empaquetamiento	0,95 g/cm ³
Diámetro de pellets	0,35 cm
Diámetro equivalente	0,4 cm
Esfericidad de pellets	0,87

Peloso²⁹ desarrolló un modelo cinético para la deshidrogenación de etanol hacia acetaldehído en un catalizador de cromita de cobre no soportado, como sigue:

La etapa controlante de la velocidad de reacción es la adsorción de etanol, el cual ocupa dos sitios activos del catalizador. A partir del modelo de adsorción disociativa de Langmuir Hinshelwood - Hougen Watson³⁰ se propone una expresión cinética para la reacción principal de formación de acetaldehído e hidrógeno, luego la misma se ajusta con los datos experimentales obtenidos, llegando a la ecuación cinética presentada en la *Ecuación 3.7*.

$$r_{Et} = \frac{k \cdot (P_{Et} - \frac{P_{Ac} \cdot P_{H2}}{K_{eq}})}{(1 + K_{Et} \cdot P_{Et} + K_{Ac} \cdot P_{Ac} + K_{H2} \cdot P_{H2})^2} \left[\frac{kmol}{kg_{cat} \cdot h} \right] \quad \text{Ecuación 3.7}$$

²⁹ Ref. N° 2

³⁰ Ref. N° 3

Donde:

- P_i : Presión parcial del componente "i" [atm]
- k : Constante cinética de la reacción directa [kmol/h.kg_{cat}.atm]
- K_{eq} : Constante de equilibrio de la reacción [atm]
- K_i : Coeficiente de adsorción del componente "i" [1/atm]

El rango de temperaturas empleado para ajustar la expresión cinética fue de 225 - 285 °C, a presiones entre 1 y 10 atm, medidas como la relación entre el caudal volumétrico medido en CNPT por hora y el volumen del catalizador.

Se utilizó un catalizador de cromita de cobre no soportado en forma de pellets cilíndricos, con diámetro y largo de 3,5 mm. Cabe destacar que los autores llegan a la conclusión de que la cinética propuesta es válida también para catalizadores soportados. Por lo tanto, es posible adaptarla al catalizador seleccionado (cromita de cobre soportado en alúmina).

En el rango de temperaturas de trabajo se obtuvieron las siguientes ecuaciones que relacionan las constantes con la temperatura:

$$\ln(k) = 13,65 - \frac{7086,2}{T} \qquad \ln(K_{Et}) = -0,251 + \frac{636,9}{T}$$
$$\ln(K_{eq}) = 11,82 - \frac{6189,1}{T} \qquad \ln(K_{Ac-H2}) = 1,260 + \frac{592,7}{T}$$

Los autores aclaran que las constantes de absorción para los productos de la reacción (Acetaldehído - Hidrógeno) se agrupan en una sola constante K_{Ac-H2} debido a que no presentan gran una gran diferencia si se las considera por separado.

Con respecto a la reacción secundaria, la de formación de acetato de etilo, no se disponen de datos cinéticos, por lo que no es posible ajustar una ecuación de velocidad. Sin embargo, en la bibliografía consultada hay valores aproximados acerca de la producción de acetato de etilo:

- Church³¹ obtiene para una conversión de etanol del 50 % aproximadamente, un rendimiento para el acetaldehído de, aproximadamente, el 90 % en moles. El subproducto mayoritario corresponde al acetato de etilo, con rendimiento del 5 % en moles y 10 % en masa aproximadamente. Este experimento se realizó utilizando cromita de cobre soportado en asbestos como catalizador, a una temperatura de 285 °C y una velocidad espacial de 16,2 min⁻¹.
- Peloso, por otra parte, en la corrida de experimentos realizados entre 225 - 285 °C, asegura que en ningún caso la producción de acetato superó el 0,3 % en masa. El rango de velocidades espaciales utilizados fue de 1,5 a 7,5 h⁻¹, medidos en LHSV (Liquid Hourly Space Velocity).

³¹ Ref. N° 4

Si bien los valores reportados presentan una gran diferencia en cuanto a la formación observada de acetato de etilo, esta producción no puede ignorarse, sobre todo porque ahora se trata de un proceso industrial a gran escala. Sin importar cuál sea la cantidad que se obtenga a la salida es necesario decidir qué disposición final se le va a dar a este producto y, además, es necesario tenerla en cuenta para el diseño de los posteriores equipos de separación y purificación.

A causa de que no es posible contar con una expresión cinética para la formación de acetato de etilo, se decide implementar la siguiente estrategia para el diseño del reactor: teniendo en cuenta el valor de producción máximo de acetato de etilo que se reporta en bibliografía (aproximadamente el 5 % en moles, respecto a la cantidad alimentada de etanol), se diseña el reactor con un criterio conservador, considerando que, en el peor de los casos, la producción obtenida de acetato se corresponde con este valor.

Como se explicó en los capítulos anteriores, el etanol se consume en las dos reacciones que conforman el sistema. Sin embargo, al no disponer de datos cinéticos para la reacción secundaria, no es posible introducirla en el simulador. Por este motivo, en el simulador todo lo que reacciona de etanol se convierte para dar únicamente acetaldehído e hidrógeno. Como consecuencia, la cantidad de acetaldehído producida es mayor a la que determina el balance de masa (*Capítulo 2*). No obstante, los moles totales casi no varían, entonces no representa un problema de sobredimensionamiento. Como solución, a la salida del reactor se retira la fracción de acetaldehído sobrante y se introduce la de acetato de etilo, de acuerdo al rendimiento para cada compuesto.

Dado que el acetato se forma a partir de la reacción del etanol con el acetaldehído, mientras mayor sea el tiempo de residencia que tenga el acetaldehído dentro del reactor, mayor será la formación de acetato. Siguiendo este criterio, debe asegurarse un diseño del reactor que permita obtener una velocidad espacial que esté en el orden de la registrada por Church, e incluso podría obtenerse una mayor velocidad. De esta manera, se trabajaría con un menor tiempo de residencia, lo que asegura que la cantidad de acetato formada es menor a la máxima considerada como el peor caso posible.

Vale la pena aclarar que esta suposición está agregando un error al diseño debido a que no se conoce con precisión la cinética de formación del acetato. De todas formas, permite estimar un volumen requerido aún en el peor de los casos. Si se desea continuar con el estudio del proyecto, se deben realizar estudios cinéticos en laboratorio con el catalizador seleccionado, en las condiciones en las que opera el reactor, para poder estimar con mayor exactitud la producción de acetato de etilo.

3.3.2 - Método de resolución

Según lo que se explicó en la Sección 3.2.3 - “*Modelos para lechos fijos*”, los modelos bidimensionales siempre podrán predecir con mayor exactitud el comportamiento de un reactor, respecto a los modelos unidimensionales. Sin embargo, su resolución es compleja y requiere de la estimación de parámetros propios del reactor que conllevan a cálculos iterativos, motivo por el cual no siempre se justifica su implementación. Esta decisión se toma en base a la etapa de diseño en la que la planta se encuentre. Si se desea realizar una primera estimación general de la dimensión de los equipos y de la inversión económica, sin realizar cálculos detallados, es preferible realizar un diseño mediante modelos sencillos. En caso de que se desee continuar con el estudio del proceso luego de esa estimación de costos, se debe profundizar el análisis del diseño de los equipos de forma más detallada.

Dado que el diseño de la planta de producción de acetaldehído a partir de etanol se encuentra dentro de la etapa de ingeniería básica, es importante conocer las magnitudes de los equipos que forman parte del proceso, para poder tener conocimiento de los caudales con los que opera el proceso. Sin embargo, no es necesario conocer esos caudales de manera exacta, por lo que se admite cierto porcentaje de error al dimensionar los equipos. Es por este motivo que para el diseño del reactor se decide como primera aproximación utilizar un **modelo unidimensional**.

Con respecto a cómo se considera la velocidad de reacción, también se comentó que los modelos pueden clasificarse en heterogéneos y pseudo-homogéneos. Se decidió plantear un **modelo heterogéneo**, a continuación se comentan los detalles:

En la bibliografía consultada donde se extrajo la cinética para este catalizador se desarrolla un método para poder estimar la influencia que tienen sobre la velocidad de reacción las resistencias a la transferencia de masa tanto internas como externas a las partículas. En este artículo se pone en evidencia que no es posible desestimar a ninguna de ellas y, por lo tanto, se las debe tener en cuenta para un adecuado diseño del reactor, incluso en esta etapa preliminar. Para ello, los autores realizaron una serie de experiencias para evaluar la velocidad de reacción dentro del rango de temperaturas de trabajo (225 - 285 °C) y en un rango de conversiones entre 0 y 60 %. De esta manera, se busca estimar un factor de efectividad que contemple ambas resistencias, es decir, un **factor de efectividad global**. Esto permite simplificar notablemente el modelo cinético para el diseño del reactor debido a que solo es necesario afectar al término de la velocidad de reacción por este factor y luego integrar para hallar el volumen necesario. Para cada temperatura y conversión se contrasta cada uno de estos valores calculados con los que se midieron experimentalmente y se pudo observar que estos son prácticamente iguales a conversiones bajas y presentan dispersión a medida que se aumenta la conversión. Sin embargo, aún para la conversión más alta tomada para la serie (60 %), dicha desviación es del 10 % aproximadamente, por lo que pueden tomarse los datos presentados sin mayores inconvenientes, ya que se trata de una etapa preliminar del diseño. Dado que este factor contempla la influencia que tienen tanto las resistencias externas como internas a la difusión del reactivo en el catalizador, sólo sería válido tomar estos puntos calculados si se cumplen las siguientes condiciones:

- El diámetro de las partículas a emplear en el reactor debe ser el mismo que el usado en los experimentos para asegurar que la magnitud de las resistencias que se oponen al flujo de reactivo dentro y fuera de la partícula sea similar. Esto será posible siempre y cuando las caídas de presión en el reactor a escala industrial no sean muy grandes y permitan operar de una manera factible, es decir sin incurrir en demasiados costos de bombeo.
- La velocidad espacial del reactor a emplear debe encontrarse dentro del rango de velocidades utilizadas para los experimentos. De esta manera se estaría asegurando que las velocidades de flujo dentro del reactor son similares tanto en el reactor industrial como en el de laboratorio, y de esta manera asegurar que la resistencia que se encuentra en la película que rodea a las partículas sea del mismo orden.

El problema principal con este factor es que es una función de la temperatura y de la concentración del reactivo (es decir, depende de la conversión), lo que implica que se debe hallar una funcionalidad de este factor con estas variables para luego poder resolver por este método. Sin embargo, en el artículo se presenta una tabla con los distintos valores del factor de efectividad para cada temperatura y conversión, y al estudiarlos es posible llegar a la conclusión de que no varían sustancialmente; se puede considerar un único valor promedio que represente el conjunto para todas las conversiones, para una temperatura seleccionada y de esta manera simplificar el análisis sin perder demasiada exactitud. Esto se explicará con mayor detenimiento en el siguiente apartado.

Teniendo en cuenta los criterios explicados acerca de la elección del modelo más conveniente para esta etapa de diseño, se decide emplear un **modelo unidimensional heterogéneo**.

3.3.3 - Procedimiento empleado para el diseño

Como primera aproximación al volumen final del reactor se optó por resolver el modelo elegido con las siguientes simplificaciones:

- Reactor isotérmico.
- Caídas de presión despreciables.

Esto permite obtener una magnitud del volumen de reactor necesario, que luego sirve como valor semilla para introducir en el simulador de procesos, el cual tiene en cuenta las variaciones en la temperatura y la presión.

Partiendo de la *Ecuación 3.5* (Modelo unidimensional básico e isotérmico), expresada en función de la concentración de etanol, se afecta a la velocidad de reacción por un factor de efectividad global (η) que tiene en cuenta las resistencias a la difusión de reactivo dentro y fuera de las partículas de catalizador, resultando entonces en un modelo unidimensional heterogéneo básico :

$$\frac{d}{dz} (-u_z \cdot C_{Et}) = \eta \cdot r_{obs} \cdot (1 - \varepsilon_b)$$

Donde la porosidad del lecho se toma como 0,5, siendo este el valor utilizado en el reactor de lecho fijo del procedimiento experimental.

Como se mencionó anteriormente, se decide utilizar un valor de factor de efectividad constante en todo el intervalo de conversiones utilizado, debido a que se simplifica notoriamente la resolución del modelo. Para esto se toma el valor promedio del factor para el intervalo de conversiones entre 0 y 60 % para la temperatura de trabajo seleccionada.

Se puede expresar en función del volumen del reactor, como sigue:

$$-Q \frac{d}{dV} \cdot C_{Et} = \eta \cdot r_{obs} \cdot (1 - \varepsilon_b)$$

Como el caudal volumétrico Q no se mantiene constante debido al cambio en el número de moles del sistema gaseoso, se expresa el balance en función del flujo molar de etanol:

$$Q \cdot C_{Et} = F_{Et}$$

$$- \frac{d}{dV} \cdot F_{Et} = \eta \cdot r_{obs} \cdot (1 - \varepsilon_b)$$

En función de la conversión de etanol, resulta:

$$x_{Et} = \frac{F_{Et,0} - F_{Et}}{F_{Et,0}} \quad F_{Et} = F_{Et,0} \cdot (1 - x_{Et})$$

$$dF_{Et} = -F_{Et,0} \cdot dx_{Et}$$

$$\frac{d}{dV} \cdot x_{Et} = \frac{\eta \cdot r_{obs} \cdot (1 - \varepsilon_b)}{F_{Et,0}}$$

Como la ecuación de velocidad está expresada en función de las presiones parciales, se debe expresar esas presiones como caudales molares. Entonces, a partir de la ecuación de los gases ideales:

$$P \cdot Q = F \cdot R \cdot T$$

$$P_i = \frac{F_i \cdot R \cdot T}{F_T \cdot R \cdot T} \cdot P_T = \frac{F_i}{F_T} \cdot P_T \quad \text{Siendo } F_T = \sum F_i$$

A $t=0$, F_T es igual al caudal que ingresa al reactor, siendo este la suma entre la entrada de etanol al 99 % p/p y agua (0,1 % restante) y el reciclo (se supone que ingresa en las mismas condiciones). Como valor semilla, se tomó como caudal de ingreso al reactor al obtenido en el *Capítulo 2*, por lo tanto:

$$F_{T,0} = F_{Etanol,0} + F_{Agua}$$

A medida que la reacción ocurre, el flujo molar total resulta de la suma de la entrada, más lo que se genera de productos:

$$F_T = F_{T,0} + F_{Acetaldehído} + F_{Hidrógeno}$$

A su vez, se puede expresar en función de la conversión, como:

$$F_T = F_{Etanol,0} \cdot (1 - x) + F_{Etanol,0} \cdot x + F_{Etanol,0} \cdot x + F_{Agua}$$

Luego, la expresión cinética (*Ecuación 3.7*) en función de la conversión resulta:

$$r_{Et} = \frac{k \cdot \left(\frac{F_{Et,0}(1-x)}{F_T} \cdot P_T - \frac{1}{K_{eq}} \cdot \frac{F_{Et,0}x}{F_T} \cdot P_T^2 \right)}{\left(1 + K_{Et} \cdot \frac{F_{Et,0}(1-x)}{F_T} \cdot P_T + K_{Ac,H2} \cdot \frac{F_{Et,0}x}{F_T} \cdot P_T \right)^2}$$

Una vez expresado el balance de manera apropiada es posible integrarlo para hallar el volumen requerido para una determinada conversión.

Antes de resolver este balance y obtener el volumen que luego servirá como valor semilla para el simulador de procesos es necesario analizar la influencia que tienen las variables operativas sobre el mismo. A continuación se analizan los parámetros más relevantes: la temperatura y la presión.

3.3.3.1 - Efecto de la temperatura de operación

Manteniendo la presión fija, se resolvió el balance de masa en función de la conversión de etanol para distintas temperaturas, los resultados se muestran en la *Figura 3.2*.

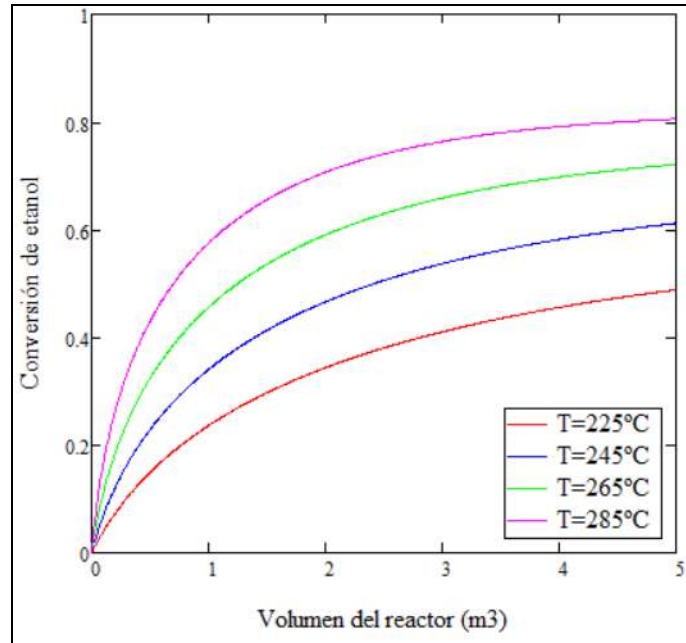


Figura 3.2 - Efecto de la temperatura de operación sobre la conversión.

Como se observa en la *Figura 3.2*, para alcanzar una dada conversión, el volumen requerido es menor a medida que se aumenta la temperatura, siguiendo una operación isotérmica. Este efecto es precisamente el esperado, pues a mayor temperatura, la velocidad de reacción aumenta. En caso de no tratarse de una operación isotérmica, para este tipo de reacciones (endotérmicas), se consume calor a medida que la reacción transcurre, por lo que la temperatura disminuye. Este efecto reduce la velocidad de reacción debido a su dependencia con T y, así, la conversión disminuye en la misma medida.

Puede concluirse que es conveniente operar de manera isotérmica a la máxima temperatura posible de manera de mitigar los efectos que se tienen sobre la velocidad de reacción y tener un mejor desempeño. Como la cinética es válida en el rango 225 - 285 °C, operar a 285 °C es entonces lo más conveniente dado que es la máxima admisible antes de que pierda validez. Además, dada la suposición de que la producción de acetato de etilo se toma constante en 10 % en masa, las condiciones de operación tienen que ser similares a las utilizadas por Church en su experimento, para poder asegurar que esta producción sea acorde.

Una estrategia de diseño para acercarse lo más posible a las condiciones de isothermicidad es disponer al reactor en una **configuración de tipo tubos y coraza**, en donde los tubos están rellenos del catalizador, por donde fluye la corriente de proceso, y el fluido calefactor fluye por la coraza. Esta disposición se adopta con el fin de aumentar el área de intercambio de calor, puesto que, como se ha mencionado, se trabaja con una reacción endotérmica y debe proporcionarse entonces una cierta cantidad de energía calórica. De esta manera, cada uno de los tubos puede considerarse como un lecho fijo en sí mismo, y la contribución de todos los tubos dará la producción deseada.

3.3.3.2 - Efecto de la presión de operación

Análogamente al estudio realizado para la temperatura, se resolvió el balance variando la presión total del sistema, fijando una temperatura y los resultados se muestran en la *Figura 3.3*.

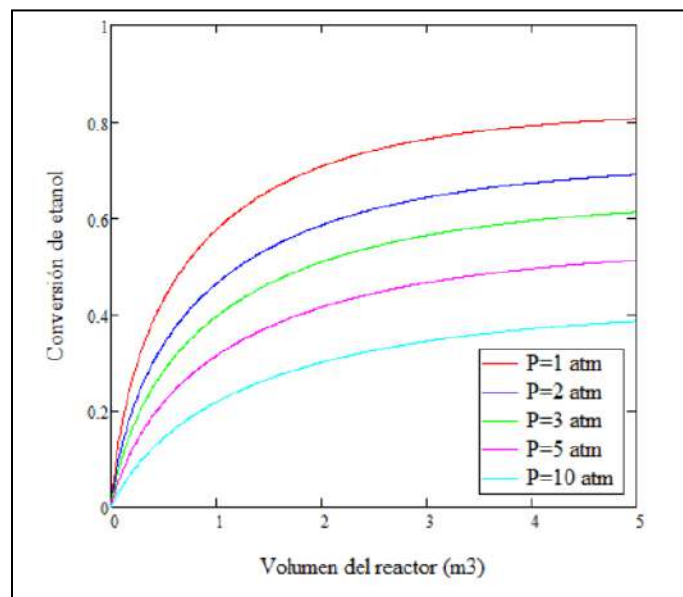


Figura 3.3 - Efecto de la presión de operación sobre la conversión.

Antes de seguir con el análisis, es importante remarcar que este balance se resolvió suponiendo que no hay caída de presión en el sistema. Ciertamente, esta suposición no es completamente válida en un reactor de lecho fijo, pero de todas formas permite analizar la tendencia general que tiene la presión sobre la conversión.

En la *Figura 3.3*, se observa la influencia que tiene variar la presión sobre la conversión y de la misma se entiende que a medida que aumenta la presión, mayor es el volumen requerido para alcanzar una determinada conversión. Este efecto es el esperado debido a que se tiene una reacción en fase gas con una variación en el número de moles menor a 0 (reacción del tipo $A \rightarrow B + C$), lo que indica que a presiones altas el equilibrio tiende a desplazarse hacia reactivos y este efecto pierde predominancia a presiones bajas. Sumado a esto, a presiones altas se ve favorecida la reacción de formación de acetato de etilo. Si bien no se incluyó en el balance y no se puede cuantificar este efecto, esta conclusión surge del análisis de la reacción, con un razonamiento análogo al de la reacción principal (reacción del tipo $A + B \rightarrow C$).

La conclusión que puede extraerse de la *Figura 3.3* es la conveniencia de trabajar a la presión más baja posible y, de esta manera, favorecer la conversión, minimizando el volumen. Además, la suposición realizada acerca de la formación de acetato, considerada para el diseño, se da a presión atmosférica, por lo que no es conveniente alejarse demasiado de este punto.

En el diseño del reactor se debe considerar la caída de presión en el lecho, por lo que si se desea operar a una atmósfera (en concordancia con las condiciones experimentales), la caída de presión generaría que la presión caiga por debajo de la atmosférica a la salida del lecho, es decir, se estaría en presencia de una presión de vacío. Este efecto puede provocar inconvenientes mecánicos no deseados. Por eso, como criterio de seguridad del proceso, se decide fijar la **presión mínima de salida** del reactor, como la atmosférica más un 10 %. (**111 kPa**).

Una vez fijada la temperatura de trabajo en 285 °C y la presión en 1 atm (sin tener en cuenta caídas de presión), se resolvió el balance para obtener el volumen que asegure la producción deseada, más un adicional que contemple la cantidad de acetaldehído que se descompone para dar el acetato, que luego sirvió como valor semilla para introducir en el simulador.

Como se ha explicado en los apartados anteriores, dada la imposibilidad de hallar una expresión cinética para la reacción secundaria, se fijó el valor de rendimiento hacia el producto deseado en 90 %. Además, para que sea válido considerar al factor de efectividad constante a la temperatura de operación seleccionada (285 °C), la conversión máxima que se puede tomar para el diseño tiene que estar dentro del intervalo de conversiones utilizadas para los ensayos experimentales (0 - 60 %). Además, por lo mencionado acerca de la suposición de la producción de acetato de etilo, la conversión no debería superar el 50 %. Se selecciona una **conversión de diseño del 50 %**. Para esta temperatura y conversión el factor de efectividad global se tomó como $\eta_{prom} = 0,75$.

De los balances del *Capítulo 2*, se obtiene la cantidad de etanol que debe ingresar al sistema (43,09 kmol/h), y específicamente al reactor (86,18 kmol/h), para alcanzar la producción deseada de acetaldehído (38,78 kmol/h). De la misma fuente, también se obtiene la cantidad de acetato de etilo generada (2,15 kmol/h).

El volumen del reactor obtenido en estas condiciones para alcanzar la producción especificada es de aproximadamente **0,90 m³** (calculado a partir de la resolución numérica de los balances presentados).

3.3.4 - Simulación y resultados

Una vez obtenido el volumen “semilla”, se trabajó con el simulador de procesos Unisim Design para poder optimizarlo, teniendo en cuenta las caídas de presión, la variación de los caudales y demás variables operativas. En primer lugar, se diseña el reactor como un único lecho fijo, es decir, un solo tubo, para obtener los parámetros operativos y el volumen requerido. Luego, en la siguiente sección, se procede a dimensionar el reactor multitubular, del tipo tubos y coraza, como se mencionó anteriormente.

La primera variable considerada para el diseño es el largo del reactor. Se selecciona un largo comercial, siendo la longitud estándar de 12 m, con la posibilidad de fraccionarlo, de manera de obtener múltiplos de 12, siendo los más comunes 6, 4 y 3 m. Esto se hace con el objetivo de facilitar el diseño y obtener parámetros estandarizados que luego permitan dimensionar correctamente el reactor multitubular.

Con el largo fijo, sólo resta fijar una variable dimensional: el diámetro o el volumen del reactor. Se procede de la siguiente manera: como la conversión de diseño ya está previamente fijada en un 50 %, se busca el mínimo volumen que asegure esta conversión, ajustando adecuadamente la presión de entrada. Se parte del volumen semilla calculado para condiciones isotérmicas sin caídas de presión. Una vez hallado este volumen, se incrementa esta variable y se ajusta la presión a la entrada, hasta encontrar el volumen que permita cumplir simultáneamente el requisito de conversión y de presión mínima a la salida ($P_{\text{salida}} = P_{\text{atm}} + 10 \%$).

A continuación se muestran las tendencias obtenidas para las variables mencionadas. En primer lugar, se tomaron largos de 3, 4 y 6 m. El volumen mínimo para obtener la conversión deseada, considerando caídas de presión, resulta ser de 2 m³ y, a partir de este valor, se lo incrementa para analizar las tendencias mencionadas. En la *Figura 3.4* se muestra la relación del diámetro del reactor en función del volumen para cada longitud. En todos los casos, la conversión es del 50 %.

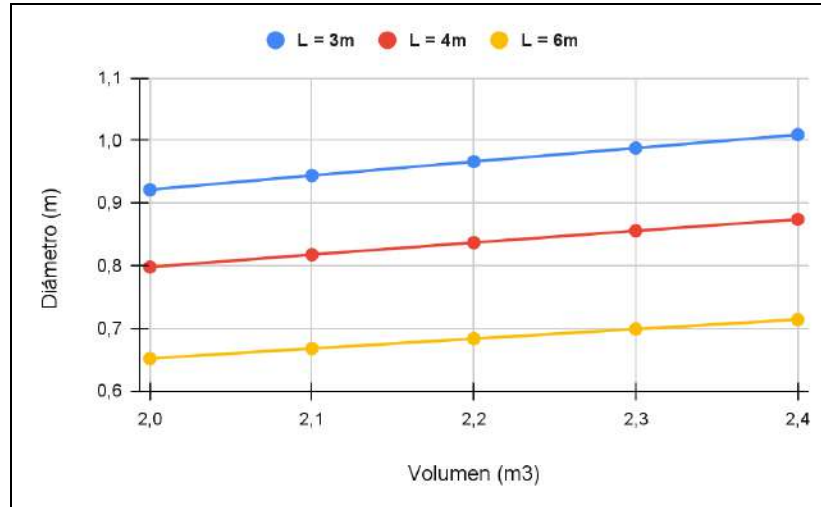


Figura 3.4 - Variación del diámetro del reactor en función del volumen, para distintas longitudes.

Como es de esperarse, para una misma longitud, aumentar el volumen implica aumentar el diámetro y, para un mismo volumen, el diámetro disminuye con el aumento de la longitud. Esto tiene una repercusión directa sobre las caídas de presión en el lecho y, por ende, sobre la presión de entrada. En la *Figura 3.5* se muestra el comportamiento de estas variables.

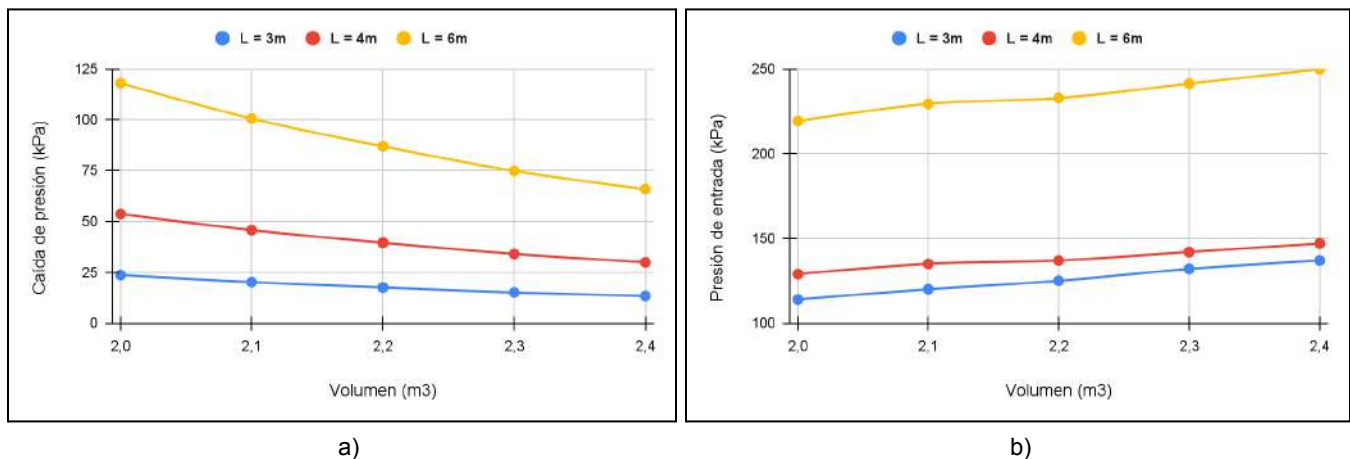


Figura 3.5 - Variación de a) la caída de presión y b) la presión de entrada en función del volumen del reactor, para distintas longitudes.

Del análisis de la *Figura 3.5* se desprende rápidamente la conveniencia de utilizar longitudes menores a los 6 m para diseñar el reactor dado que permite operar a presiones menores, con una disminución en la caída de presión. Esto era de esperarse porque, al disminuir el largo para un mismo volumen, el diámetro aumenta, haciendo que la sección de flujo sea más grande y, por lo tanto, la caída de presión disminuya. Se descarta el análisis para longitudes por encima de los 6 m debido a que se obtendrían presiones aún mayores.

En cuanto a las longitudes de 3 y 4 m, el comportamiento es análogo, pero se puede apreciar que en todos los casos, el largo de 3 m asegura tanto una menor presión a la entrada del lecho, como una menor caída de presión. Como se mencionó en la sección anterior, conviene operar lo más cerca posible de la presión atmosférica. Esto es debido a dos factores: por un lado, se minimiza el volumen necesario de reactor para alcanzar una determinada conversión; por otro lado, para garantizar la suposición de la producción de acetato de etilo, se necesita operar en condiciones similares a al experimento tomado de base. Utilizar un largo de 3 m permite cumplir con este requisito de presión y por ello se lo selecciona para seguir con el análisis.

Respecto al volumen, en el caso ideal, se debería seleccionar el menor valor, tal que asegure la conversión deseada. Se desprende de la figura que el más adecuado sería el de 2 m³. Sin embargo, no se cumple el requisito sobre la presión de salida. En la *Figura 3.6* se muestra la dependencia de la presión de salida en función del volumen, para un largo de 3 m y una conversión del 50 %.

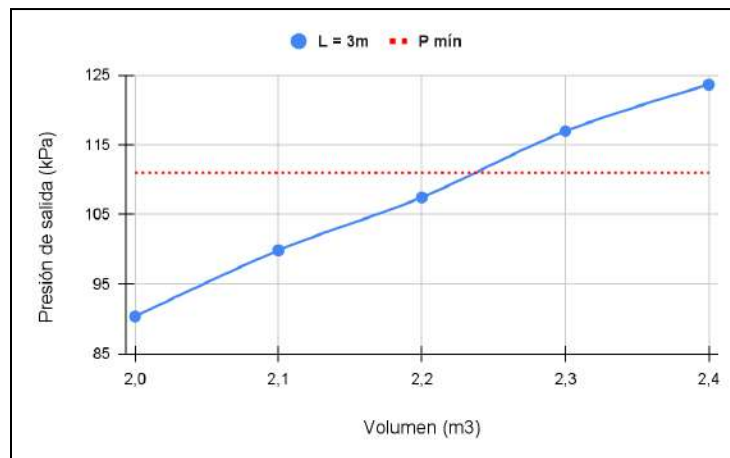


Figura 3.6 - Variación de la presión de salida del lecho en función del volumen del reactor, para un largo de 3 m.

Como se puede notar en la *Figura 3.6*, el volumen que asegura el requisito de presión a la salida está entre 2,2 y 2,3 m³. Con el mismo procedimiento que se siguió con los demás volúmenes, se obtiene el volumen óptimo a utilizar para asegurar este requisito, resultando en un valor de **2,258 m³**.

A continuación, en las *Tablas 3.3 y 3.4*, se resumen las variables operativas y de diseño para el reactor con un único tubo.

Tabla 3.3 - Dimensiones del reactor (preliminar).

Volumen (m³)	2,258
Longitud (m)	3
Diámetro (m)	0,978

Tabla 3.4 - Condiciones operativas del reactor.

Conversión alcanzada	50,14 %
Caída de presión (kPa)	16,9
Temperatura (°C)	285
Presión de entrada (kPa)	128

Para la configuración seleccionada, se verifica que la velocidad espacial en el reactor esté dentro del rango del artículo donde se extrajo la cinética. Este rango va de 1,5 a 7,5 h⁻¹, medido en LHSV (Liquid Hourly Space Velocity), y se calcula de la siguiente manera:

$$u_{LHSV} = \frac{Q_{liq}(CNPT)}{V_{cat}} = \frac{Q_{liq}(CNPT)}{V_R \cdot (1 - \epsilon_b)}$$

Siendo $Q_{liq}(CNPT)$ el caudal a la entrada como líquido, medido en condiciones normales de presión y temperatura, y V_{cat} el volumen de catalizador, que se puede obtener como el volumen de reactor por la fracción de catalizador $(1 - \epsilon_b)$.

El valor obtenido para esta variable es de **4,4 h⁻¹** por lo que se comprueba que se opera dentro del rango de velocidades informadas.

3.3.5 - Dimensionamiento

Como se mencionó anteriormente, se busca diseñar un reactor multitubular, de tipo tubos y coraza. Una vez obtenido el volumen y las condiciones de operación necesarias para el lecho con un solo tubo, se calcula el número de tubos y el diámetro de la carcasa que los alberga, entre otros parámetros constructivos.

La importancia en el número de tubos recae en garantizar una adecuada transferencia de calor entre la carcasa y los tubos, procurando minimizar los efectos de dispersión que se producen en la dirección radial. Al utilizar un menor diámetro se puede obtener una temperatura más uniforme dentro de los tubos, pues la relación área de transferencia de calor sobre volumen disminuye. Por eso, es necesario contar con un criterio que permita establecer un mínimo diámetro de tubo que asegure las condiciones isotérmicas a lo largo del radio del mismo.

Según se mencionó en Sección 3.2.3 - “Modelos para lechos fijos”, Fromant y Bischoff³² reportan un criterio para poder asegurar que se puedan desprestigiar los efectos de dispersión radial en el reactor, para un sistema isotérmico. El mismo establece que la relación diámetro de reactor y el diámetro de partícula debe ser mayor que 10. Si bien esto se da únicamente para sistemas con temperatura constante, sirve como una aproximación para determinar el diámetro de los tubos. Teniendo en cuenta que se trata de una configuración de tipo tubos y coraza, el área para la transferencia de calor es mucho mayor que para un solo tubo, y se puede considerar que el criterio para la dispersión radial se cumple, a pesar de que se tenga un perfil axial de temperaturas. Es decir, utilizando este criterio, se supone que la temperatura a lo largo del radio es constante.

Teniendo en cuenta dicho criterio y sabiendo que el diámetro de la partícula se encuentra fijo (diámetro corregido a una esfera = 0,004 m), se calcula el diámetro mínimo del reactor que asegura estas condiciones. Esto resulta en un diámetro interno de tubo de 0,04 m (1,57”). Considerando los diámetros disponibles comercialmente para intercambiadores de calor -según la norma BWG-³³, el diámetro más cercano corresponde a $d_o=1 \frac{3}{4}$ “ (0,044 m). Luego, para un espesor de pared de 2,1 mm, el diámetro interno del tubo se obtiene como $d_i = d_o - 2 \cdot \text{esp} = 0,0398$ m.

Una vez fijado el diámetro de los tubos y su longitud, es posible calcular el número de tubos que asegure que el volumen total del reactor sea el obtenido previamente, como sigue:

$$\text{Numero de tubos} = \frac{\text{Volumen del reactor}}{\text{Volumen de un tubo}}$$

$$\text{Volumen de un tubo} = \pi \cdot D t^2 \cdot L/4$$

Finalmente el número obtenido resultó ser de **605 tubos**.

³² Ref. N° 1

³³ Ref. N° 6

Cabe destacar que los valores caída de presión y velocidad espacial se mantienen prácticamente constantes al pasar del reactor mono-tubular al multi-tubular, este comportamiento se explica de la siguiente manera: como el único tubo se divide en N tubos, el caudal total ahora ingresa como una enésima parte del total por cada tubo. Entonces, si bien se reduce la sección de flujo, y la velocidad debería aumentar, esta se mantiene constante debido a que el caudal disminuye de manera proporcional. Por lo tanto, siguen siendo válidos los valores informados de velocidad espacial y de caída de presión a lo largo del lecho.

Debido a que el reactor, en esencia, se trata de un intercambiador de calor de carcasa y tubos, los cálculos realizados en este apartado están estandarizados por la Asociación Americana de Constructores de Intercambiadores de Calor Tubulares, recogidos en el código TEMA. En la *Figura 3.7* se muestra un intercambiador común de este tipo.



Figura 3.7 - Configuración típica de un intercambiador de calor de tubos y coraza.

La disposición de los tubos en el interior de la carcasa puede adoptar dos configuraciones diferentes: en triángulo, o cuadrada, siendo en los dos casos el pitch (separación entre el centro de los tubos) el 125 % del diámetro externo de los tubos. En tanto al número de pasos, para facilitar la operación en tanto a la modelización de los regímenes de flujo, se considera un **único paso por los tubos y la coraza**.

La configuración cuadrada se emplea para fluidos sucios que pasan por la carcasa, ya que la limpieza mecánica del exterior de los tubos es más sencilla. Se decide trabajar con un **arreglo en triángulo**, dado que genera mayores turbulencias y por lo tanto aumenta el coeficiente de convección del lado de carcasa, optimizando la transmisión de calor, a costa de tener una caída de presión más elevada.

Para determinar el diámetro de la coraza, se utiliza la siguiente correlación empírica³⁴.

$$D_c = 0,637 \cdot \sqrt{\frac{CL}{CTP}} \cdot \sqrt{\frac{A_0 \cdot \left(\frac{Pt}{d_0}\right)^2 \cdot d_0}{L}}$$

Donde:

- D_c : diámetro de la carcasa;
- CL: constante de configuración de tubos, con un valor de 1 para arreglos cuadrados y 0,87 para arreglos triangulares;
- CTP: constante de conteo de tubos, depende del número de pasos por la carcasa. Para un paso por los tubos, su valor es la unidad;
- A_0 : área externa de los N tubos;
- Pt: pitch;
- d_0 : diámetro externo de un tubo;
- L: largo de los tubos.

El diámetro de carcasa estimado es de 1,2 m.

A su vez, dentro de la carcasa, se cuenta con barreras que se oponen al flujo del fluido que la atraviesa, denominados baffles deflectores. Su función es, por un lado, sostener el haz de tubos, y por otro lado, aumentar la turbulencia del fluido de la coraza y aumentar la razón de transferencia de calor. El espaciado de baffles más utilizado en estos equipos es del 25 % respecto al largo. Con un largo de los tubos de 3 m, se debe colocar uno cada 0,75 m, resultando en un total de 4 baffles. En cuanto al corte de los mismos, se suele utilizar entre un 0,4 a un 0,6 con respecto al diámetro de la carcasa. Tomando un 0,5 del D_c , se tiene un corte de baffle de 0,6 m.

Un intercambiador de calor de casco y tubo conforme a TEMA se identifica con tres letras (Ver *Anexo A*). La primera letra es la indicativa del tipo del cabezal estacionario. La segunda letra es la indicativa del tipo de casco. La tercera letra indica el tipo de cabezal del extremo posterior.

En cuanto a la primera letra, el cabezal estacionario, se suelen utilizar los tipo A (canal y cubierta desmontable) y B (casquete). Sin embargo, estos cabezales no son desmontables. Para facilitar la limpieza de los tubos en las respectivas paradas de planta, se selecciona un cabezal que permita remover completamente el haz de tubos de la carcasa. Este tipo de cabezal es el tipo C (canal integrado con espejo y cubierta desmontable).

³⁴ Ref. N° 7

La segunda letra, el tipo de casco, se selecciona la correspondiente a un paso por los tubos y uno por la coraza, se corresponde con la letra E (casco de un paso).

Respecto a la tercera letra, se suelen utilizar los de tipo S, T y U. El tipo S (cabezal flotante con dispositivo de apoyo) el diámetro del cabezal es mayor que el del casco y hay que desmontarlo para sacarlo. El tipo T (Cabezal flotante sin contrabrida) puede sacarse sin desmontar, pero necesita mayor diámetro de casco para la misma superficie de intercambio. El tipo U (haz de tubo en U) es el más económico, pero implica una configuración de dos pasos por los tubos, por ende se descarta. Se selecciona un cabezal tipo S debido a su simplicidad a la hora de desmontarlo.

A continuación, en la *Tabla 3.5*, se muestra la configuración final del reactor.

Tabla 3.5 - Dimensiones del reactor.

Configuración TEMA	CES
Volumen (m³)	2,258
Longitud (m)	3
Diámetro de tubos (in)	1 ¾ BWG 14
Número de tubos	605
Diámetro de coraza (m)	1,20
Número de baffles	4

3.4 - Intercambio de calor

Si bien se mencionó en el apartado anterior que trabajar en condiciones isotérmicas es la operación térmica más conveniente, no se comentó cuál es el efecto que tiene alejarse de esta condición. Es necesario analizar este efecto, ya que a fines prácticos, no es posible alcanzar condiciones de isotermicidad. En este sentido, se analiza la influencia del tipo de operación térmica sobre el desempeño del reactor. Para esto se toman los dos casos extremos: la operación isotérmica y la adiabática.

Un reactor adiabático es un sistema cerrado en el cual no se intercambia energía con los alrededores. En este tipo de reactor la mezcla varía su temperatura a lo largo del reactor en base a su calor de reacción. Para reacciones endotérmicas, la mezcla absorbe energía del calor latente de la mezcla, lo cual disminuye su temperatura a lo largo del reactor.

Por otra parte, un reactor isotérmico, como su etimología lo indica, es un sistema en el cual la temperatura se mantiene uniforme. Para lograr esto es necesario el intercambio de energía con los alrededores. Se le debe suministrar energía al sistema para poder compensar la caída en la temperatura.

En las reacciones endotérmicas este tipo de reactor posibilita trabajar a una temperatura elevada sin sufrir el apagado de la reacción por enfriamiento, sin embargo, el sistema calefactor conlleva mayores costos fijos y operativos. Desde un punto de vista termodinámico es preferible trabajar con un sistema isotérmico. No obstante, si el reactor adiabático presenta ΔT bajo, su implementación es preferible a fin de minimizar los costos.

Con el uso del simulador se modelan ambos tipos de operaciones térmicas en el reactor para la cinética en estudio. Los resultados son meramente orientativos y se utilizan únicamente como criterio para la elección del tipo de intercambio de calor. Los resultados se muestran en la *Figura 3.8*.

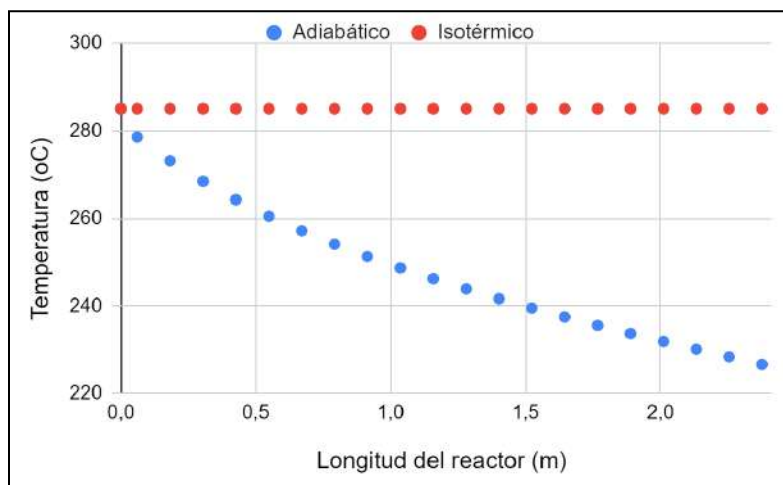


Figura 3.8 - Comparación de las operaciones isotérmica y adiabática.

De la *Figura 3.8* se desprende que la reducción en la temperatura es drástica, teniendo en cuenta un mismo volumen, y este comportamiento impacta -se reduce- significativamente la conversión. Si se quisiera trabajar en condiciones adiabáticas, el volumen necesario para obtener la producción deseada sería muy alto, sumado a que los costos de recirculación de reactivo serían muy elevados (debido a la baja conversión).

Gracias al análisis de estos comportamientos, se concluye que un reactor isotérmico es la mejor opción para llevar a cabo la reacción. Sin embargo, esto no es posible en un reactor industrial desde el punto de vista operativo, por lo que se suele operar en condiciones NINA (ni isotérmico ni adiabático). Operar en condiciones isotérmicas implica no sólo un requerimiento energético muy importante sino también una complicación desde el punto de vista constructivo y operativo del reactor, ya que para asegurar que la temperatura permanezca constante en todos los puntos del reactor es necesario proporcionar distintos flujos de calor según sea el grado de conversión alcanzada en dicho punto.

Para compensar el calor absorbido por la reacción química se utiliza un fluido calefactor, que fluirá a través de la coraza del reactor. Para su elección se tienen en cuenta propiedades tales como la estabilidad térmica, viscosidad, rango de temperaturas de operación, capacidad calorífica, etc.

Luego de evaluar diferentes fluidos térmicos, finalmente se seleccionó el Dowtherm Q, comercializado por la empresa Dow Chemical y compuesto por una mezcla líquida de óxido de difenilo y bifenilo. Este fluido presenta una gran estabilidad térmica, y su viscosidad es pequeña en comparación con otros fluidos térmicos, lo cual permitirá reducir los costos de bombeo; por otra parte, su rango de temperaturas de operación se ajusta convenientemente al proceso analizado. Todas las propiedades se listan en la *Tabla 3.6*, y aquellas que dependen de la temperatura se informan para la temperatura de operación elegida de 285 °C.

Tabla 3.6 - Propiedades del fluido térmico DowTherm Q³⁵.

Rango de T de operación (°C)	-35 - 330
T de autoignición (°C)	412
Peso molecular (g/mol)	190
Viscosidad (MPa.s)	0,228
Cp (kJ/kg.K)	2,316
Conductividad térmica (W/m.K)	0,096
Densidad (kg/m³)	822,38

³⁵ Ref. N° 8

3.4.1 - Operación NINA

Como se ha mencionado con anterioridad, el reactor isotérmico es un caso ideal, dado que en la práctica no es posible conservar la misma temperatura en toda la longitud del reactor. Esto se debe a que la velocidad de reacción varía a lo largo del reactor, y con ello también el calor que se debe suministrar.

A fin de estudiar el comportamiento del reactor en condiciones NINA, se incorporó al simulador el cálculo de transferencia de calor. El fluido a utilizar es el DowTherm Q, cuyas características se han detallado en la sesión previa.

El valor de U se calcula a partir de valores de coeficientes convectivos para cada corriente, extraídos de bibliografía³⁶, como se muestra a continuación:

- Para solventes orgánicos sin cambio de fase: $h_{C_{proceso}} = 350 - 2000 \text{ W/m}^2\text{°C}$
- Para el fluido térmico: $h_{FT} = 60 - 700 \text{ W/m}^2\text{°C}$

Para cada coeficiente, se tomó el valor medio del intervalo, y luego se estimó el coeficiente global U mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{\frac{1}{h_{C_{proceso}}} + \frac{1}{h_{FT}}}$$

Se desprecia la conducción en el espesor de los tubos, debido a que se trata de una estimación. Finalmente, el valor obtenido es de **U=287 W/m²K**.

Para seleccionar los valores de flujo molar y temperatura de entrada adecuados, se realizó el gráfico de la *Figura 3.9*. Para su confección se utilizó el reactor multitubular diseñado para condiciones isotérmicas, pero incorporando la simulación de transferencia de calor. Para cada punto se fijó el caudal del fluido térmico y se ajustó su temperatura hasta obtener la conversión requerida. Adicionalmente, se registró la temperatura máxima y mínima del fluido de proceso (temperatura en tubo).

³⁶ Ref. N° 9

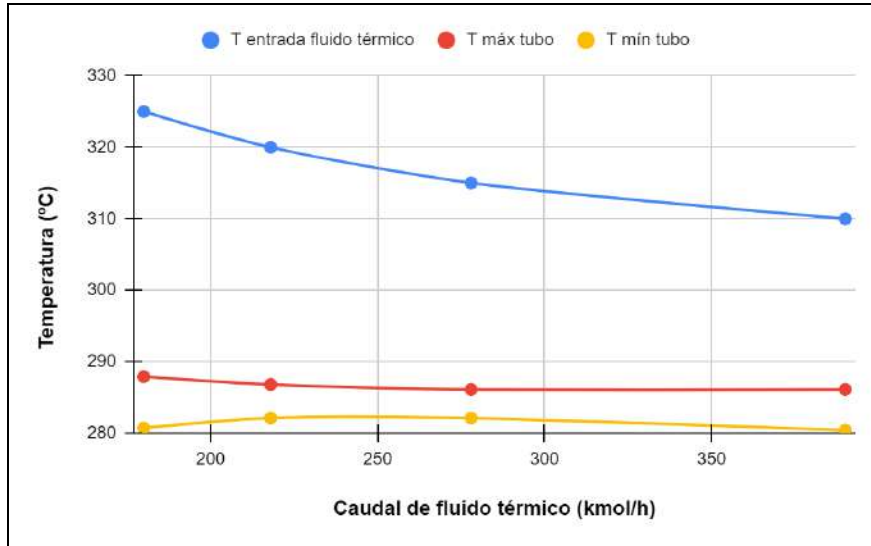


Figura 3.9 - Temperatura del fluido térmico y en tubos en función del caudal del fluido térmico.

De la *Figura 3.9* se observa que a mayor caudal del fluido térmico, menor es su temperatura de entrada requerida, debido a que estos dos parámetros se compensan a fin de mantener una transferencia de calor neta aproximadamente constante.

También es posible observar el comportamiento de las curvas de temperatura en los tubos. La temperatura mínima aumenta hasta un máximo y luego disminuye, de forma análoga, la curva de temperatura máxima parece presentar un mínimo. Para explicar este efecto se hace uso de la *Figura 3.10*.

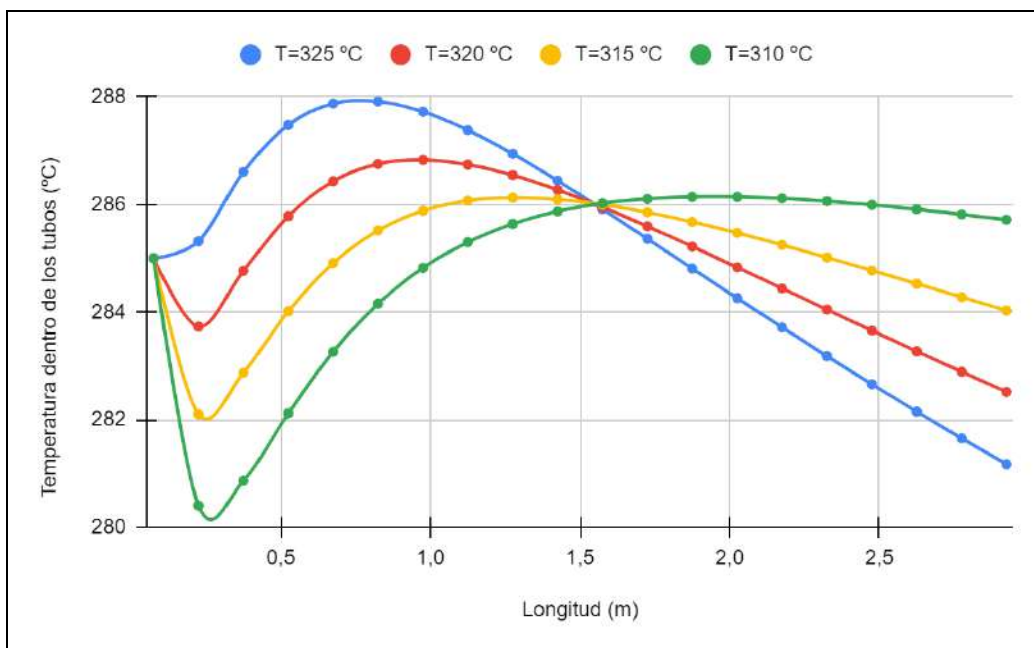


Figura 3.10 - Temperatura en tubos a lo largo del reactor para distintas temperaturas de entrada del fluido térmico.

Para explicar las curvas observadas en la *Figura 3.10*, es necesario recordar dos conceptos: el primero es que la reacción química es endotérmica y su velocidad decrece a lo largo del reactor; el segundo concepto es la fuerza impulsora, que se define como la diferencia de temperatura entre el fluido térmico y el fluido en los tubos, cuanto mayor sea esta diferencia, mayor será el flujo de calor.

Para una alta temperatura de entrada del fluido térmico (curva azul), la transferencia de calor será aún más alta que el calor requerido por la reacción, esto provoca un aumento en la temperatura del fluido. Pero al ser bajo el caudal del fluido térmico, su temperatura decrece rápidamente y, en consecuencia, también su fuerza impulsora. Debido a esto, la transferencia de calor es menor que el calor requerido por la reacción, por lo tanto, la temperatura del fluido de proceso disminuye.

Para mayores caudales de fluido térmico, su temperatura de entrada es menor. Luego, la transferencia de energía es menor que el calor requerido por la reacción, entonces la temperatura del fluido de proceso disminuye. Pero como el caudal de fluido térmico es grande, su temperatura disminuye lentamente, entonces en determinada longitud la transferencia de calor supera al calor de la reacción, y en consecuencia la temperatura del fluido de proceso aumenta.

Para la elección del caudal y la temperatura del fluido térmico se deben contemplar los siguientes aspectos:

- Independientemente del par temperatura-caudal seleccionado, el gasto energético en el reactor es el mismo. Sin embargo, un mayor caudal aumenta los costos de bombeo y compra del fluido auxiliar. Por otro lado, alcanzar mayores temperaturas conlleva mayores pérdidas de calor y exigencia de la caldera.
- Ambos factores (caudal y temperatura) dependen entre sí, y al aumentar uno disminuye el otro. Sin embargo, para lograr un cambio porcentual en la temperatura, el caudal debe cambiar porcentualmente mucho más. Por ejemplo, al pasar de 325 a 310 °C (-4,6 %), el cual cambia de 180 a 390 kmol/h (+116,7 %).
- La temperatura máxima de entrada del fluido térmico está limitada a 325 °C, de manera de asegurar un margen de seguridad de 5 °C respecto a la temperatura máxima de operación.

Por lo explicado previamente se opta por operar con el menor caudal posible, sin que supere la temperatura máxima del fluido térmico: **180 kmol/h**. Esto se corresponde con una **temperatura de entrada del fluido térmico de 325 °C**.

Como se puede apreciar en la *Figura 3.10*, la temperatura dentro de los tubos aumenta por sobre 285 °C, que es el valor máximo que contempla la cinética de la reacción. Sin embargo, mediante la *Figura 3.11* es posible ver que el impacto de la diferencia de temperatura en la velocidad de reacción es despreciable, respecto al caso isotérmico a 285 °C.

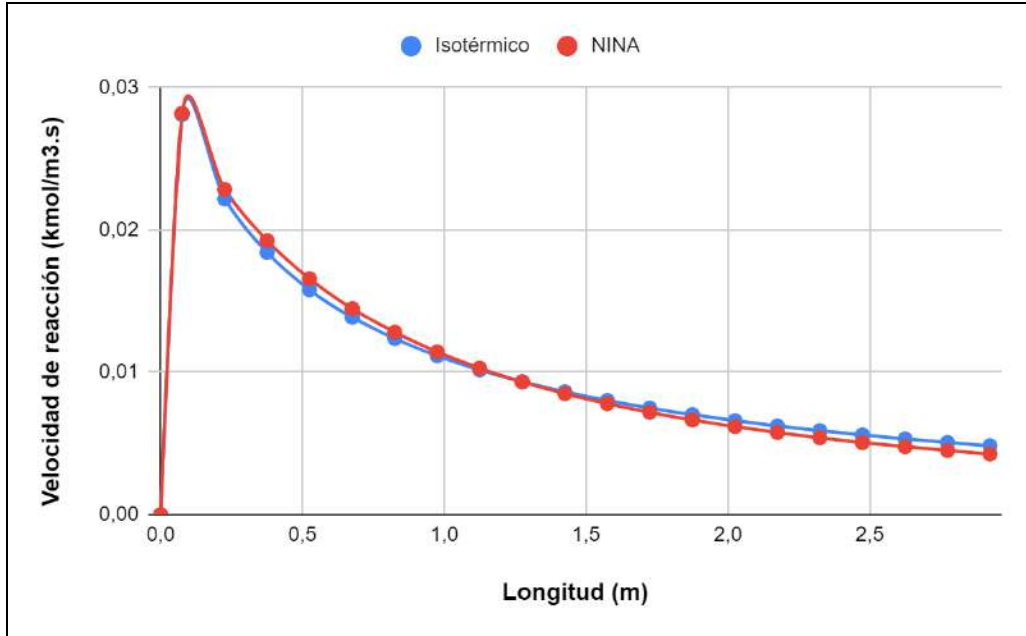


Figura 3.11 - Velocidad de reacción a lo largo del reactor para operación isotérmica y NINA.

En la Figura 3.12 se muestra el perfil de temperaturas de ambas corrientes, para la configuración elegida. Puede apreciarse la disminución de la temperatura de la corriente auxiliar, pero incluso en el extremo del reactor se mantiene una fuerza impulsora de al menos 5 °C, asegurando una adecuada transferencia de calor.

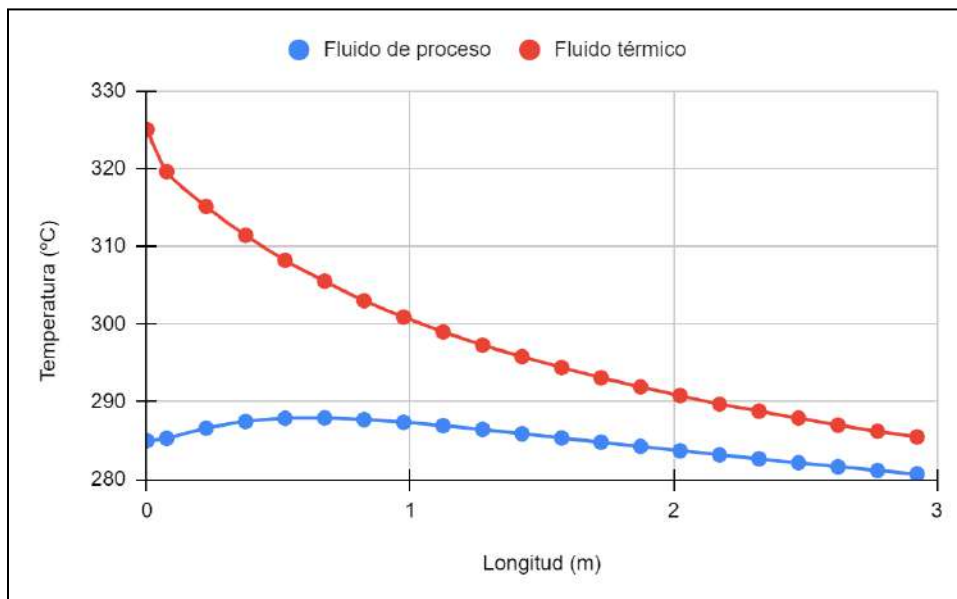


Figura 3.12 - Perfil de temperatura para las corrientes de proceso y servicio en el reactor.

En las Tablas 3.7 y 3.8, se resumen las condiciones de operación.

Tabla 3.7 - Condiciones operativas finales del reactor.

Coraza		Tubos	
Caudal (kmol/h)	180	Temperatura maxima (°C)	287,9
Temperatura de entrada (°C)	325	Temperatura minima (°C)	280,7
Temperatura de salida (°C)	285,5		

Tabla 3.8 - Condiciones operativas finales del reactor.

Conversión	50,0 %
Caída de presión (kPa)	16,1
Presión de entrada (kPa)	128
Temperatura de entrada (°C)	285
Temperatura de salida (°C)	280,7
Calor intercambiado (kJ/h)	3,131*10 ⁶

3.5 - Desactivación

En el *Capítulo 2* se ha indagado en el proceso de desactivación y la regeneración del catalizador. Los autores, mediante una serie de experiencias, analizaron la actividad del catalizador en forma continua para un intervalo de 100 horas, y se obtuvo una disminución en esta variable del 88 % aproximadamente. Luego de una reactivación, mediante oxidación, comprobaron que el catalizador no sólo recuperó la totalidad de su actividad, sino que se alcanzó un 5 % adicional, respecto al catalizador fresco. En experiencias posteriores, analizaron la posibilidad de someter a las partículas a periodos de operación y regeneración, de manera de operar hasta una actividad del 90 % aproximadamente, y luego regenerar hasta el 105 % de la actividad inicial. Estos períodos corresponden a 24 horas de operación, por una hora de reactivación. Por lo tanto, se decide operar al reactor bajo este régimen

El proceso de reactivación puede hacerse de manera sencilla anulando la corriente de vapor de etanol que ingresa al reactor, y luego hacer pasar una corriente de aire caliente a una temperatura entre 350 y 400 °C por al menos una hora. Lo más importante en este proceso es controlar la temperatura, debido a que la oxidación es una reacción fuertemente exotérmica. No se deben exceder los 400 °C para proteger al catalizador de posibles efectos de sinterizado.

La detención del reactor implica la parada de toda la línea productiva. Esto conlleva costes en tiempo y dinero para reiniciar la producción. A fin de evitar este efecto, **se decide implementar un segundo reactor** con las mismas características, el cual entrará en funcionamiento cuando el primer reactor se detenga para la regeneración y operará durante 24 horas hasta que se deba detener para regenerarlo, logrando así un ciclo de operación.

En una etapa posterior del proyecto, si se desea continuar con el estudio para la factibilidad de producción de acetaldehído, podría considerarse utilizar dos o más reactores de menor volumen, que operen de manera simultánea. De esta manera, mientras uno de ellos se regenera, los otros siguen produciendo. Esta configuración es más eficiente que la propuesta debido a que todos los reactores operan simultáneamente, sin la necesidad de tener detenido uno de ellos hasta la regeneración del siguiente. Sin embargo, esta disposición implica que el caudal de salida no sea constante, en función de los regímenes de operación y regeneración de los reactores. Se necesita un caudal de entrada constante a la subplanta de separación debido a que los equipos que se diseñan dependen fuertemente de esta variable. Una posible solución a esto sería colocar un depósito de almacenamiento para las corrientes de salida de cada reactor, y luego, mediante una válvula, proporcionar un caudal constante a los equipos del sistema de separación.

3.6 - Aislamiento

El aislamiento térmico a nivel industrial es imprescindible por varios motivos, entre los cuales se destacan:

→ Ahorro energético:

El objetivo es reducir la cantidad de energía necesaria para mantener el equilibrio del proceso y evitar el flujo de calor a través del material. Esto se consigue gracias a la instalación del aislamiento, reduciendo las pérdidas de calor. El aislamiento reduce las pérdidas energéticas, de tal modo que éstas puedan llegar a ser un 2-3 %³⁷ de las que se tienen sin aislamiento. La optimización del aislamiento en la instalación inicial reduce los costos de instalación y proporciona ahorros energéticos máximos, alargando su tiempo de vida.

→ Seguridad del proceso:

En todo proceso deben evitarse transferencias térmicas que lo alteren por diferencias de temperaturas no admisibles. Esta estabilidad térmica se consigue con el aislamiento.

³⁷ Ref. Nº 10

→ **Seguridad de los trabajadores:**

Si no existe aislamiento térmico suficiente, las temperaturas superficiales externas pueden ser elevadas y provocar lesiones y accidentes en las personas. En el límite, pueden producir efectos de combustión e incendio en materiales combustibles próximos a estas superficies. Se recomienda una temperatura máxima superficial de 50 °C.

Una vez tomada la decisión de aislar un equipo es importante establecer cuáles son las necesidades desde el punto de vista de la seguridad del proceso o de la recuperación del calor.

Se requiere conocer cuáles son las pérdidas de calor, la temperatura superficial del equipo, el tiempo de enfriamiento, así como también sus condiciones operativas: temperatura, materiales de construcción, etc. También se deben conocer las condiciones ambientales en las que se encuentra el equipo, la temperatura ambiente, la humedad, el viento, etc.

Conocidos estos factores, se debe seleccionar un material aislante acorde a las necesidades del proceso. La característica principal que debe tener un aislante es que debe proporcionar una barrera para la transferencia de calor, es decir, que tenga una baja conductividad térmica. Usualmente los valores de conductividad para estos materiales se encuentran por debajo de 0,10 W/mK.

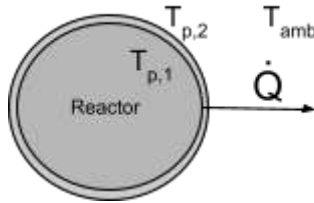
Dado que el reactor opera a una temperatura elevada, se desea aislarlo térmicamente para poder reducir las pérdidas de calor, contribuir con el ahorro energético, y proteger al personal.

Cálculo de las pérdidas de calor sin aislamiento

Para el cálculo se tomaron en cuenta las siguientes consideraciones:

- Se considera al reactor como un sólido con una temperatura superficial constante, que intercambia calor con los alrededores.
- La temperatura de la pared interna de la carcasa es igual a la del fluido térmico. Se desprecia el perfil de temperaturas en la dirección radial. Se toma como criterio conservador una temperatura de pared, $T_{p,1}=325$ °C.
- El espesor de la pared de la carcasa se toma como el máximo admitido para esta configuración de equipo según norma TEMA, en 50,8 mm.
- La conductividad térmica de la pared se toma como 50 W/mK, correspondiente al acero al carbono, material seleccionado para la construcción del reactor.
- Se toma una temperatura ambiente de 25 °C, y un coeficiente convectivo para el aire $h_{conv}= 10$ W/m²K.
- Sólo se tienen en cuenta los mecanismos de conducción y convección para la transferencia de calor. Se desprecia la radiación.

A continuación se muestra un esquema con el flujo de calor que se desea calcular, junto con las consideraciones mencionadas.



En estado estacionario, se puede expresar el calor total intercambiado como la diferencia de temperaturas en los extremos, sobre una suma de resistencias:

$$Q = \frac{T_{p,1} - T_{amb}}{R_{cond,pared} + R_{conv}} \quad \text{(Ecuación 3.8)}$$

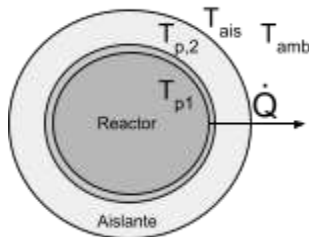
Donde las resistencias a la conducción en la pared y a la convección externa se expresan como:

$$R_{cond,pared} = \frac{\ln\left(\frac{r_{p,2}}{r_{p,1}}\right)}{2\pi L k_{pared}} ; R_{conv} = \frac{1}{2\pi r_{p,2} L h}$$

Mediante la resolución de la Ecuación 3.8, el flujo de calor resultante obtenido es $Q_{SA} = 70000 \text{ W/m}^2$, con una temperatura superficial de $321,9 \text{ }^\circ\text{C}$.

Esto pone en evidencia la necesidad de colocar un aislamiento térmico, no sólo desde el punto de vista del ahorro energético, sino también desde la seguridad del proceso.

El material seleccionado es la lana de vidrio, un material ampliamente utilizado en la industria como aislante térmico, cuya temperatura máxima de aislamiento es de $400 \text{ }^\circ\text{C}$. Su conductividad térmica varía entre $0,032$ y $0,045 \text{ W/mK}$, por lo que se toma una conductividad promedio de $0,0385 \text{ W/mK}$. A continuación se muestra un esquema con las temperaturas y el flujo de calor resultante.



Ahora, el calor total se expresa como:

$$Q = \frac{T_{p,1} - T_{amb}}{R_{cond,pared} + R_{cond,ais} + R_{conv}} \quad (\text{Ecuación 3.9})$$

Donde:

$$R_{cond,ais} = \frac{\ln\left(\frac{r_{ais}}{r_{p,2}}\right)}{2\pi L k_{ais}}$$

Como criterio para seleccionar el espesor del aislante adecuado, se decide tomar un espesor tal que permita reducir las pérdidas de calor hacia el ambiente hasta un 2-3 % de las pérdidas sin el aislante. El calor resultante debe estar entre 1400 y 2100 W/m²K. Como criterio adicional, se debe comprobar que la temperatura superficial del aislante se encuentre por debajo de la máxima recomendada para la seguridad del proceso, 50 °C.

Resolviendo la *Ecuación 3.9*, el espesor mínimo de aislante que asegura un 3 % del calor total sin aislamiento es de **0,135 m**.

Con este espesor, se calcula la temperatura superficial del aislante, mediante la siguiente ecuación:

$$Q = \frac{T_{ais} - T_{amb}}{R_{conv}}$$

La temperatura final resultante es de **32,9 °C**, se encuentra por debajo del límite admisible, por lo tanto es adecuado el espesor seleccionado.

3.7 - Sistemas de control

Del análisis de las variables operativas analizadas en la *Sección 3.3* surge que las dos más importantes a tener en cuenta son la temperatura y la presión de operación. Por un lado, la temperatura debe mantenerse en 285 °C para garantizar la producción deseada en todo momento, según el diseño y operación térmica seleccionada. Dado que una disminución en la temperatura conlleva a una disminución en la velocidad de reacción, se tiene un efecto negativo en la conversión alcanzada. Esto implica que la cantidad de etanol que queda sin reaccionar, y que luego debe recircularse, resulte mayor. Entonces, el nuevo caudal de entrada al reactor será mayor y esto podría ocasionar desperfectos mecánicos en el reactor (arrastre del catalizador, compactación del lecho).

Por otra parte, se debe controlar la presión de entrada al reactor para que se mantenga en el valor establecido, el cual contempla la caída de presión calculada en el lecho más un factor de seguridad para que en ningún momento la presión se encuentre por debajo de la presión atmosférica y evitar los daños mecánicos al lecho.

Debido a la importancia de mantener estas variables controladas se proponen los siguientes sistemas de control.

3.7.1 - Sistema de control de temperatura

El sistema de control para el control de temperatura propuesto se detalla a continuación en la *Figura 3.13*.

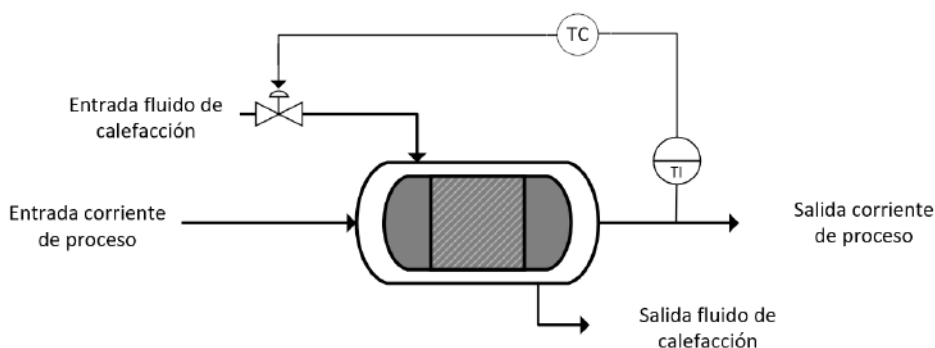


Figura 3.13 - Sistema de control de temperatura.

Habiendo explicado el efecto que tiene la variación de la temperatura de operación en el desempeño del equipo, se propone un sistema de control para mitigar cualquier efecto que podría alterar esta temperatura. Esto podría darse tanto por una modificación del caudal de fluido calefactor, o bien por un inconveniente aguas arriba del reactor que produzca que la temperatura de ingreso al mismo sea menor a la requerida. En el lazo de control propuesto la variable manipulada es el caudal de fluido calefactor, y esto se realiza censando y transmitiendo la temperatura de salida de la corriente de proceso, que luego de pasar por el controlador, actúa sobre el elemento final del lazo. Este elemento corresponde a la válvula de ingreso de corriente de servicio a la coraza del intercambiador.

El elemento de medición debe ser autónomo (sin requerir alimentación) y capaz de transmitir una señal al controlador en el rango de temperaturas en el que se trabaja. Dicho elemento podría tratarse de una termocupla dado a que es un elemento ampliamente utilizado en la industria y no precisa alimentación alguna.

3.7.2 - Sistema de control de presión

El sistema de control para el control de presión propuesto se detalla a continuación en la *Figura 3.14*.

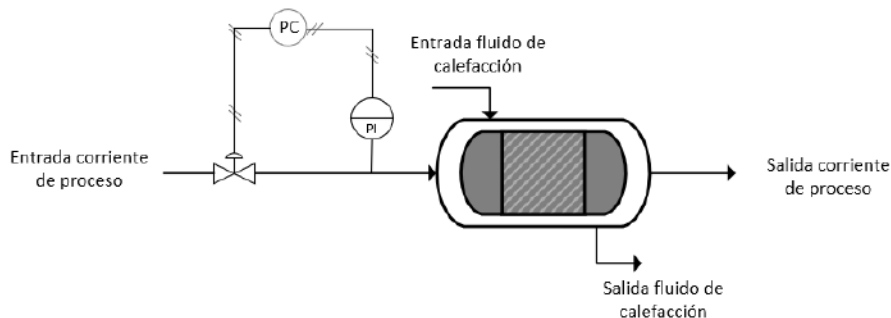


Figura 3.14 - Sistema de control de presión.

En el sistema de control propuesto, la variable a controlar es la presión en la admisión del reactor, para ello se debe medir la presión en este punto, para luego poder transmitirla a un controlador de presión, que finalmente actúa sobre el elemento final del lazo de control.

El elemento de medición debe ser capaz de sensar y transmitir la presión en el rango de trabajo de una manera rápida, de manera de que ante un cambio en la presión en la admisión se normalice la misma lo más rápido posible, debido a la magnitud de los flujos con los que opera el reactor. Esta presión transmitida ingresa al controlador, que luego de comparar con el valor seteado que se desea para el control, envía la señal al elemento final del lazo. Este elemento podría tratarse de una válvula de presión de vapor. Es importante que esta se encuentre aguas arriba del elemento de medición debido a que si la misma actúa, sólo se ve afectada la presión de la corriente aguas abajo de ella.

Bibliografía Capítulo 3

1. Froment, G., Bischoff, K., De Wilde, J., "Chemical Reactor Analysis and Design", p.99, 3th Edition, 1990.
2. Peloso, A., Moresi, M., Mustachi, C., Soracco, B. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 57(2).(1979) 159–164 , "Kinetics of the Dehydrogenation of Ethanol to Acetaldehyde on Unsupported Catalysts"
3. Hougen, O. A. and Watson, K. M., "Chemical process principles", 3rd Vol., "Kinetics and Catalysis", Wiley, New York (1947)
4. Church, J.M.; Joshi, H.K. Industrial & Engineering Chemistry, 43 (8).(1951) 1804-1811. "Acetaldehyde by Dehydrogenation of Ethyl Alcohol".
5. LÓPEZ GABANES, BÓDALO SANTOYO, «Simulación digital generalizada del diseño de reactores químicos» (Parte I: «Reactor tubular en flujo pistón»). Ingeniería Química, Octubre 1978.
6. Tubos para intercambiadores. Principales medidas BWG. Disponible en: <https://www.peninsulardevastagos.es/wp-content/uploads/Peninsular-astm.pdf>
7. Kakaç, S. (2012). "Heat Exchangers: Selection, Rating, and Thermal Design", Third Edition.
8. Hoja de seguridad de fluido térmico Dowtherm Q: <https://www.dow.com/content/dam/dcc/documents/en-us/productdatasheet/176/176-01467-01-dowtherm-q-tds.pdf?iframe=true>
9. Cao, E. "Transferencia de Calor en Ingeniería de Procesos", p.408, Primera Edición, 2004.
10. Afelma, A (2017). "Guía de buenas prácticas en el aislamiento industrial". Comunidad de Madrid.



CAPÍTULO IV

DISEÑO DEL SISTEMA DE SEPARACIÓN

4.1 - Objetivos

- Definir el número y secuencia de operaciones de separación a llevar a cabo.
- Diseñar/seleccionar los equipos críticos involucrados.

4.2 - Introducción

En este capítulo se hace un estudio más profundo sobre los procesos necesarios para purificar la corriente de salida del reactor, en donde se lleva a cabo la deshidrogenación no oxidativa de etanol. El fin es obtener cada uno de los compuestos, con una pureza adecuada según sea la utilidad que se le dará.

Del capítulo anterior se conoce que las principales sustancias que componen la corriente a tratar son: Acetaldehído, Hidrógeno, Acetato de Etilo y el Etanol que no reaccionó. Cada una de ellas tiene importancia para el proceso, ya sea como producto comercial o como fuente de energía.

Tal como se detalló en el *Capítulo 1*, el Acetaldehído requiere una pureza del 99,7 % en masa para ser comercializado; el Acetato de Etilo, que presenta un alto valor comercial, puede ser adquirido con una pureza mínima del 99 %. En cuanto al hidrógeno, como se mencionó, será el tema de estudio del *Capítulo 6*.

Con respecto al etanol no reaccionado y debido a que se trata de la materia prima del proceso de producción estudiado, es recomendable aprovecharlo en la mayor medida posible. Para ello se propone purificarlo hasta una pureza adecuada, cuyo impacto no sea significativo al momento de recircularlo al reactor.

Para estimar las propiedades de las corrientes y modelar los equipos se eligió un paquete termodinámico acorde a los componentes que intervienen en el proceso y las condiciones que en general se emplean. La decisión surge de utilizar las recomendaciones de Carlson (Ver *Anexo B*) siendo el modelo “extended NRTL” el elegido para representar a la fase líquida y “Peng-Robinson” para la fase vapor.

A continuación se analizan los equipos que conforman el sistema de separación en su totalidad, exponiendo cada una de las consideraciones tenidas en cuenta al momento de elegir el dispositivo a utilizar y sus respectivas condiciones operativas.

4.3 - Secuencia de etapas de separación

En principio se modela al sistema de separación como un proceso aislado del reactor, donde la corriente que ingresa (denominada “2.2”) posee las mismas condiciones y composiciones que la corriente de salida del reactor analizadas en el capítulo anterior. En el *Anexo D* pueden encontrarse las condiciones operativas y composiciones que corresponden a “2.2”.

El diagrama completo del proceso puede ser observado en el *Anexo C*. A lo largo del informe se utilizarán imágenes extraídas del mismo, de manera de que cada sección analizada se vea representada en él.

Una vez modelado y optimizado el sistema de separación, se lo incorpora al sistema global y se realizan los ajustes pertinentes, dada las eventuales pérdidas de materia y posibles ineficiencias en la separación.

Cabe destacar que, con el fin de facilitar la tarea de elección de los métodos de separación y su correspondiente orden, se utilizaron como guía las *reglas heurísticas*. En ellas se recomienda que la primer operación a ser considerada para la separación de mezclas líquidas sea la destilación, debido a que suele ser la alternativa más económica; y, dentro de ésta operación, aparecen otras recomendaciones tales como:

- Realizar las separaciones en orden creciente de dificultad;
- Separar los componentes en orden decreciente de abundancia;
- Remover los componentes como destilados, en orden creciente de volatilidad relativa.

En los apartados que siguen se detallarán una a una las etapas del sistema de separación implementado, siendo analizadas cada una de las razones de su elección y diseño final.

4.3.1 - Separación de hidrógeno

Una primera observación sobre la corriente “2.2” da cuenta de la gran diferencia de volatilidad que existe entre el hidrógeno y el resto de los compuestos. Esta característica, sumada a que dicho compuesto no forma mezclas azeotrópicas, lleva a entender que su separación es la más sencilla. Por lo tanto, el primer equipo del sistema tiene el objetivo de producir una corriente rica en hidrógeno, la cual será purificada en equipos que lo procedan. Se entiende que es preciso elegir un equipo adecuado, que separe las fases de la corriente y pueda manejar el gran caudal que trae.

Siguiendo las reglas heurísticas, varios equipos permiten la separación del hidrógeno, por ejemplo, absorbedores o destiladores. Sin embargo, el uso de ninguno de los mencionados se ve justificado, como primer equipo, si se tienen en cuenta las siguientes consideraciones:

- En caso de utilizar un destilador con condensador parcial, la temperatura del condensador debe ser lo suficientemente baja para poder asegurar que todo el acetaldehído condense, lo cual conlleva mayores costos energéticos debido a la alta volatilidad que presenta el compuesto. Solo de esta manera sería posible expulsar el hidrógeno “limpio” a través venteo.
- En caso de utilizar una torre de absorción, se debe suministrar un elevado caudal de líquido absorbedor, puesto que se deben retirar todos los compuestos que acompañan al hidrógeno. Dicho caudal implica mayores costos en energía y mayor tamaño tanto del absorbedor como de los equipos posteriores.

Más allá de lo puntualizado, existe un tipo de destilación en el que se efectúa una separación rápida, en una sola etapa. Este equipo es conocido como **separador flash** (Figura 4.1) o *flash drum* y es el elegido como primer equipo del sistema, siendo el mismo relativamente sencillo de operar y diseñar, y además es económico.

El principio de funcionamiento del destilador flash yace en separar dos fases que se encuentran en equilibrio. En general, una corriente líquida, que presenta una determinada presión, ingresa al equipo que se encuentra a una presión lo suficientemente menor, produciendo una evaporación parcial de esa corriente y haciendo posible la división de las fases.

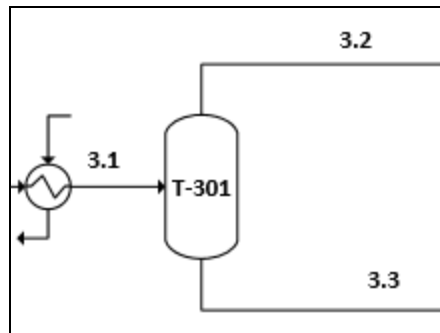


Figura 4.1. Representación gráfica del separador flash dentro del sistema de separación, junto al sistema de enfriamiento de la corriente de salida del reactor.

De manera de conseguir las condiciones óptimas en las que tiene que ingresar la corriente “3.1” al separador, se incorpora un enfriador previo, el cual disminuye su temperatura (*Figura 4.1*). A continuación se seleccionan las condiciones de operación de este equipo.

4.3.1.1 - Efecto de la temperatura y la presión de operación

Como se mencionó, el separador flash basa su funcionamiento en el equilibrio de fases, donde los compuestos más volátiles están en mayor proporción en la fase vapor y los compuestos menos volátiles en mayor proporción en la fase líquida. Luego, la fase vapor abandona el equipo por el tope, mientras que la fase líquida lo hace por el fondo.

Menores temperaturas y/o mayores presiones desplazan el equilibrio de fases de un compuesto a la fase líquida, y los compuestos menos volátiles son más sensibles a este efecto. Sin embargo, el hidrógeno es quien presenta una volatilidad mucho mayor al resto, tal que es despreciable en la fase líquida en las condiciones de operación. Para observar este efecto, se presenta la *Figura 4.2*, en la cual se muestra la variación de la pureza del hidrógeno obtenida por el tope del separador, en función de la presión y la temperatura de operación.

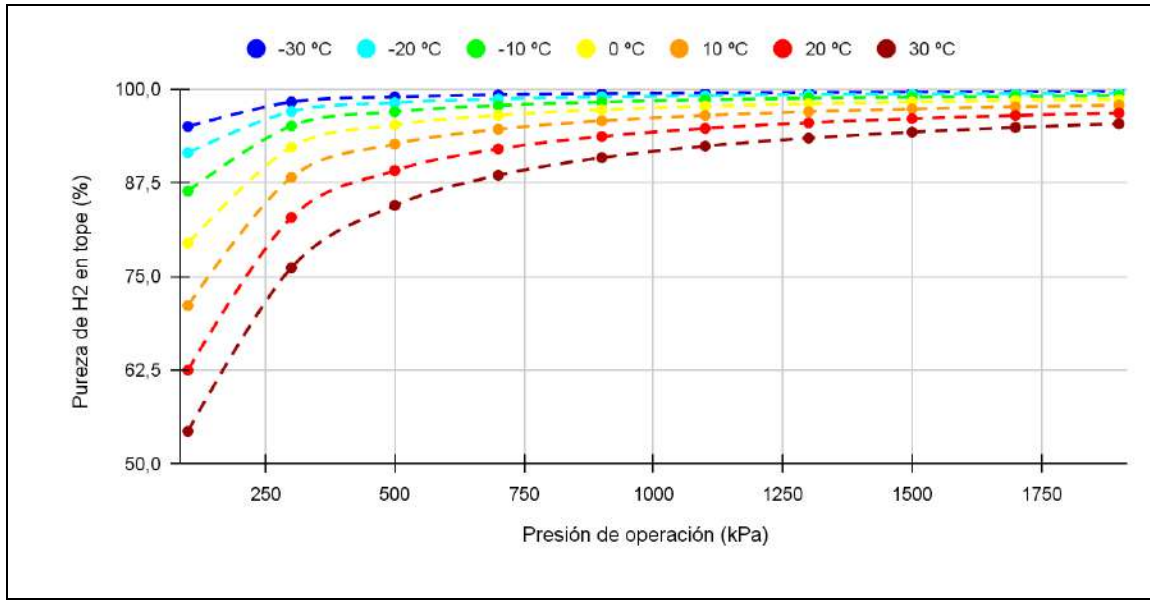


Figura 4.2. Variación de la pureza del hidrógeno por el tope del separador en función de la presión de operación, para diferentes temperaturas de entrada de la corriente.

Como se observa en la *Figura 4.2*, a medida que la presión aumenta, y la temperatura disminuye, es posible obtener una mayor pureza del hidrógeno por el tope. En base a esto, se podría concluir que conviene operar a altas presiones, y a bajas temperaturas, de manera de aumentar el rendimiento operativo de este equipo. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que la corriente que ingresa a este equipo es una de las corrientes con mayor caudal dentro de la planta, por lo que los costos asociados a su compresión serían elevados. Por este motivo, se decide operar a la menor presión posible, con una temperatura lo suficientemente baja como para asegurar un buen grado de separación. Se selecciona, entonces, la misma presión que la corriente de ingreso, **111,7 kPa**. Se considera, adicionalmente, que no hay caídas de presión en este equipo para esta etapa del diseño del proceso.

Al definir la presión de trabajo, queda expuesta la necesidad de determinar la temperatura óptima de operación, que coincide con la temperatura que trae la corriente de entrada al equipo. Para ello, se presenta la *Figura 4.3* en donde se observa la variación tanto del caudal de hidrógeno que sale por el tope del equipo como del caudal de acetaldehído que sale también por tope, en función de la temperatura de la corriente "3.1".

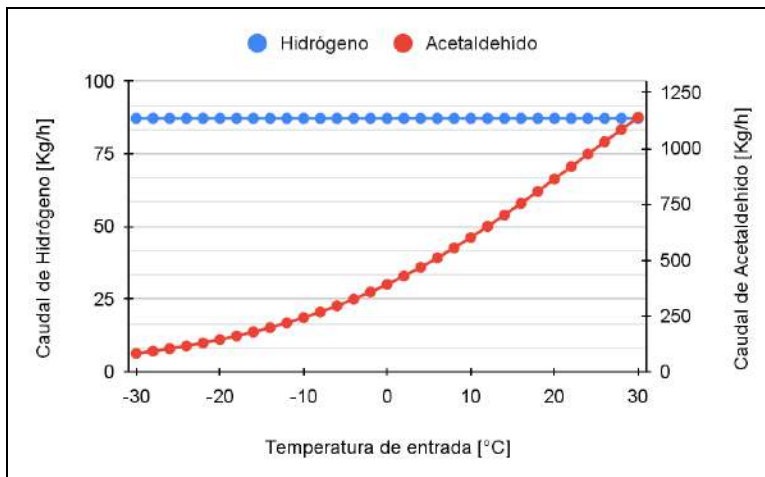


Figura 4.3. Variación de los caudales de Hidrógeno y Acetaldehído que salen por el tope del destilador flash.

Como ya se mencionó, el objetivo del equipo es separar la mayor cantidad de Hidrógeno, pero también se debe garantizar que salga por tope la menor cantidad de acetaldehído posible. En este sentido, de la *Figura 4.3*, se extrae que la cantidad de hidrógeno que sale por tope no varía y, por ende, la temperatura de operación a elegir depende del caudal de acetaldehído que lo acompañe en el tope. Finalmente, se decide trabajar a una temperatura de $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$, incluso sabiendo que esta condición requerirá de ciertos esfuerzos energéticos para ser conseguida.

Ciertamente, se podría efectuar el mismo análisis presentado en la *Figura 4.3* para otras presiones de operación, los cuales darían como resultado la posibilidad de emplear temperaturas mayores a $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$ y aun así conseguir una buena separación. Sin embargo, se decide mantener la presión lo más baja posible, por lo expuesto anteriormente.

En el *Anexo D* se detallan los caudales y composiciones másicas que ingresan y egresan del destilador flash, en tanto, en la *Tabla 4.1* se resumen las características operativas y de diseño del mismo.

Tabla 4.1. Resumen de características operativas y de diseño del destilador flash.

Equipo de destilación Flash T-301	
Datos generales	
Denominación del equipo	Destilador flash
Función	Eliminar el H ₂ de la corriente de productos
Datos de operación	
Temperatura de operación (°C)	-20
Presión de operación (kPa)	111,7
Datos de diseño	
Diámetro interior (m)	0,6096
Altura total (m)	3,353
Disposición	Vertical
Temperatura de diseño (°C)	-20
Presión de diseño (atm)	1
Espesor (mm)	6,35
Material de construcción	Acero inoxidable SS 316

4.3.2 - Purificación de la corriente de hidrógeno y recuperación del acetaldehído

Como se mencionó en el *Capítulo 1*, se determinó que el Hidrógeno es un componente de gran valor, ya sea desde el punto de vista comercial o como un combustible ampliamente usado en la industria y de gran eficiencia. Se determinó que, debido a que su mercado se encuentra en gran auge, es conveniente comercializarlo. Para ello, se lo debe almacenar en determinadas condiciones de presión y temperatura, las cuales se detallan en profundidad en el *Capítulo 6*, donde se diseña su planta de licuación. Para ingresar a esta subplanta, la pureza necesaria debe ser de, al menos, 99,99 %³⁸. Esto es debido a que se alcanzan temperaturas extremadamente bajas (-250 °C, aproximadamente), y cualquier impureza se congelaría, provocando dificultades operativas. Por lo tanto, se debe purificar la corriente de hidrógeno hasta el valor indicado.

Podría pensarse que una posible opción para la operación de purificación sería el uso de otro separador flash. Sin embargo, no resulta ser una elección conveniente, debido a que el acetaldehído tiene una volatilidad relativamente alta, lo cual implicaría emplear presiones muy altas y/o temperaturas bajas para su separación.

Se considera que el proceso de absorción (*Figura 4.4*) es la operación más conveniente puesto que se emplea especialmente cuando el objetivo es eliminar sustancias contenidas en corrientes gaseosas salientes de un proceso previo y se busca obtener ciertos grados de pureza que con otros equipos no son fácilmente alcanzables³⁹.

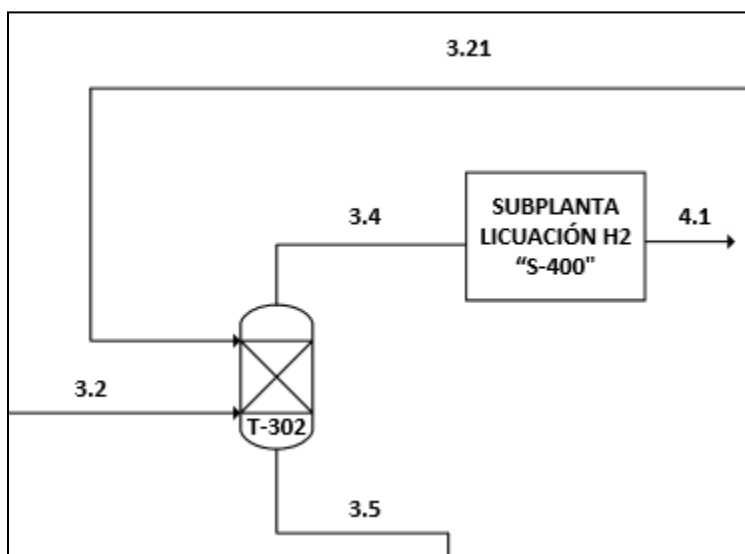


Figura 4.4 - Representación gráfica del absorbedor dentro del sistema de separación.

³⁸ Ref N° 1

³⁹ Ref N° 2

Los absorbedores son dispositivos de contacto continuo de lechos rellenos, o de platos, en los cuales se transfiere materia desde una corriente gaseosa hacia una corriente líquida. Estas corrientes se suelen disponer en contracorriente debido a que es la operación con mayor eficiencia desde el punto de vista de la transferencia de masa. El líquido, que ingresa por el tope, se utiliza para extraer, de manera selectiva, determinados componentes de la corriente gaseosa, mediante una transferencia entre las fases. Este líquido debe cumplir una serie de requisitos, entre los cuales se destaca la disponibilidad, accesibilidad, no reactividad, y selectividad para los productos a extraer.

Para que se puedan extraer estos compuestos, se debe seleccionar un líquido absorbedor que implique una elevada solubilidad. Por la regla de “lo similar disuelve a lo similar”, se debería seleccionar un compuesto que presente características similares a los solutos presentes en la fase gaseosa. Esta corriente se compone de hidrógeno, etanol, acetaldehído, acetato de etilo, y trazas de agua. Exceptuando al hidrógeno, todos son compuestos no polares, por lo que el líquido a seleccionar debe contar con esta característica. La primera alternativa que se desprende del análisis es utilizar agua, debido a que cuenta con todos los requisitos expuestos con anterioridad. Sin embargo, introducir agua al sistema en esta instancia sólo complicaría el proceso, desde el punto de vista de la separación. Otra alternativa es utilizar el etanol que no reaccionó, que luego será separada en esta subplanta. Este compuesto reúne todas las características requeridas, y además, no agrega componentes adicionales al sistema que dificulten la separación.

Por lo explicado, se propone un absorbedor al cual ingresa la corriente “3.2” por fondo y una corriente líquida de etanol recirculada, ingresando por el tope, proveniente de uno de los equipos de separación posterior (Ver *Sección 4.3.4*)

El etanol líquido tiene el poder de absorber tanto al etanol gaseoso como al acetaldehído y al acetato de etilo, de tal manera de que se recuperen en mayor medida por el fondo y el hidrógeno se obtenga con un alto grado de pureza por el tope. Sin embargo, esta recuperación de sustancias (o purificación, en el caso del hidrógeno) presentan una gran dependencia con variables tales como la temperatura de entrada de las corrientes, la presión de operación de la torre o el caudal del etanol líquido por tope. Es por ello que dichas variables deben ser analizadas con el fin de diseñar un equipo de absorción que opere en las condiciones más óptimas posibles.

La primera decisión surge de analizar la influencia que ejerce la presión sobre el caudal de etanol recirculado que debe ingresarse a la torre, de manera de obtener un determinado nivel de pureza de la corriente “3.4”. Se presenta la *Figura 4.5*, en donde se exponen de manera ilustrativa las tendencias obtenidas. Además, se presenta la dependencia con la temperatura de dicha corriente.

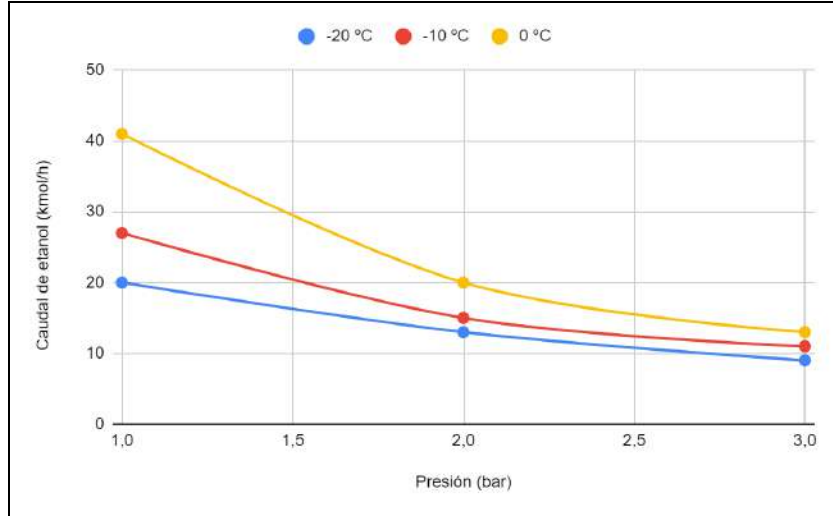


Figura 4.5 - Variación del caudal de etanol líquido necesario en función de la presión del absorbedor y la temperatura de dicha corriente.

Adicionalmente, se presenta la dependencia de la pureza del hidrógeno obtenido por el tope del absorbedor, en función de estas variables (*Figura 4.6*).

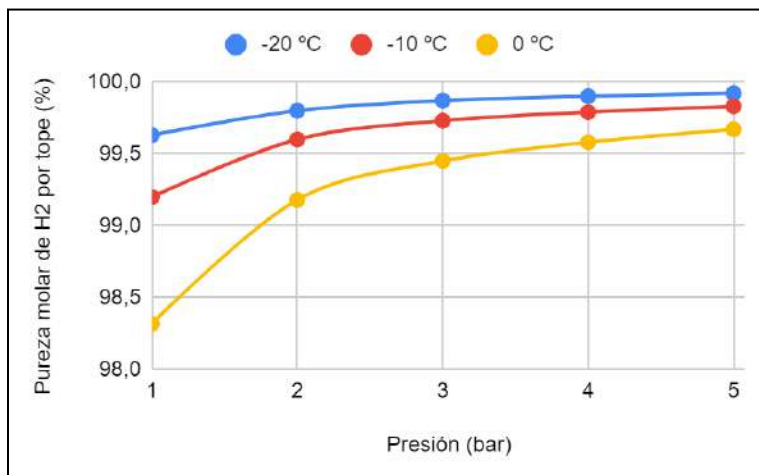


Figura 4.6 - Variación de la pureza de la corriente de hidrógeno en función de la presión del absorbedor y la temperatura de dicha corriente.

Este equipo se basa en la transferencia de masa de uno o varios componentes desde la fase gaseosa hacia la fase líquida, donde una de las limitaciones principales a esta transferencia es la solubilidad de dichos componentes. La solubilidad indica la máxima cantidad de un componente gaseoso que puede transferirse al líquido, en equilibrio de fases, siendo esta propiedad una función, principalmente, de la temperatura y la presión. Al disminuir la temperatura, la presión de vapor de los componentes que se quieren remover aumenta, por lo que tendrán mayor facilidad para transferirse hacia la fase líquida. Sucede el mismo efecto cuando se incrementa la presión. De este simple análisis se desprende que en un absorbedor siempre es conveniente operar a temperaturas bajas y presiones elevadas, de manera de favorecer el equilibrio L-V y aumentar la velocidad de transferencia de masa entre las fases.

Sin embargo, para la elección de la combinación de variables más conveniente, se deben examinar las limitaciones teóricas (equilibrio de fases) y tecnológicas, así como los costos fijos y variables de los equipos. En esta etapa del estudio, no es posible considerar detalladamente cuáles de esos costos tienen más relevancia, por lo que se verá en los capítulos siguientes.

De las *Figuras 4.5 y 4.6*, se desprende que operar a presiones altas resulta atractivo desde el punto de vista operativo de este equipo, debido a que permite obtener mayores purezas y menor uso de etanol líquido por el tope de la torre, en comparación a presiones bajas. Se observa la misma tendencia al disminuir la temperatura de operación. También se observa en la *Figura 4.6*, que en ningún caso se podría obtener la pureza del hidrógeno requerida (99,99 %). Esto se debe, principalmente, a dos motivos: por un lado, a que la fuerza impulsora para la transferencia de masa se vuelve cada vez menor, y se requeriría un equipo infinitamente largo para efectuar la separación; por otro lado, a cada par de presión y temperatura, se pueden alcanzar, como máximo, las composiciones de equilibrio de fases. Por lo tanto, este equipo servirá para purificar al hidrógeno hasta el máximo de pureza permitida por el equilibrio, procurando maximizar la recuperación del acetaldehído que sale por el fondo de la torre.

Como primer criterio, se opta por operar el absorbedor a la presión de salida del destilador flash (1 bar). Esto se fija de esta manera porque trabajar a presiones más altas implica la incorporación de un compresor de gas, y dado que este tipo de equipos aumentan la temperatura de la corriente gaseosa, luego es necesario contar con un equipo adicional para volver a enfriar la corriente. Como ambos equipos conllevan importantes costos energéticos y de adquisición, así como los posibles riesgos por operar a altas presiones, se decide operar a 1 bar.

Esta decisión no está exenta de desventajas, debido a que implica operar a un mayor caudal de líquido. Esto conlleva a utilizar equipos más grandes y mayor potencia de bombeo. Como se mencionó con anterioridad, en la actual etapa de estudio no es posible evaluar el impacto en estos factores, se analizará en capítulos posteriores.

Seleccionada la presión del absorbedor, resta escoger la temperatura del etanol y su caudal. Esto es posible observando la *Figura 4.7*, la cual exhibe la relación entre la recuperación del acetaldehído en la torre y el caudal de etanol por tope, a distintas temperaturas.

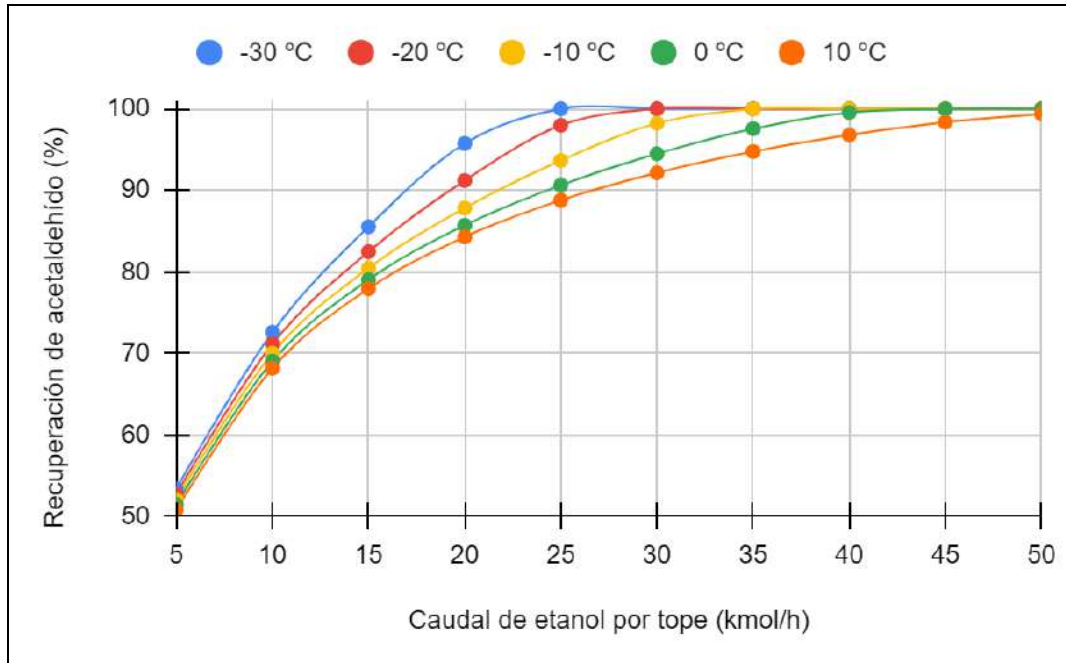


Figura 4.7 - Recuperación de acetaldehído vs. caudal molar de etanol a diferentes temperaturas del mismo.

De la *Figura 4.7* se observa que al aumentar el caudal del etanol, la recuperación del acetaldehído por fondo aumenta. Esto se debe a que la turbulencia del líquido permite que se aumente la velocidad de transferencia de masa. A su vez, la operación se ve beneficiada al exponerse a temperaturas de líquido más bajas, dado que enfría rápidamente la corriente gaseosa, haciendo que condense en mayor medida, favoreciendo el equilibrio y dejando casi únicamente al hidrógeno en estado de gas.

Por otro lado, elevar la temperatura del etanol implica también aumentar su caudal para conseguir la purificación deseada. Es importante obtener una relación de compromiso entre ambos parámetros, dado que una menor temperatura implica mayores costos de enfriamiento, pero un mayor caudal implica mayores costos en bombeo y tamaño de equipo.

A pesar de que los análisis extraídos de la *Figura 4.7* dan idea sobre cuáles podrían ser los valores correspondientes al caudal y la temperatura de la corriente "3.21", no es sencillo decidir cuáles son los valores óptimos.

En los absorbedores, es deseable que la temperatura de la corriente líquida que ingresa por tope sea más fría o, como máximo, tenga igual temperatura que la corriente gaseosa que ingresa por fondo. De esta manera, el gas que se absorbe pasa con mayor facilidad a la película líquida favoreciendo el equilibrio. En cambio, si la temperatura de la corriente "3.21" es mayor a la del gas, el equilibrio no se ve favorecido y se necesita un mayor caudal para obtener la separación requerida. Debido a que la temperatura de la corriente "3.2" se encuentra a $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$ se toma la decisión de que el etanol reciclado ingrese a esa misma temperatura. Además, llegar a esa temperatura implica la utilización de refrigerantes comúnmente empleados en la industria y, seguramente, más económicos que los necesarios para alcanzar temperaturas aún más bajas.

Con el objetivo de recuperar la mayor cantidad de acetaldehído por el fondo se analiza, mediante la *Figura 4.8*, el caudal de acetaldehído obtenido por el fondo de la torre en función del caudal de etanol.

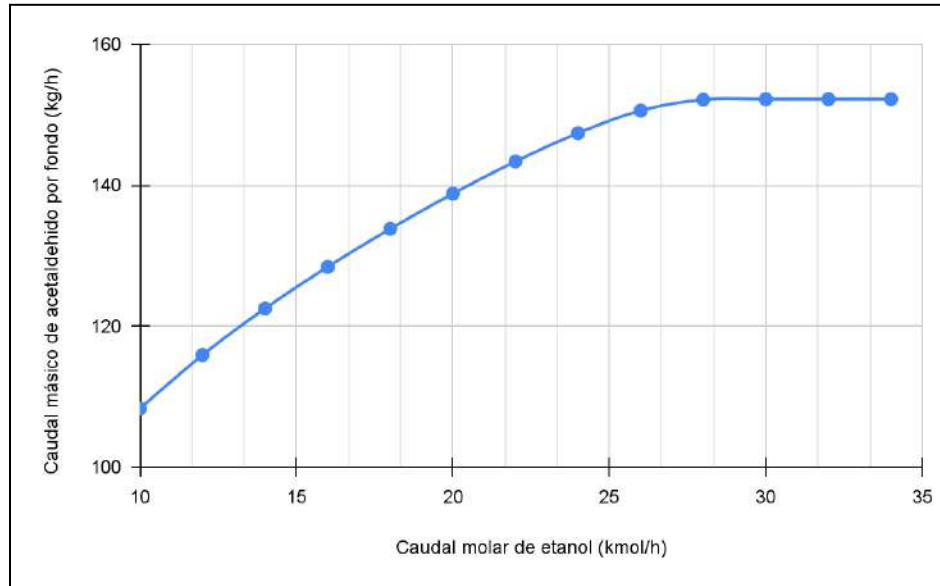


Figura 4.8 - Dependencia de la pureza de la corriente de hidrógeno y el porcentaje de recuperación de acetaldehído con el número de etapas del absorbedor.

Puede notarse de la figura, que para un cierto valor de caudal, el acetaldehído recuperado por el fondo permanece invariante, y esto es porque se alcanzó el equilibrio. Entonces, **se decide trabajar con un caudal de 28 kmol/h de etanol** recirculado, logrando así la máxima recuperación de acetaldehído. Para estas condiciones operativas, la máxima **pureza obtenida para el hidrógeno es del 99,61 %**, aproximadamente. En el *Capítulo 6*, se analizarán las distintas alternativas posibles para purificar a esta corriente hasta la pureza requerida en el proceso de licuefacción.

Seleccionados todos los parámetros de diseño, en el *Anexo D* se exhiben las corrientes en el absorbedor.

Finalmente, en la *Tabla 4.2* se exponen las características constructivas y operativas de la torre de absorción.

Tabla 4.2 - Resumen de características operativas y de diseño del absorbedor.

Torre de absorción T-302	
Datos generales	
Denominación del equipo	Torre de absorción
Función	Purificar el H ₂ y recuperar el AcH presente en la corriente de tope de V-100
Datos de operación	
Presión de operación (kPa)	111,7
Datos de diseño	
Número de etapas	10
Inundación (%)	37,5
Diámetro interior	0,3048
Altura total (m)	3,048
Tipo	Empacada

4.3.3 - Purificación de acetaldehído

Una vez separado el hidrógeno, el siguiente equipo tiene como objetivo separar al acetaldehído, el cual es el siguiente componente en orden de volatilidad relativa. Dado que el acetaldehído no forma azeótropos binarios ni ternarios con los restantes componentes de la corriente, y que a presión atmosférica presenta una diferencia en el punto de ebullición de al menos 50 °C con las otras sustancias volátiles (*Tabla 4.3*), se concluye que es factible realizar su purificación mediante el uso de una torre de destilación simple (teniendo en cuenta las reglas heurísticas).

Tabla 4.3 - Temperatura de ebullición de compuestos puros a 1 bar.⁴⁰

Compuesto	Temperatura de ebullición (°C)
Acetaldehído	20,2
Acetato de Etilo	77,1
Etanol	78,37
Agua	100

⁴⁰ Ref N° 3

Previo al ingreso al destilador, se opta por unificar las corrientes de fondo del destilador flash y la torre de absorción, dando lugar a la corriente "3.6"; esto resulta conveniente debido a que ambas corrientes están enriquecidas en los mismos compuestos y es más económico utilizar un único equipo más grande en lugar de dos más pequeños. El sistema de purificación se representa en la *Figura 4.9*.

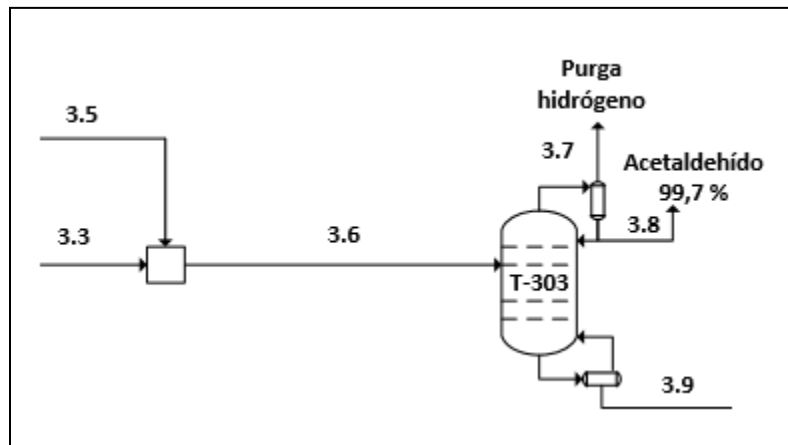


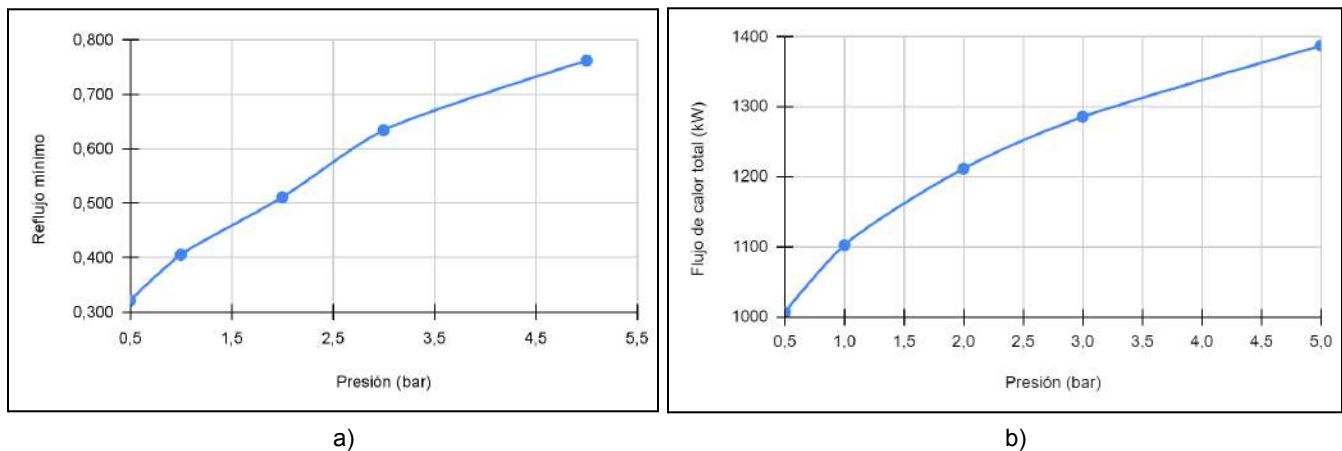
Figura 4.9 - Representación gráfica del sistema de purificación del acetaldehído, incluyendo el mezclador previo y el destilador.

Debido a que la corriente que ingresa a la torre contiene una pequeña fracción de vapor correspondiente al hidrógeno que no logró separarse en la etapa anterior, se trabaja en la torre de destilación con una purga de hidrógeno en el condensador. El mismo se obtiene por tope junto con el acetaldehído debido a su elevada volatilidad. Esta purga consiste en un condensador parcial que trabaja con una temperatura tal que permita recuperar el acetaldehído como condensado, pero que el hidrógeno permanezca como vapor para poder eliminarlo.

Una variable que necesita tenerse en cuenta antes de proceder con el diseño de la torre es la condición de la alimentación. Al tener un líquido sub-enfriado como alimentación (debajo del punto de burbuja), el número de platos en la zona de rectificación disminuye pero en la zona de agotamiento se incrementa. Además, se requiere más calor en el rehedidor pero menos enfriamiento en el condensador. Por otro lado, si ingresara una alimentación parcialmente vaporizada estos efectos se invierten y, para una separación dada, las condiciones de la alimentación pueden ser optimizadas. Sin embargo, en la etapa inicial de diseño no es conveniente proponer la vaporización de la corriente, debido a que la integración energética podría cambiar estas condiciones. Por este motivo, se decide mantener la corriente de entrada a la torre sin modificar su condición.

Como una aproximación al diseño de la torre, se partió de un método corto, el cual da un estimativo acerca de la cantidad de platos requerida, el reflujo mínimo y el óptimo plato de alimentación. Los métodos cortos son empleados para realizar un diseño aproximado de una torre de destilación. Estos métodos hacen suposiciones tales que simplifican de manera significativa el cálculo de los parámetros de la torre. Sin embargo, esto los vuelve menos exactos, por lo que sus resultados se utilizan meramente como valores semilla para luego utilizar métodos rigurosos.

En primer lugar, se utilizó este método para poder observar la influencia que tiene la presión de operación de la torre sobre distintas variables operativas, con el fin de definir cuál es la más conveniente para el diseño. En la *Figura 4.10*, se muestra la variación del reflujo mínimo y el flujo de calor total a proporcionar, en el condensador y reboiler, en función de la presión de operación de la torre.



a) b)
Figura 4.10 - Variación de a) la relación de reflujo mínima, y b) el flujo de calor total en función de la presión de operación.

Del análisis de la *Figura 4.10* se desprende rápidamente que lo más conveniente es operar a la menor presión posible, ya que se minimiza tanto la relación de reflujo como los requerimientos energéticos. Esto se debe a bajas presiones la diferencia entre los puntos de ebullición de los compuestos y el del acetaldehído es elevada, lo que facilita su separación, pero a medida que la presión aumenta, estos puntos se vuelven cada vez más cercanos, lo que implica que su separación sea más difícil. Si bien presiones menores a 1 atm son incluso más favorables, operar en estas condiciones implica la instalación de un eyector para poder operar a presiones de vacío, mientras que a la presión atmosférica no es necesario agregar ningún equipo adicional. Por lo tanto, **se opta por operar la torre a 1 atm de presión.**

Una vez fijada la presión de operación, se obtuvieron, con el método corto, los valores de reflujo mínimo y cantidad de platos mínima a emplear, junto con los requerimientos de energía estimados. Con estos valores, se procedió a diseñar la torre con el método riguroso.

Antes de proceder con este método, fue necesario establecer un criterio sobre la relación de reflujo a utilizar. En general, al aumentar el reflujo, aumenta el flujo de calor en el rehervidor y en el condensador, por lo que se aumentan los costos operativos. Por otro lado, el número de etapas necesarias para la separación decrece, por lo que la torre se hace más corta, pero el diámetro aumenta debido al aumento de los flujos dentro de la torre. Con relaciones de reflujo bajas, se necesitan más etapas para lograr la separación, y aumentan los costos fijos. Por lo tanto, la relación de reflujo óptima se determina por criterios económicos, los cuales suelen estar entre 1,2 y 1,5 veces la relación de reflujo mínima. Se selecciona entonces, **una relación de reflujo de $1,2 \cdot R_{\min}$** , con el fin de minimizar los costos operativos en los equipos de intercambio de calor de la torre.

Con el método riguroso se obtuvo el diseño de la torre que permita la separación deseada: obtener por tope una corriente de acetaldehído con una pureza del 99,7 % en peso. El siguiente paso fue optimizar la torre de manera de, por un lado, cumplir con el requisito por el tope, y por el otro, recuperar la mayor cantidad de acetaldehído posible. Para esto se presenta la *Figura 4.11*, que muestra la influencia que tiene la cantidad de platos de la torre sobre la recuperación del compuesto deseado. Cabe destacar que todos los valores obtenidos para la confección de este gráfico se dieron con la alimentación ubicada en el plato de alimentación óptima, según se obtuvo en el método corto.

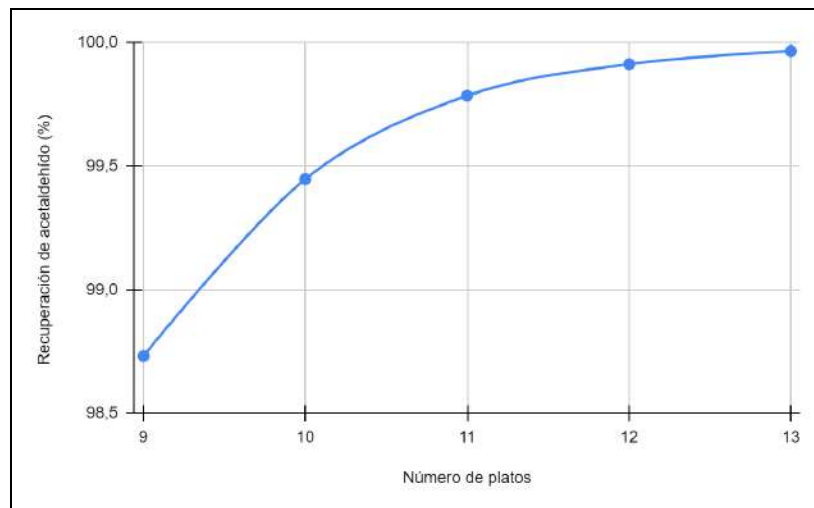


Figura 4.11 - Variación de la recuperación de acetaldehído en función del número de platos en la torre.

Se observa que la máxima recuperación posible, para las condiciones propuestas, se obtiene para 13 platos, con una recuperación del 99,96 %, aproximadamente. Por lo tanto se decide dejar esta cantidad fija.

Con la torre diseñada, se obtiene la variación de la temperatura y la composición de las especies dentro de la misma. Se muestran estos resultados en las *Figuras 4.12* y *4.13*, respectivamente.

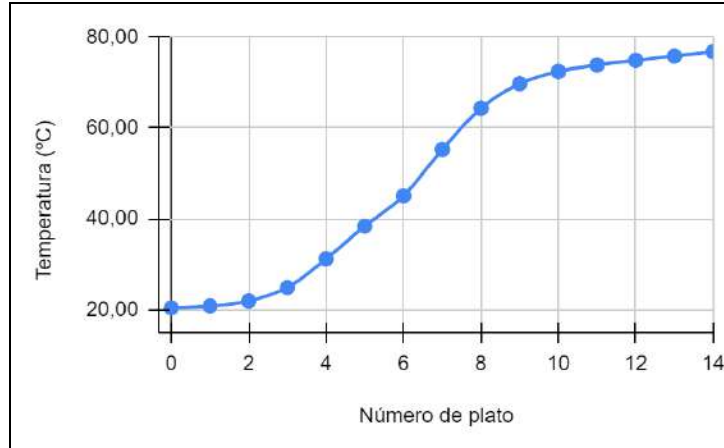


Figura 4.12 - Perfil de temperaturas de la torre T-303.

En la Figura 4.12 puede observarse que la temperatura dentro de la torre varía desde 76,7 °C hasta 20,4 °C (temperaturas del reboiler -plato "0"- y condensador -plato "14"-, respectivamente). Cuando la mezcla ingresa a la torre (plato 5), el componente volátil se evapora y asciende hacia el tope, mientras que los compuestos menos volátiles descienden como líquido hacia el fondo. Conforme se asciende en la torre las mezclas L-V en cada uno de los platos estarán más enriquecidas en acetaldehído. Debido a que su punto de ebullición es mucho menor que el de los demás compuestos, a mayor pureza de acetaldehído en el plato, menor será su temperatura, hasta finalmente alcanzar la temperatura de condensación por el tope de la torre.

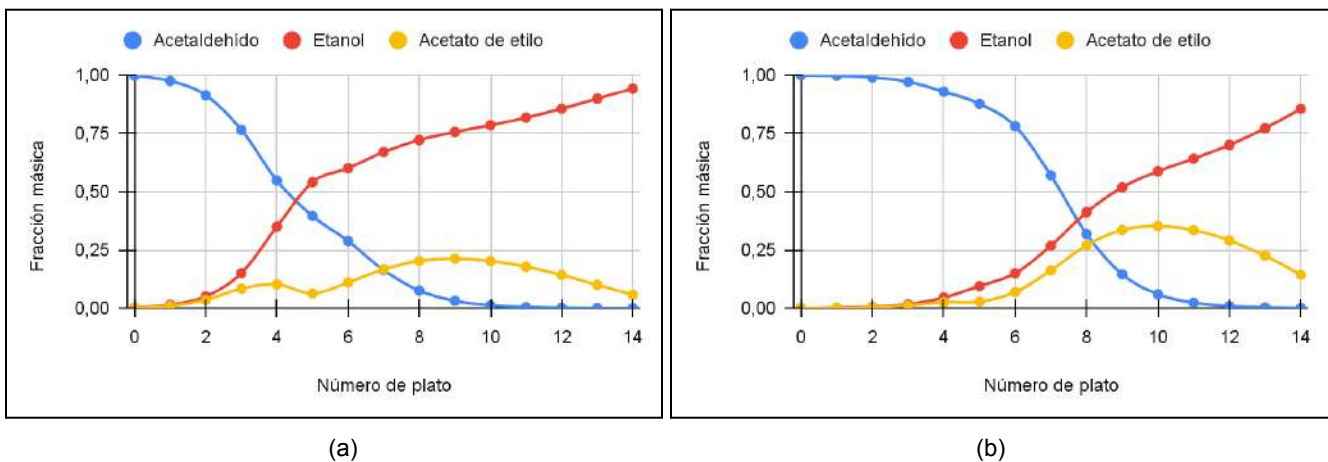


Figura 4.13 - Perfiles de concentración dentro de la torre de destilación T-303 para cada componente en las fases a) líquido y b) vapor.

Como puede observarse en la *Figura 4.13*, desde del plato de alimentación hacia el tope se tiene la zona de rectificación, zona donde se tienen platos con composiciones altas del compuesto más volátil -*acetaldehído*-, mientras que en la zona inferior al plato de alimentación la zona de agotamiento donde la composición es alta en componentes menos volátiles. Esto se corresponde con el perfil de temperaturas mostrado en la *Figura 4.12*, donde se tienen las menores temperaturas en la zona de enriquecimiento y las mayores en la zona de agotamiento.

Finalmente, se presenta la configuración para la torre diseñada, en la *Tabla 4.4*.

Tabla 4.4 - Resumen de características operativas y de diseño del destilador de acetaldehído.

Torre de destilación T-303	
Datos generales	
Denominación del equipo	Torre de destilación
Función	Purificación del Acetaldehído al 99,7% en masa
RESUMEN DE LA COLUMNA	
Presión de operación (atm)	1
Número de platos	13
Temperatura del condensador (°C)	20,4
Carga térmica del condensador (kW)	408,6
Temperatura del reboiler (°C)	76,8
Carga térmica del reboiler (kW)	731,5
Diámetro interior (m)	0,762
Altura total (m)	7,31
Reflujo molar	0,486
Recuperación de acetaldehído (%)	99,96
Plato de alimentación	5

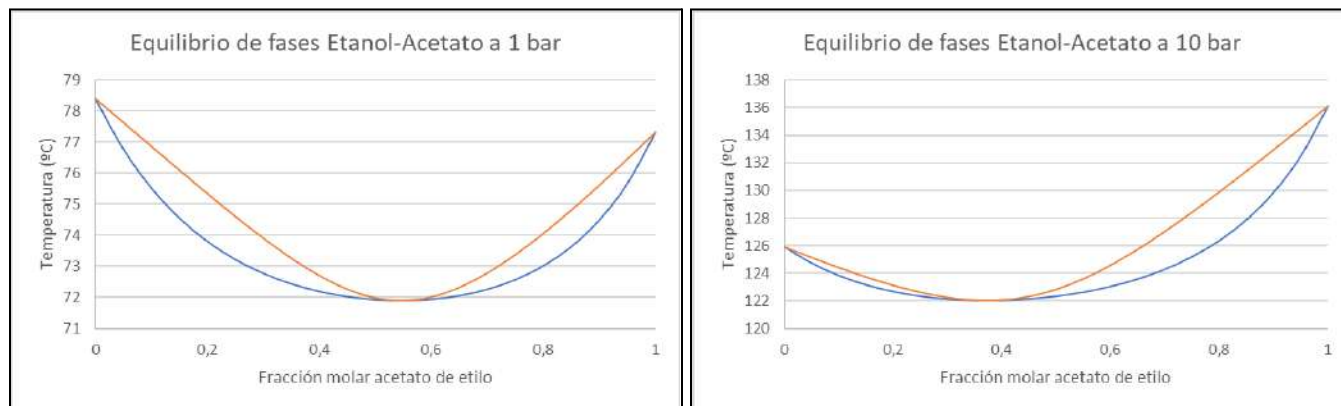
4.3.4 - Purificación de etanol y de acetato de etilo

Una vez obtenido el acetaldehído, la corriente “3.9” debe someterse a una posterior etapa de separación y de esta manera obtener, por un lado, el etanol a recircular en el sistema y, por otro lado, el acetato de etilo con la pureza comercial previamente especificada. Esta corriente está compuesta por etanol, acetato de etilo, agua y trazas de acetaldehído, siendo etanol el componente mayoritario.

Como se explicó en el apartado anterior, la separación del acetaldehído respecto de los demás componentes no representa un inconveniente, por lo que no se tiene en cuenta su efecto en el análisis que sigue. El principal problema que se presenta a la hora de purificar esta corriente es que la mezcla *etanol - acetato de etilo - agua* presenta azeótropos de mínima temperatura, tanto binarios como ternarios. Esto implica una dificultad a la hora de separarlos dado que no es posible hacerlo con una única torre de destilación, sino que deben adoptarse distintas alternativas, basándose en las normalmente utilizadas en la industria, para separar mezclas azeotrópicas: destilación extractiva, destilación azeotrópica, entre otras.

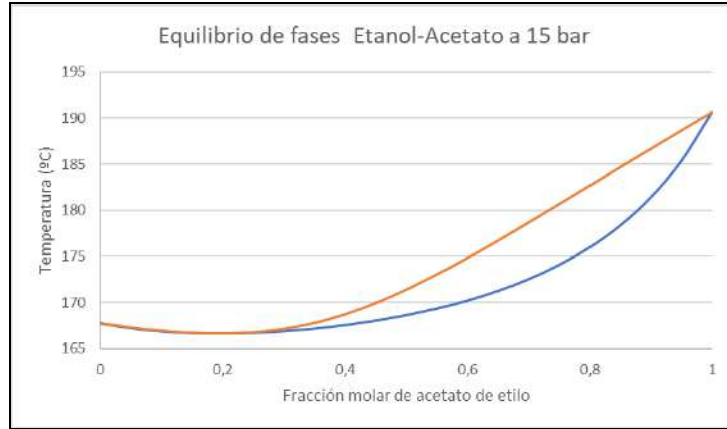
Dado que la composición de agua en esta corriente es muy baja en proporción a los demás componentes (menor al 1 %), se asume que no se encuentra en la cantidad suficiente como para interferir en la separación. Por lo tanto, se optó por considerar a la corriente de estudio como si fuera un sistema binario constituido por etanol y acetato de etilo. Esto permite trabajar con los diagramas de equilibrio L-V para esta mezcla binaria, simplificando notoriamente el análisis. Cabe destacar que esta suposición no es completamente válida debido a que los demás compuestos mencionados aún conforman la mezcla y pueden inferir de cierta manera sobre sus características, como lo son las temperaturas de los puntos de burbuja y rocío. Sin embargo, la suposición sirve como una primera aproximación al diseño de los equipos de separación involucrados.

Se sabe, también, que estos puntos azeotrópicos son muy sensibles a la presión. La *Figura 4.14* muestra los equilibrios de fases para la mezcla binaria *Etanol-Acetato de Etilo* a diferentes presiones.



a)

b)



c)

Figura 4.14 - Equilibrio líquido-vapor para el binario Etanol-Acetato de Etilo a presiones de a) 1 bar, b) 10 bar y c) 15 bar.

Aprovechando el efecto que tiene la presión sobre el punto azeotrópico de la mezcla⁴¹, se propone separar los compuestos mediante dos destilaciones sucesivas a distintas presiones, empleando además un reciclo desde la segunda torre hacia la primera. Esto se conoce como *Pressure Swing Distillation*, o *destilación por cambio de presión*. En la *Figura 4.15* se muestra un diagrama tecnológico del sistema de separación propuesto.

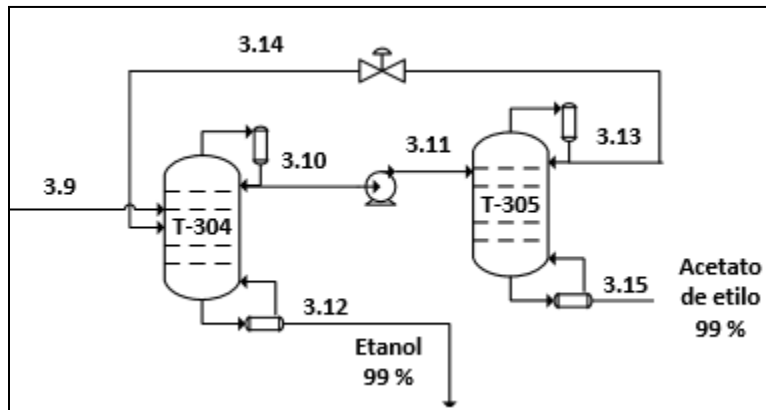


Figura 4.15 - Representación gráfica del sistema de purificación de etanol y de acetato de etilo, incluyendo el reciclo.

La operación se inicia en la corriente "3.9", la cual ingresa a la primera torre de destilación, que trabaja a 1 bar de presión. Dicha corriente contiene una composición molar de etanol y acetato del 96 % y 3 % respectivamente. A esta presión, el equilibrio binario predice un azeótropo para una composición de acetato del 55 % molar aproximadamente, por lo que el punto de operación correspondiente a la corriente "3.9" se encuentra situado a la izquierda del mismo. Dado que es un azeótropo de mínima, se espera obtener por el tope de la torre una mezcla con composición azeotrópica y en el fondo el componente menos volátil, en este caso el etanol.

⁴¹ Ref N° 4

Obtener por tope la composición azeotrópica implicaría infinitas etapas de equilibrio. Es por ello que se decide diseñar una torre que obtenga una corriente de salida con una composición cercana a la azeotrópica. El valor fijado de composición de acetato de etilo en el tope fue del 48 % molar. Asimismo, por el fondo se fija una pureza de etanol del 99 % en masa, que luego se utiliza para recircular a la torre de absorción T-302, y al reactor. Más adelante en esta sección se detalla el efecto que tiene esta pureza sobre el desempeño operativo de estos equipos.

Luego, la corriente de tope de la primera torre se presuriza hasta 15 bares, debido a que la segunda torre opera en esas condiciones. A esta presión, la composición azeotrópica corresponde a un 30 % molar de acetato de etilo, aproximadamente. Se elige convenientemente esta presión gracias a que la composición de la corriente "3.10" se encuentra a la derecha del azeótropo, permitiendo separar por fondo acetato de etilo de alta pureza y por el tope una mezcla con la nueva composición azeotrópica.

Como el requerimiento es comercializar el acetato de etilo al 99 % en peso, este es el parámetro de diseño que se fija en el fondo de la torre, mientras que para el tope se fija una composición de acetato del 37 % molar. Luego, como la corriente "3.13" aún contiene parte del acetato en conjunto con el etanol, se recircula a la primera torre, de manera de maximizar la recuperación del acetato a la salida del proceso.

Este esquema permite separar la mezcla que presenta el azeótropo de una manera sencilla, sin incurrir en equipos costosos ni la necesidad de incluir compuestos adicionales al sistema.

4.3.4.1 - Diseño y optimización de las torres

A la hora de diseñar este sistema de separación, la primera dificultad que aparece es la presencia del reciclo entre las torres. Esto implica que no se puede analizar cada torre por separado, sino que se las debe considerar en conjunto. Por lo tanto, no es posible utilizar el mismo razonamiento utilizado para el diseño de la torre de purificación de acetaldehído.

Para obtener el diseño óptimo, entonces, se procedió de la siguiente manera: se analizó el efecto que tienen el número de platos, el plato de alimentación y la relación de reflujo sobre el flujo de calor total involucrado en los condensadores y reboilers. Los criterios seleccionados son, por un lado, minimizar el calor requerido, y por el otro, maximizar la recuperación de acetato de etilo.

En primer lugar, para comenzar con el análisis, fue necesario contar con un valor semilla que permita que la resolución numérica de estas torres alcance la convergencia. De manera iterativa, se obtuvo la siguiente configuración para ambas torres (*Tabla 4.5*):

Tabla 4.5 - Valores semilla utilizados para la optimización de las torres.

	Torre 1 (T-304)	Torre 2 (T-305)
Número de platos	15	8
Plato de alimentación	4 (reciclo)	4
	9 (alimentación)	
Relación de reflujo	5.054	0.431

Para optimizar estas torres, como se mencionó, se busca minimizar los requerimientos energéticos y maximizar la recuperación de acetato de etilo. En primer lugar, se analizó la influencia que tiene la cantidad de platos de las torres sobre estas variables. Se procedió de la siguiente manera: se fijó la relación de reflujo y los platos de alimentación de la primera torre con los valores semilla, y lo mismo con la segunda, fijando también el número de platos. Luego, se varió la cantidad de platos en esta torre y se registró el calor total requerido en ambas torres. De forma análoga, se realizó el mismo procedimiento, pero ahora variando la cantidad de platos de la segunda torre, con la primera fija. En la *Figura 4.16* pueden observarse los resultados obtenidos.

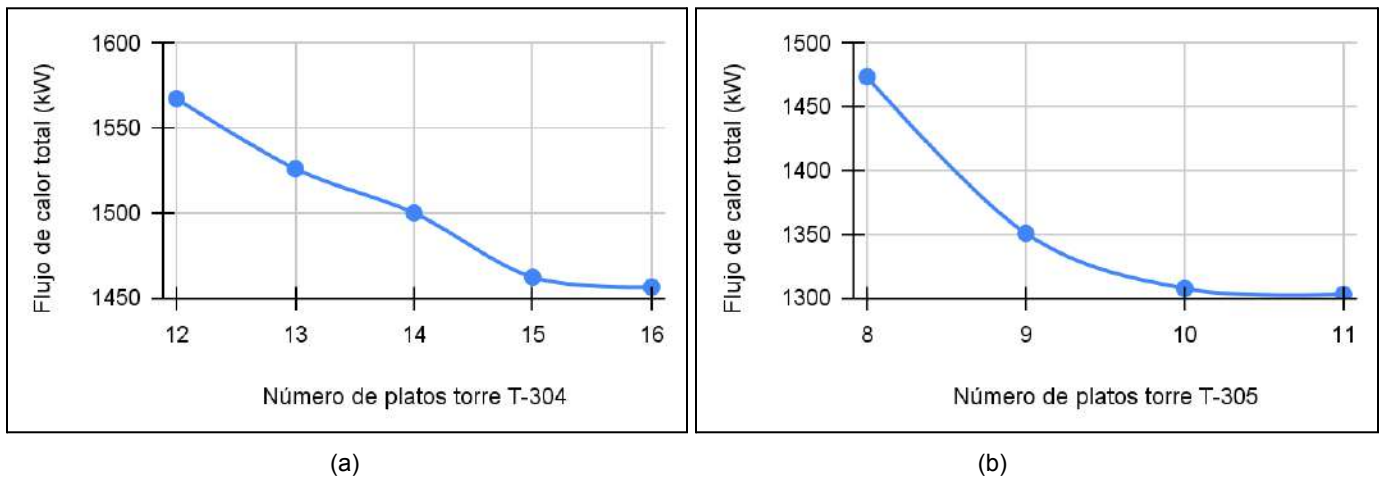
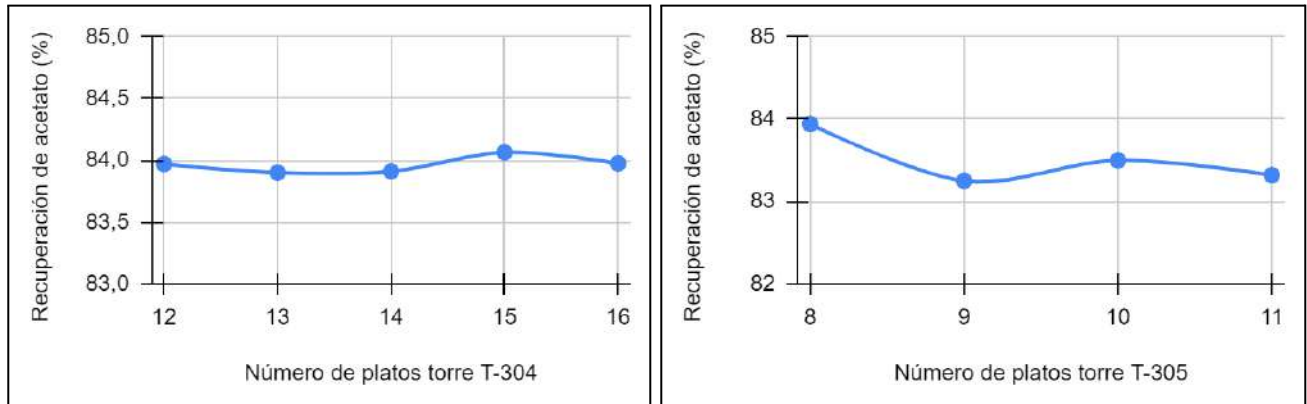


Figura 4.16 - Variación del flujo de calor total en el sistema de destilación en función del número de platos para la torre a) T-304 y b) T-305.

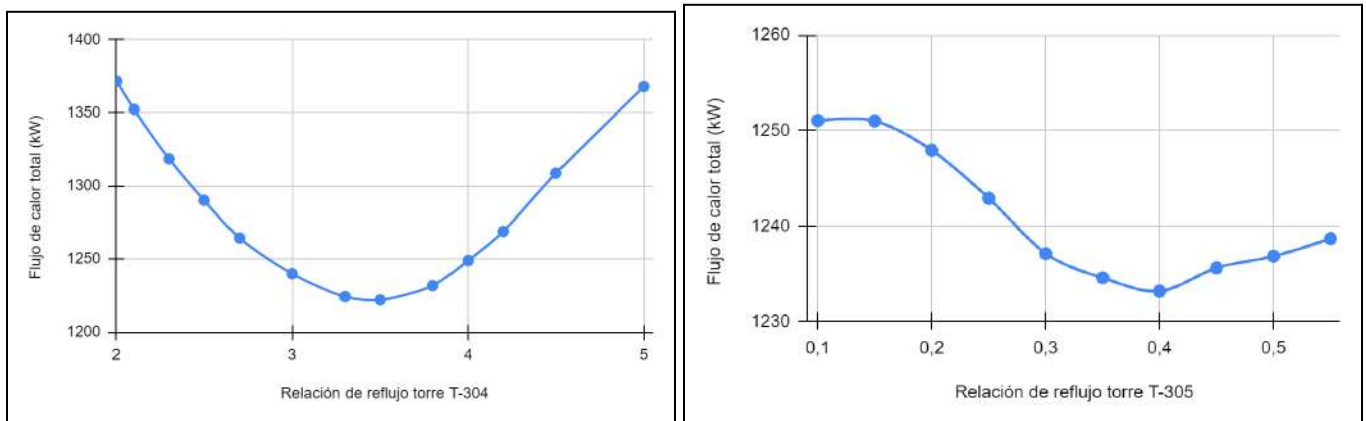
Como se puede observar en la *Figura 4.16*, el flujo de calor total disminuye al aumentar la cantidad de platos de las torres. Esto se debe a que se aumenta el tiempo de contacto entre las fases líquido-vapor dentro de la torre, por lo que también aumenta la velocidad de transferencia de masa. Entonces, para alcanzar el mismo grado de separación, se reducen los requerimientos energéticos en los equipos de intercambio de calor en la torre. Los resultados muestran que, para un cierto número de plato, esta variación deja de ser significativa. por lo que no es conveniente superar este valor. Se selecciona, entonces, una **cantidad de 15 y 10 platos para las torres T-304 y T-305**, respectivamente.

En cuanto a la recuperación de acetato, se puede concluir que esta variable no tiene un efecto significativo sobre ella, como se puede observar en la *Figura 4.17*. Los porcentajes de recuperación se obtuvieron, para todos los casos, entre el 83-84 %, por lo que no es sensible ante cambios en el número de platos.



(a) (b)
Figura 4.17 - Variación de la recuperación de acetato de etilo en el sistema de destilación en función del número de platos para la torre a) T-304 y b) T-305.

Siguiendo con el razonamiento anterior, ahora, con la cantidad de platos fijas, se varía la relación de reflujo en las torres. Los resultados obtenidos para el flujo de calor total se muestran en la *Figura 4.18*.



(a) (b)
Figura 4.18 - Variación del flujo de calor total en el sistema de destilación en función de la relación de reflujo para la torre a) T-304 y b) T-305.

Los resultados de la *Figura 4.18-a)* muestran que, con el incremento en la relación de reflujo en la torre, el flujo de calor total disminuye hasta alcanzar un mínimo, y luego aumenta. Esto es porque, con este aumento, el flujo de líquido dentro de la torre a presión atmosférica (T-304) se incrementa, haciendo que el de la torre presurizada (T-305) disminuya. De esta manera se minimizan los requerimientos en los equipos de las torres. Esto se da hasta cierto valor de la relación de reflujo, en donde el flujo de líquido se vuelve tan alto que implica que el reboiler de la torre a presión atmosférica se vea más exigido. Se puede analizar el mismo efecto observando la *Figura 4.18-b)*, pero se encuentra menos marcado que en la primer torre. Se selecciona entonces una relación de reflujo de **3,4 para la torre T-304 y 0,4 para la T-305**, de manera de minimizar los requerimientos de energía en ambas torres.

Análogamente al caso anterior, se obtuvo que la recuperación de acetato a la salida no es sensible ante esta variable, por lo tanto no se la considera para el análisis.

Una vez definidas la cantidad de platos y la relación de reflujo en las torres, resta analizar la influencia que tiene el plato de alimentación sobre el flujo de calor total. En las *Figuras 4.19 y 4.20* se muestran los resultados obtenidos.

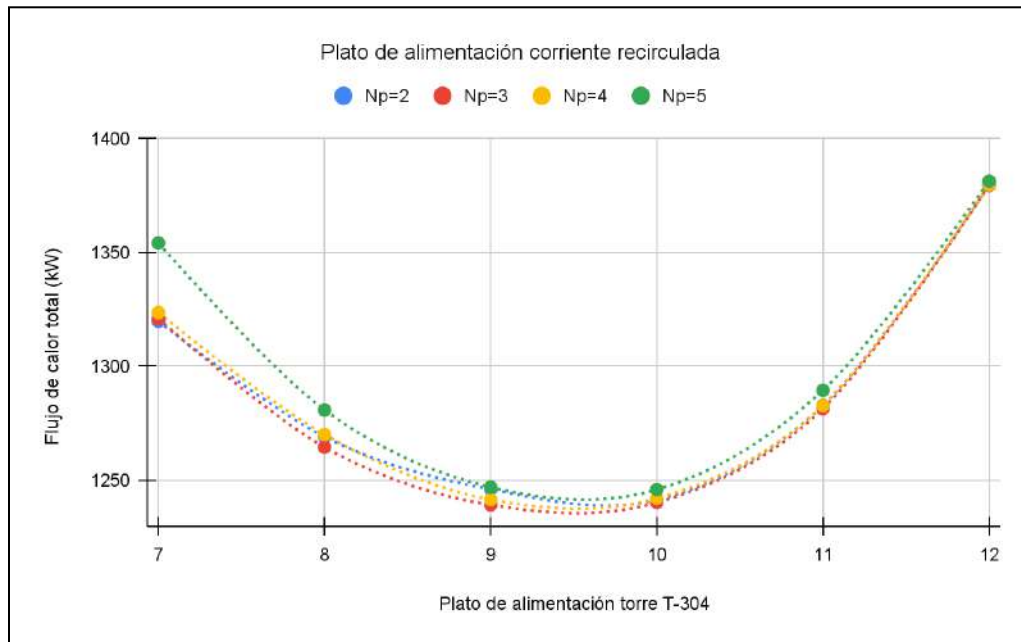


Figura 4.19 - Variación del flujo de calor total en el sistema de destilación en función del plato de alimentación para la torre T-304.

Para analizar esta tendencia, primero fue necesario fijar el plato de alimentación de la corriente a recircular,"3.14", y luego variar el plato de alimentación de la corriente de entrada,"3.9". Se sabe que la composición de la corriente recirculada es la misma que abandona la torre T-305 por el tope, con la composición azeotrópica a 15 bar. La fracción molar de acetato en esta corriente es mayor que la correspondiente a la corriente de ingreso al sistema, por lo que debe entrar en un plato de alimentación más elevado en la torre. Se varió, entonces, la posición de esta alimentación entre los platos dos a cinco, mientras que para la corriente de entrada, entre los platos siete a doce (*Figura 4.19*). Como puede observarse, se obtuvo nuevamente un mínimo en el requerimiento energético en la torre, entre los platos tres y cuatro para la corriente recirculada, y entre los platos 9 y 10 para la corriente de entrada al sistema. Esto se debe a que, en sus respectivos platos, la composición que se tiene en la torre para los flujos de líquido y vapor es similar a lo que ingresa. De esta manera, las corrientes internas no se diluyen, y se aumenta la eficiencia de la separación, minimizando los requerimientos de energía. Se seleccionan, entonces, **los platos tres y nueve para el ingreso de las corrientes de recirculación y de entrada al sistema**, respectivamente.

Observando la *Figura 4.20*, se concluye que lo más conveniente es introducir la alimentación de la torre T-305 cerca del tope, por el mismo motivo expuesto y analizado para la torre T-304.

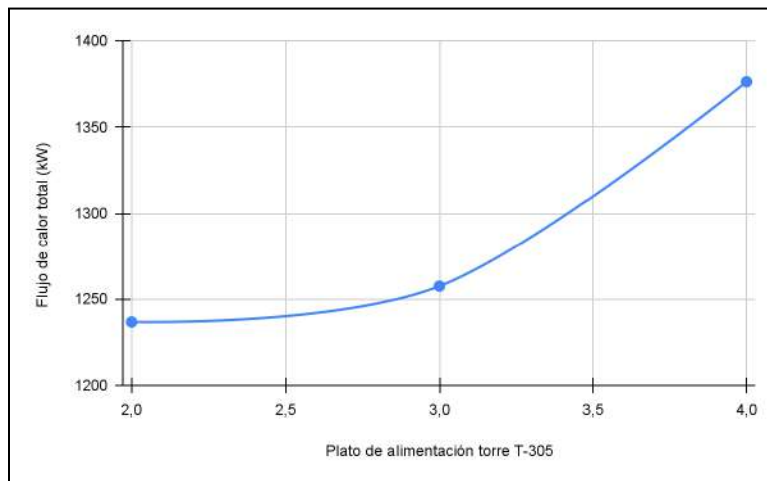
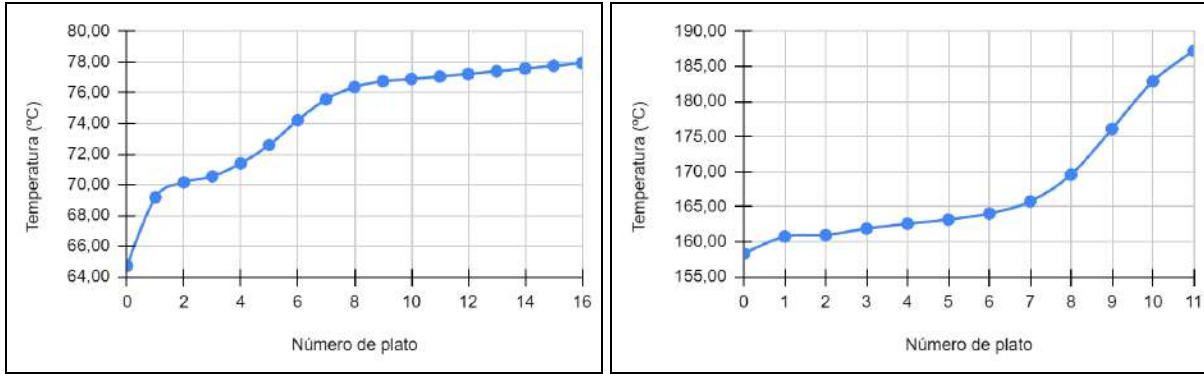


Figura 4.20 - Variación del flujo de calor total en el sistema de destilación en función del plato de alimentación para la torre T-304.

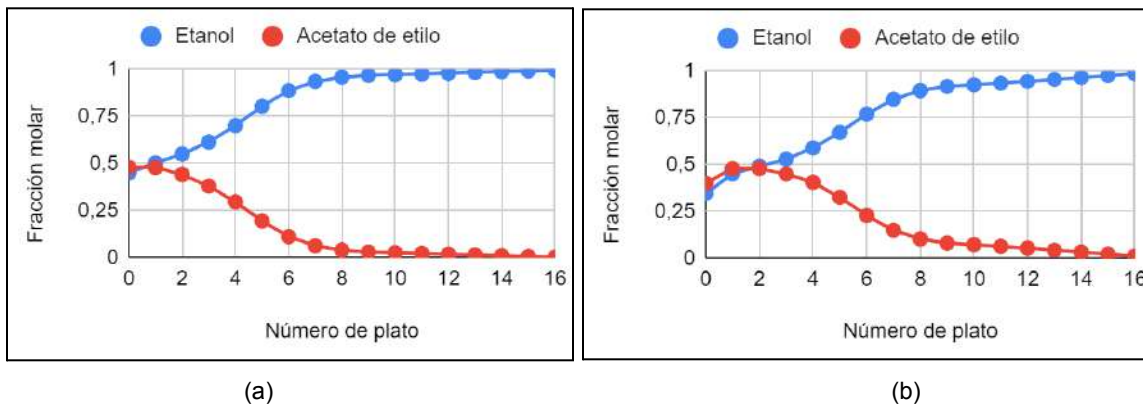
Finalmente, se presentan los perfiles de temperatura y composición dentro de las torres, en las *Figuras 4.21, 4.22 y 4.23*.



(a) (b)
Figura 4.21 - Perfil de temperaturas de las torres a) T-304 y b) T-305.

Como puede observarse en la *Figura 4.21* , los perfiles de temperatura tienen la forma esperada para una torre de destilación, siguiendo el mismo razonamiento que se explicó en la sección anterior. Los platos de los extremos corresponden, respectivamente, al condensador y al reboiler.

A simple vista puede notarse que el rango de temperaturas de trabajo de ambas torres no coincide exactamente con el rango de temperaturas de los respectivos equilibrios L-V para el binario etanol- acetato de etilo (*Figura 4.14*), sino que se tienen temperaturas un tanto menores. Esto se debe a que los equipos se simularon con la mezcla de todos los componentes presentes, los cuales interactúan con los compuestos de interés, lo cual implica que la mezcla se comporte de una manera distinta a la esperada. Sin embargo esta suposición fue válida para poder diseñar preliminarmente los equipos de separación, con los criterios adecuados mencionados anteriormente. En caso de que se desee continuar con el proyecto se debe profundizar el análisis de esta mezcla para predecir exactamente su comportamiento y poder tener un mejor desempeño operativo.



(a) (b)
Figura 4.22 - Perfiles de concentración dentro de la torre de destilación T-304 para cada componente en las fases a) líquido y b) vapor.

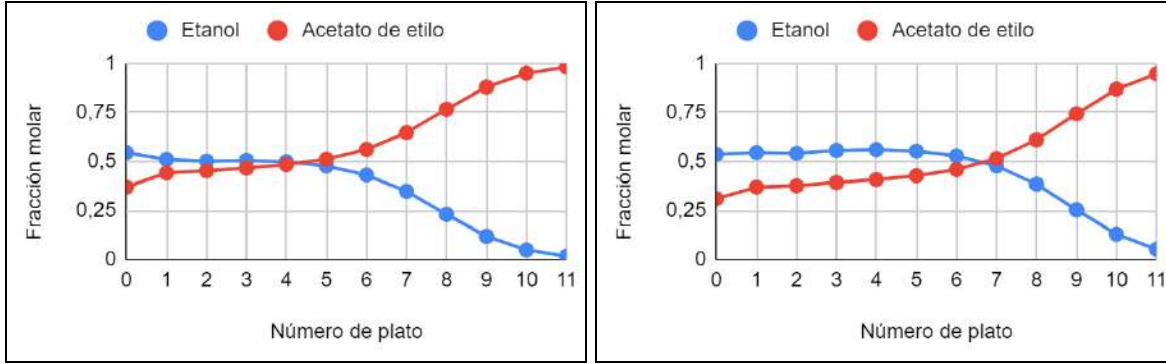


Figura 4.23 - Perfiles de concentración dentro de la torre de destilación T-305 para cada componente en las fases a) líquido y b) vapor.

Se observa en las Figuras 4.22 y 4.23 que el comportamiento es el esperado para las composiciones dentro de la torre. Cabe destacar que sólo se graficaron las composiciones de acetato de etilo y etanol, debido a que los demás componentes sólo se obtuvieron en trazas.

En las Tablas 4.6 y 4.7 se detallan los parámetros de diseño de cada una de las torres.

Tabla 4.6 - Resumen de características operativas y de diseño del destilador de etanol.

Torre de destilación T-304	
Datos generales	
Denominación del equipo	Torre de destilación
Función	Purificación de Etanol al 99% en masa
Resumen de la columna	
Presión de operación (atm)	1
Número de etapas	15
Temperatura del condensador (°C)	64,7
Temperatura del reboiler (°C)	77,9
Flujo de calor del condensador (kW)	516,3
Flujo de calor del reboiler (kW)	476,8
Diámetro interno (m)	0,762
Altura total(m)	6,096
Reflujo molar	3,4
Plato de alimentación (principal)	9
Plato de alimentación (recirculación)	3

Tabla 4.7 - Resumen de características operativas y de diseño del destilador de acetato de etilo.

Torre de destilación T-305	
Datos generales	
Denominación del equipo	Torre de destilación
Función	Purificación del Acetato de Etilo al 99% en masa
Resumen de la columna	
Presión de operación (atm)	15
Número de etapas	10
Temperatura del condensador (°C)	158,3
Temperatura del reboiler (°C)	187,2
Flujo de calor del condensador (kW)	70,0
Flujo de calor del reboiler (kW)	125,3
Diámetro interno (m)	0,4572
Altura total(m)	3,585
Reflujo molar	0,4
Recuperación de acetato (%)	84,0
Plato de alimentación	2

Finalmente, en el Anexo D se presentan las propiedades de todas las corrientes involucradas en el sistema de separación propuesto.

Como se mencionó anteriormente en esta sección, la pureza seleccionada en el fondo de la torre de destilación de etanol, T-304, se fijó en un 99 % en masa. Esto, para poder mantener una pureza cercana a la del etanol utilizado como materia prima (99,99 % en masa), ya que luego parte de esta corriente se debe recircular para mezclarse con la alimentación fresca, previo a la entrada del reactor. Es importante que la composición de la corriente de ingreso al reactor se encuentre lo más cercana a la de diseño, correspondiente a la del etanol fresco. Como se detalló en profundidad en el *Capítulo 3*, la producción de acetato de etilo se obtuvo bajo una serie de suposiciones que sólo son válidas si se opera en el punto de operación obtenido en bibliografía. Esto se debe a que no se contó con expresiones cinéticas que permitan cuantificar la producción de este compuesto. Por lo tanto, no es posible analizar cuál es la influencia que tiene un cambio en la pureza de la corriente de entrada de etanol sobre esta variable, ya que se estaría realizando un error debido al apartamiento del punto de operación.

De la torre de destilación T-304 sale por el fondo una cantidad de 3238,8 kg/h de etanol con una pureza del 99 % en masa. De aquí, aproximadamente el 51,5 % se envía hacia la torre de absorción T-302, mientras que el restante se envía al reactor para mezclarse con la corriente de etanol fresco. Luego de la mezcla, la composición de la corriente que posteriormente ingresa al reactor, "1.2", es del **99,5 %**, aproximadamente. Si bien hay una disminución en la pureza, se considera que no hay un cambio sustancial en cuanto al valor anterior, por lo que se decide continuar con el análisis, considerando que el reactor diseñado en las condiciones del *Capítulo 3* sigue siendo adecuado, y que su corriente de salida es la misma. En etapas posteriores del diseño, se debería volver a diseñar el reactor con esta nueva pureza obtenida, y volver a iterar hasta encontrar la solución final. Sin embargo, dado que se trata de una etapa de prefactibilidad para el diseño, la estimación del tamaño de los equipos y las corrientes involucradas tienen un error asociado considerable. Por lo tanto, se decide no volver a iterar y se continúa con los equipos y corrientes contempladas hasta ahora para el análisis.

Bibliografía Capítulo 4

Bibliografía específica

1. Walas, S.M.; Butterworth-Heinemann Series in Chemical Engineering, "Chemical Process Equipment - Selection and Design", 1990. (Pág. 404)
2. "Hydrogen Purity – Final Report" (2019) Department for Business, Energy & Industrial Strategy. Disponible en:
<https://static1.squarespace.com/static/5b8eae345cfd799896a803f4/t/5e58ebfc9df53f4eb31f7cf8/1582885917781/WP2+Report+final.pdf>
3. Datos extraídos del National Institute of Standards and Technology. Disponible en:
<https://webbook.nist.gov/>
4. Casado, S.G.; DIQUEMA-UPM, 2014, "Apuntes de operaciones de separación por transferencia de materia I". (Pág. 7-11)

Bibliografía general

- Church, J.M.; Joshi, H.K. Industrial & Engineering Chemistry, 43 (8).(1951) 1804-1811. "Acetaldehyde by Dehydrogenation of Ethyl Alcohol".
- Henley, E.J.; Seader J.D.; "Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química" (2000).
- Treybal, R. (2000). Operaciones de Transferencia de Masa (2a. ed.). Mexico: McGraw-Hill Interamericana.



CAPÍTULO V

INTEGRACIÓN ENERGÉTICA
Y EQUIPOS AUXILIARES

5.1 - Objetivos

- Analizar la posibilidad de integración energética.
- Diseñar la red de intercambio de calor y estimar las áreas de transferencia de calor.
- Diseñar/seleccionar los sistemas auxiliares de calentamiento y/o enfriamiento.
- Definir y seleccionar los equipos auxiliares requeridos en el proceso.

5.2 - Introducción

El aumento en los costos de la energía y una conciencia cada vez mayor puesta al cuidado del medio ambiente y a la sustentabilidad, llevan a la inquietud por parte de las industrias por aplicar métodos eficientes para reducir el consumo de energía en las operaciones.

Muchos algoritmos han sido desarrollados con el objetivo de disminuir los consumos de servicios auxiliares dentro de una línea de procesos productivos. Uno de estos métodos, es la denominada integración energética, la cual consiste, en primera instancia, en diseñar redes de intercambio de energía tal que las corrientes del proceso que se desean enfriar lo hagan mediante las corrientes del mismo proceso que deben ser calentadas, y viceversa. La integración energética constituye una poderosa herramienta que encierra un procedimiento termodinámico bien estructurado para una optimización técnico-económica de cada red de intercambio de calor. Además, busca aprovechar cantidades de energía disponibles en algún punto del proceso para abastecerse, por ejemplo, el calor que se retira de las corrientes calientes, se lo puede utilizar para precalentar la alimentación del horno y, de esta manera, requerir menor energía calórica.

Por su parte, la integración energética de procesos tiene su fundamento en la Primera y Segunda Ley de la Termodinámica, y constituye una etapa fundamental en el diseño de una nueva planta o en la optimización de una ya existente, haciendo énfasis en el uso eficiente de la energía y la reducción de los efectos medioambientales.

Actualmente, en bibliografía se reportan distintos métodos de integración energética para lograr el mismo objetivo. Entre ellos se destacan los métodos heurísticos y métodos termodinámicos y estos últimos pueden ser clasificados en:

- Métodos basados en el análisis de la Primera Ley (Tecnología Pinch, Métodos basados en la Programación Matemática).
- Métodos basados en el análisis de la Segunda Ley (Análisis Exergético).
- Métodos basados en la combinación del análisis económico y la Segunda Ley (Análisis Exergoeconómico).

Por supuesto, para la aplicación de estos métodos es primordial que el proceso cuente con corrientes cuya energía esté siendo desaprovechada.

En el presente trabajo se utilizará el Método Pinch, que será explicado a posteriori.

5.3 - Integración energética: Método PINCH

Como se mencionó anteriormente, la integración energética permite optimizar el uso de los recursos energéticos destinados al intercambio de calor en la planta. Se basa en el intercambio de calor entre las propias corrientes del proceso, las que deben ser calentadas (*corrientes frías*) y otras enfriadas (*corrientes calientes*); y, de esta forma, se minimiza el uso de fluidos auxiliares, los cuales representan un mayor costo energético.

Para una exitosa integración energética, se deben considerar los siguientes puntos:

- Las corrientes a ser enfriadas deben estar a mayor temperatura que las corrientes a ser calentadas.
- La diferencia de temperatura entre ambas corrientes debe ser lo suficientemente alta como para permitir una alta tasa de intercambio de calor.
- Se debe considerar el calor que puede entregar/remover cada corriente. En caso de no ser suficiente para lograr la temperatura deseada, la diferencia debe ser suministrada por una corriente auxiliar.

Para facilitar la integración se utiliza el **Método PINCH**. Éste presenta una metodología a seguir para el análisis sistemático de los procesos químicos, permitiendo el cálculo de los requerimientos mínimos de energía externa y la mínima cantidad de intercambiadores necesarios; posteriormente, la red de intercambio de calor propiamente dicha deberá ser diseñada y optimizada mediante la comparación con los requerimientos mínimos.

Los pasos a seguir se detallan a continuación:

- Identificación de las corrientes de proceso que serán tenidas en cuenta para la integración energética;
- Descripción de las condiciones de operación de cada una de ellas;
- Clasificación de las corrientes seleccionadas en “frías” y “calientes”;
- Elección del valor de la mínima diferencia de temperaturas entre las corrientes que intercambiarán energía entre sí;
- Armado de la curva compuesta combinada.

5.3.1 - Definición de corrientes calientes y frías de proceso

Se denomina *corrientes calientes* y *corrientes frías* a aquellas que deben ser enfriadas y calentadas, respectivamente. En la figura del Anexo C se observa el diagrama de proceso junto con la denominación para cada corriente.

A continuación, en la *Tabla 5.1* se detallan las corrientes frías y calientes correspondientes a la planta, junto a su cambio de temperatura y entalpía.

Tabla 5.1. Corrientes consideradas para integración energética.

CORRIENTE (SEGÚN DIAGRAMA DE PLANTA)	CORRIENTE	Temperatura de Entrada [°C]	Temperatura de Salida [°C]	ΔT (°C)	ΔH (kW)	CP (kW/°C)
CORRIENTES FRÍAS						
1.2	F1	78,05	78,12	0,07	923,6	13.194,0
1.4	F2	91,1	285,0	193,9	424,5	2,2
T-303 (R)	F3	75,8	76,6	0,8	726,4	919,5
T-304(R)	F4	77,8	77,9	0,2	476,4	2802,6
T-305(R)	F5	182,9	187,2	4,3	125,2	29,1
CORRIENTES CALIENTES						
2.2	C1	280,3	-20,0	-300,3	-1496,7	5,0
3.8	C2	20,4	8,0	-12,4	-7,9	0,64
3.15	C3	187,2	20,0	-167,2	-18,0	0,11
3.20	C4	77,9	-20,0	-97,9	-114,2	1,2
T-303(C)	C5	20,8	20,4	-0,4	-408,8	1021,9
T-304(C)	C6	69,7	66,8	-2,9	-515,9	176,7
T-305(C)	C7	161,4	159,8	-1,6	-69,9	43,7

Algunas aclaraciones:

→ Nomenclatura:

(R) indica que la corriente pertenece al reboiler de la torre de destilación correspondiente

(C) indica que la corriente pertenece al condensador de la torre de destilación correspondiente

→ La corriente 1.2 (F1) resulta de la mezcla de la alimentación de etanol fresco (99,9 %) con el reciclo de etanol (99 %), proveniente de la subplanta de separación. La alimentación ingresa a la planta en las mismas condiciones que abandona la planta de producción de bioetanol, es decir, a 1 atm de presión y en estado de líquido saturado. De la misma forma, la corriente recirculada de la subplanta de separación también ingresa como líquido saturado a la misma presión. Luego de mezclarse, ingresan directamente a un vaporizador.

→ Respecto al acondicionamiento de productos:

Hidrógeno (corriente 3.4): sale a $-18,2\text{ }^{\circ}\text{C}$ por el tope del absorbedor. Dado que luego ingresará a la subplanta de licuación, es conveniente que permanezca a esta temperatura, por lo que no se la considera para el análisis energético.

Acetaldehído (corriente 3.8 - C2 -): sale como líquido saturado del condensador de su respectiva torre de destilación. Debido a su bajo punto de ebullición ($20\text{ }^{\circ}\text{C}$) y su alto grado de inflamabilidad, es necesario acondicionarlo para su posterior almacenamiento. Para un almacenamiento seguro del producto se decide enfriar esta corriente hasta $8\text{ }^{\circ}\text{C}$, según bibliografía consultada⁴². Es necesario que el depósito donde se almacene se encuentre refrigerado a esta temperatura, puesto que la temperatura ambiente en la localidad, en promedio durante el año, es mayor a la temperatura de ebullición del compuesto.

Acetato de etilo (corriente 3.15 - C3 -): también abandona el proceso en estado de líquido saturado, pero lo hace a la presión de operación de su respectiva torre de destilación, 15 bares. Para su acondicionamiento no sólo es necesario reducir su temperatura, sino también despresurizar. Se encontró⁴³ que la temperatura de almacenamiento óptima para este compuesto es de $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ aproximadamente, a presión atmosférica. La secuencia de pasos seleccionada es, primero enfriar, y luego despresurizar. Esto se debe a que en las condiciones que abandona la torre, como líquido saturado, no podría ingresar a una válvula reductora de presión, ya que a la salida se tendría una mezcla líquido-vapor, que afectaría su funcionamiento.

5.3.2 - Elección de la mínima diferencia de temperaturas (ΔT_{\min})

En un intercambiador de calor, una corriente caliente no puede ser enfriada por debajo de la temperatura de entrada de la corriente fría como tampoco una corriente fría puede calentarse por arriba de la temperatura de entrada de la corriente caliente. En todo momento, debe existir una diferencia de temperatura entre ambas corrientes a fin de promover la transferencia de calor. En función de dicha diferencia de temperatura, la tasa de intercambio de calor será mayor o menor.

La ΔT_{\min} se define como la fuerza impulsora mínima necesaria en un intercambiador de calor. Según la bibliografía consultada⁴⁴, se sugiere que el valor adecuado de ΔT_{\min} debe ser de $10\text{-}20\text{ }^{\circ}\text{C}$ para industrias de procesos químicos. Durante el desarrollo del informe se utilizan valores de ΔT_{\min} que se correspondan con el rango mencionado. Es posible utilizar valores inferiores, sin embargo, implica intercambiadores y caudales más grandes.

⁴² Ref. N° 1

⁴³ Ref. N° 2

⁴⁴ Ref. N° 3

5.3.3 - Construcción de la curva compuesta

Las gráficas de temperatura-entalpía se conocen como curvas compuestas y se usan para establecer objetivos energéticos. Las curvas compuestas son perfiles de temperatura (T) y entalpía (H) que muestran la disponibilidad de calor (curva compuesta caliente) y la demanda de éste en el proceso (curva compuesta fría), juntos en una representación gráfica (Figura 5.1). Cada curva está conformada por diferentes segmentos de pendiente $m \cdot C_p$ (producto de la masa por la capacidad específica) que corresponden a cada una de las corrientes consideradas para el análisis. Este producto se obtiene con el cociente entre la diferencia de entalpía y la diferencia de temperatura de cada corriente. Es necesario aclarar en este punto que, dado que se decidió integrar a las corrientes de las torres de destilación, el valor de $m \cdot C_p$ calculado se calcula de la misma manera. Esto no es correcto desde el punto de vista teórico, ya que estas corrientes intercambian calor latente, y en el caso ideal lo hacen a temperatura constante. Sin embargo, dado que tienen un cierto cambio en su temperatura, se decide calcular un $m \cdot C_p$ "ficticio", que considere a estas corrientes como si intercambiaran calor sensible.

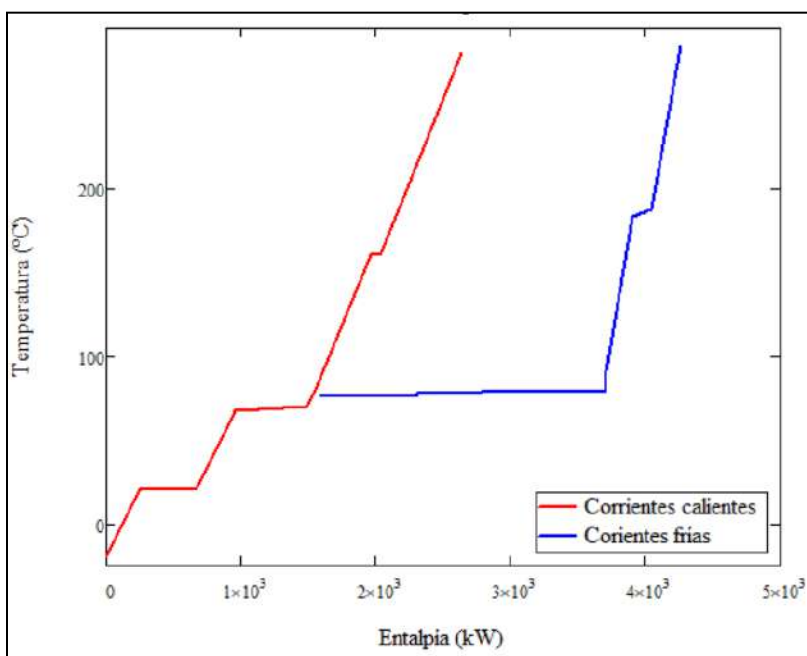


Figura 5.1 - Curva compuesta obtenida para el análisis Pinch.

Para la construcción de las curvas compuestas se utilizó el software *Hint*⁴⁵, el cuál, además, proporciona una sugerencia para la integración energética. En base a ello, el programa entrega un resultado respecto al mínimo número de intercambiadores de calor necesarios y a los requerimientos energéticos, tanto para calentar como para enfriar aquellas corrientes que no se pueden integrar. Para obtener esta curva compuesta se fijó un valor de $\Delta T = 10 \text{ }^\circ\text{C}$.

⁴⁵ Ref. N° 4

Una vez finalizada la integración propuesta en este capítulo, se compararon estos requerimientos energéticos obtenidos con los que informa el software y se extrajeron conclusiones.

5.3.4 - Red de intercambiadores de calor

5.3.4.1 - Introducción

Los equipos de intercambio de calor pueden ser clasificados de diversas formas; entre las más comunes se encuentran:

- Clasificación de acuerdo al tipo de contacto:
 - de contacto directo
 - de contacto indirecto
- Clasificación de acuerdo a los mecanismos de Transferencia de Calor:
 - Convección en una sola fase, forzada o libre;
 - convección con cambio de fase, forzada o libre (ebullición o condensación);
 - Combinación de convección y radiación
- Clasificación de acuerdo a la disposición de fluidos:
 - En intercambiadores de calor de paso único:
 - Flujo en paralelo
 - Flujo cruzado
 - Flujo en contracorriente
 - Intercambiadores de calor de pasos múltiples
- Clasificación de acuerdo al tipo de construcción:
 - Doble tubo
 - Tubos y coraza
 - Placas empacadas (PHE)

El diseño de estos equipos es una tarea compleja que requiere del conocimiento de diferentes factores y del análisis y determinación de una gran cantidad de variables. Algunos de los factores a tener en cuenta son la cantidad de calor a intercambiar, fluidos participantes, caudales de fluidos, etc.

En este trabajo no se abordará el diseño detallado de los equipos de intercambio de calor pero sí se detallarán las variables operativas de cada uno de ellos y se determinará el tipo de intercambiador más favorable. Para ésta elección se utilizarán los criterios presentados en la *Tabla 5.2*.

Tabla 5.2 - Comparación entre intercambiadores de calor.

	DOBLE TUBO	TUBOS Y CORAZA	PHE	
Aplicaciones	Especialmente diseñado para calentamiento o enfriamiento de productos con baja-media viscosidad. Para fluidos con partículas en suspensión. No hay riesgo de atasco.	Como rehedidores, condensadores o intercambiadores, tanto de líquidos como vapores	Intercambio de calor entre líquidos cuyas temperaturas son similares. Muy utilizado en la industria alimenticia.	
Observaciones	Son menos propensos a las fugas de gases que los de tubo y coraza (incluso a altas P). Útiles cuando el calor a intercambiar es menor o igual a 250 kW. Útiles cuando las corrientes tienen una gran diferencia de presión entre ellas.	En procesos sin cambio de fase pueden manejar hasta 3.500 kW	*Permiten altos coeficientes de intercambio de calor *Aptos para trabajar con fluidos viscosos *Generalmente no admiten vapores	
Aspectos a comparar	Costos básicos	Bajos	Altos	Bajos
	Mantenimiento	Fácil limpieza al poder desmontar los tubos bridados	Fácil limpieza química por la coraza y aceptable o pobre por los tubos; es casi imposible la limpieza mecánica.	Fácil acceso para inspección, limpieza química y manual y para reemplazo de partes.
	Limitaciones de espacio y peso	No requieren de gran espacio debido a que se pueden instalar como tuberías en paralelo.	Requieren un espacio considerable para su instalación y un amplio espacio para mantenimiento	Bajo peso y ocupan poco espacio.
	ΔT_{min} entre fluidos	Hasta 5°C	Hasta 5°C	Hasta 1°C
			con empacaduras	sin empacaduras
T máxima de operación (°C)	Depende del material de construcción	-200 a 700	-40 a 180	-200 a 980
Presión máx de operación (kPa)	Depende del material de construcción	35.000	3.000	35.000
Sup. de intercambio de calor (m²)	10 a 20	5 a 1.000	1 a 1.200	hasta 10.000

5.3.4.2 - Diseño

Una vez obtenidos los valores estimados de requerimientos mínimos (de enfriamiento y calentamiento) y del mínimo número de intercambiadores, se puede diseñar la red de intercambiadores. Este diseño se lleva a cabo utilizando el “Método de diseño pinch”. La aplicación de este método permite el diseño de una red que cumple con los objetivos energéticos dentro de límites prácticos. El método incorpora dos partes fundamentales:

1. Reconoce la región del Pinch (*Figura 5.1*) como la parte con más restricciones y, por lo tanto, comienza el diseño desde este punto, moviéndose hacia fuera.
2. Permite escoger entre varias opciones de acoplamiento entre corrientes.

El diseño de la red estudia qué corriente caliente puede acoplarse con alguna corriente fría mediante la recuperación de calor. Cada acoplamiento lleva una corriente a una temperatura de salida.

Como el punto Pinch divide el sistema de intercambio de calor en dos regiones térmicamente independientes, se debe de diseñar una red para la izquierda del punto Pinch y luego otra a la derecha. Cuando la recuperación de energía se ha maximizado, las necesidades térmicas que quedan se deben satisfacer con servicios auxiliares.

Existe una regla heurística que ayuda a determinar los acoplamientos posibles en el punto Pinch:

$$\text{A la izquierda del Pinch: } m_c C p_c \leq m_f C p_f$$

$$\text{A la derecha del Pinch: } m_c C p_c \geq m_f C p_f$$

La representación gráfica de las corrientes y de los acoplamientos se la conoce como *Diagrama de Red* (*Figura 5.2*). En él, las corrientes calientes y las frías se representan con líneas horizontales y las temperaturas de entrada y de salida se indican en sus extremos. La línea vertical que divide al diagrama en dos muestra la temperatura del punto Pinch frío y la del caliente. Por su parte, los círculos representan los intercambiadores, donde aquellos que no se muestran interconectados son los intercambiadores que usan servicios auxiliares fríos o calientes.

Teniendo en cuenta los criterios de selección de acoplamientos posibles de las corrientes, a ambos lados del punto Pinch, se analizan las distintas alternativas posibles para el diseño de los intercambiadores. En la *Figura 5.2* se observan las diferentes alternativas existentes para la integración energética, basándose en el cumplimiento de las reglas heurísticas mencionadas anteriormente. Puede observarse que a temperaturas inferiores que el punto Pinch no existen corrientes frías, por lo que, en esa región, se hace imposible el intercambio de calor entre dos corrientes del proceso. En cambio, a temperaturas superiores que la del punto Pinch existen diferentes alternativas de intercambio de calor individual entre dos corrientes de proceso que pueden o no combinarse entre sí. Esto último depende del calor remanente de las corrientes luego de un primer intercambio de calor.

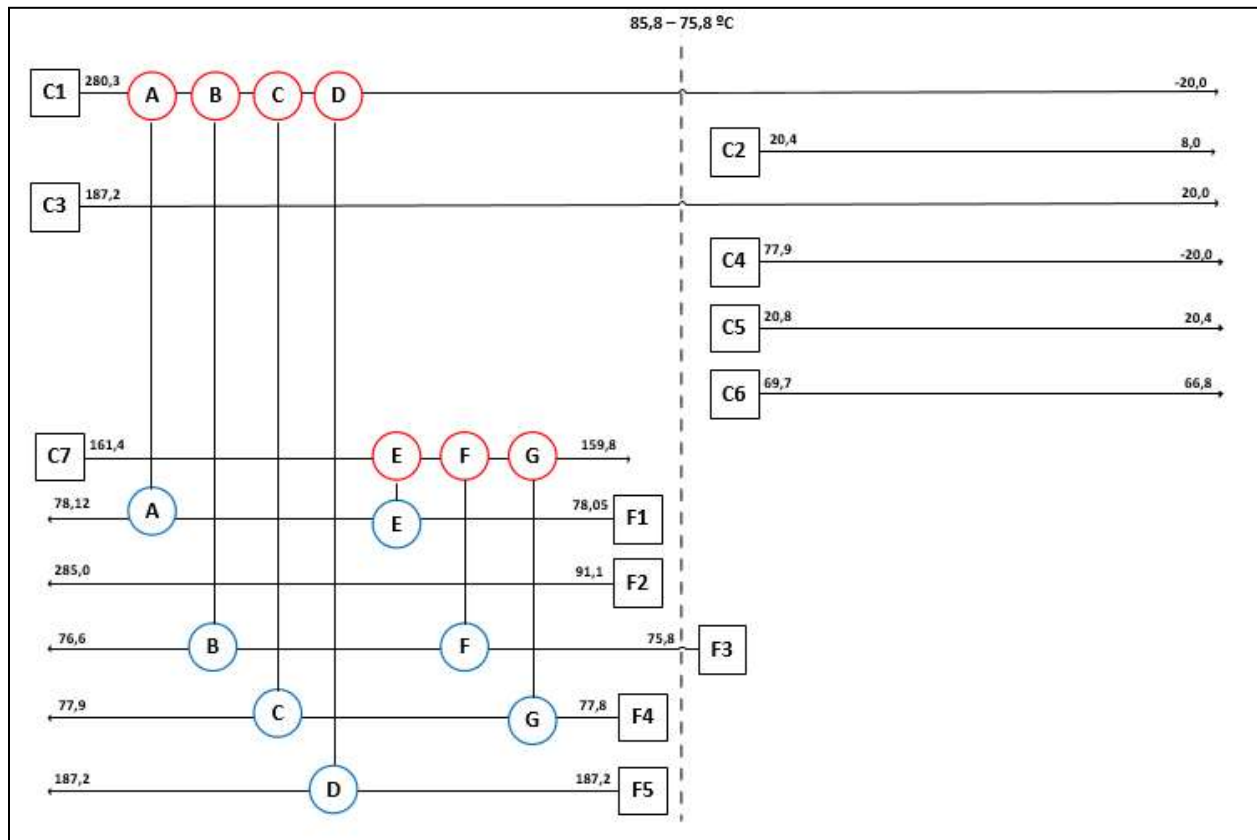


Figura 5.2 - Diagrama de Red con las diferentes alternativas para la integración energética.

Para elegir la alternativa más conveniente entre las mencionadas se tuvieron en cuenta los siguientes criterios, recordando que el objetivo es maximizar la integración energética:

- Es deseable que ambas corrientes seleccionadas alcancen sus respectivas temperaturas finales, las cuales fueron previamente fijadas. En caso de no ser posible se prioriza que al menos una de ellas pueda alcanzar su temperatura final. Si se tratara de corrientes que pasen por equipos de intercambio de calor ubicados en las torres de destilación (condensadores/rehervidores), es condición necesaria que se cumpla este último criterio.
- Se desea aprovechar en la mayor medida posible el calor que una corriente pueda entregar/remove. En caso de haber más de una alternativa que cumpla el requisito anterior, se prioriza aquella que permita el mejor aprovechamiento. Para ello, se obtuvo la diferencia de calor remanente luego de que ambas corrientes se acoplen.

5.3.4.3 - Análisis de alternativas

A continuación se evalúan brevemente cada una de las alternativas posibles. El esquema de cálculo que se siguió es el siguiente:

Paso 1: Se calculó el calor requerido para enfriar la corriente caliente en su rango de temperaturas como $\Delta H_c = m_c \cdot Cp_c \cdot \Delta T_c$

Paso 2: Análogamente, se calculó el calor requerido para calentar la corriente fría como $\Delta H_f = m_f \cdot Cp_f \cdot \Delta T_f$

Paso 3: Se calculó la diferencia de calor remanente como $\Delta H_{rem} = \Delta H_c + \Delta H_f$

Un signo negativo en la diferencia de calor remanente indica que la corriente caliente aún puede entregar calor, mientras que la corriente fría alcanzó su temperatura final, y viceversa cuando el signo es positivo.

La primera alternativa consiste en juntar las corrientes C1 y F1. Los resultados obtenidos se presentan en la *Tabla 5.3*.

Tabla 5.3 - Diferencias de entalpías para la Alternativa A.

Alternativa A (C1 - F1)	
ΔH_c (kW)*	- 969,2
ΔH_f (kW)	923,6
ΔH_{rem} (kW)	- 45,6

**Aclaración: Dado que la corriente C1 atraviesa el punto Pinch para ser enfriada completamente, se toma como rango de temperaturas para la integración energética desde su temperatura de entrada, 285 °C, hasta la temperatura del punto Pinch caliente, 85,8 °C. Esto implica que no es posible enfriarla por completo y siempre se requerirá más de un intercambiador.*

De los resultados expuestos en la *Tabla 5.3* se desprende que la corriente F1 se calienta por completo. En principio, se decide continuar con esta alternativa para el análisis.

Tabla 5.4 - Diferencias de entalpías para la Alternativa B.

Alternativa B (C1 - F3)	
ΔH_c (kW)	- 969,2
ΔH_f (kW)	726,4
ΔH_{rem} (kW)	- 242,8

Esta alternativa también permite que la corriente fría (F3) se caliente por completo y, por lo tanto, se decide conservarla para el análisis.

Se propone una nueva alternativa (*Tabla 5.5*) en la que se integran las corrientes C1 y F4.

Tabla 5.5 - Diferencias de entalpías para la Alternativa C.

Alternativa C (C1 - F4)	
ΔH_c (kW)	- 969, 2
ΔH_f (kW)	476, 4
ΔH_{rem} (kW)	- 492, 8

De la *Tabla 5.5* se extrae que la corriente F4 se calienta por completo pero el calor remanente es muy elevado. Esto no permite que la corriente C1 continúe entregando calor a otra corriente fría (por encima del punto pinch) para aumentar la integración energética. Por lo tanto, **se descarta esta alternativa.**

Tabla 5.6 - Diferencias de entalpías para la Alternativa D.

Alternativa D (C1 - F5)	
ΔH_c (kW)	- 969, 2
ΔH_f (kW)	125, 1
ΔH_{rem} (kW)	- 844, 1

Para esta alternativa, se obtiene (*Tabla 5.6*) que la corriente F5 se calienta completamente, pero el calor remanente es muy elevado. Por lo tanto, **se descarta esta alternativa.**

Se plantea otra posibilidad (*Tabla 5.7*) en la que se integren las corrientes C7 y F1.

Tabla 5.7 - Diferencias de entalpías para la Alternativa E.

Alternativa E (C7 - F1)	
ΔH_c (kW)	- 70, 0
ΔH_f (kW)	923, 6
ΔH_{rem} (kW)	853, 6

Observando los resultados de la *Tabla 5.7*, si bien la corriente caliente se enfría por completo, la corriente fría se calienta en una pequeña proporción. Es conveniente que logre calentarse en un solo equipo, por lo tanto **se descarta esta alternativa.**

Se propone otra alternativa (*Tabla 5.8*), en la que se junte la corriente C7 con la corriente F3.

Tabla 5.8 - Diferencias de entalpías para la Alternativa F.

Alternativa F (C7 - F3)	
ΔH_c (kW)	- 70, 0
ΔH_f (kW)	726, 4
ΔH_{rem} (kW)	656, 6

Si bien la corriente C7 logra enfriarse completamente, la corriente F3 sólo resulta parcialmente calentada. Esta última es una corriente que pasa por un reboiler de una torre de destilación y por ello, también **se descarta la alternativa**.

Tabla 5.9 - Diferencias de entalpías para la Alternativa G.

Alternativa G (C7 - F4)	
ΔH_c (kW)	- 70,0
ΔH_f (kW)	476,4
ΔH_{rem} (kW)	406,6

Análogamente al caso anterior, **se descarta esta alternativa** por la imposibilidad de calentar a la corriente F4 en un único equipo.

Habiendo descartado las alternativas que no cumplen los criterios antes mencionados, sólo quedan disponibles dos opciones para la integración energética: alternativas A y B. Dado que ambas opciones contienen la misma corriente caliente, C1, sólo se puede elegir una de ellas. Para seleccionar la más conveniente, el criterio elegido fue el de maximizar la integración energética. Con este fin, se calculó la temperatura final que tiene la corriente C1 luego del intercambio para ambas opciones. A continuación se resumen los resultados obtenidos en la **Tabla 5.10** :

Tabla 5.10 - Diferencias de entalpías para la Alternativa G.

	Alternativa A	Alternativa B
ΔH_{rem} (kW)	- 45,6	- 242,8
$T_{salida,C1}$ (°C)	94,9	134,5

La alternativa A permite un mejor aprovechamiento de la integración energética, haciendo que el calor que cede la corriente C1 sea mayor y, por ende, su temperatura final sea menor.

Por lo tanto, **se elige la Alternativa A** como la más conveniente para integrar energéticamente.

Paso 4: Una vez seleccionada la combinación de corrientes de proceso para la integración, se calcula el área de intercambio necesaria.

Dado que este equipo tiene la finalidad de evaporar a la corriente F1, se trata de un evaporador o vaporizador. Para obtener el área se utilizó la ecuación de diseño de intercambiadores de calor:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ML} \quad \text{Ecuación 5.1}$$

Siendo:

Q : Calor a intercambiar (kW)

U : Coeficiente global de transferencia de calor ($W/m^2°C$)

A : Área de intercambio de calor (m^2)

ΔT_{ML} : Diferencia de temperatura media logarítmica entre la entrada y la salida del equipo (°C)

Como se mencionó anteriormente, el calor necesario para evaporar la corriente F1 es igual al calor que debe proporcionar la corriente C1, que resulta en el calor a intercambiar en el evaporador (Q).

Respecto al coeficiente global U , se tomaron de bibliografía⁴⁶ distintos rangos para los coeficientes locales de transferencia de calor estimados para las corrientes involucradas.

Corriente C1: Principalmente contiene etanol, acetaldehído y acetato de etilo.

Corriente F1: Principalmente etanol.

Ambas corrientes se encuentran dentro de la categoría de solventes orgánicos. A continuación se presentan los rangos seleccionados y el cálculo del coeficiente global:

→ Intercambio de calor sin cambio de fase (calor sensible): $h_{sen} = 500 - 1500 \text{ W/m}^2\text{°C}$

→ Intercambio de calor con cambio de fase (calor latente): $h_{lat} = 350 - 2000 \text{ W/m}^2\text{°C}$

Tomando el valor medio de cada intervalo para las corrientes, se calcula el coeficiente global U mediante la *Ecuación 5.2*.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{\frac{1}{h_{sen}} + \frac{1}{h_{lat}}} \quad \text{Ecuación 5.2}$$

Por su parte, para la diferencia de temperatura media logarítmica se consideró que la disposición de flujo en el equipo se da en contracorriente. A continuación se muestra un esquema de las corrientes de entrada y salida del equipo.



Entonces, la ΔT_{ML} se calcula como sigue:

$$\Delta T_{ML} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} \quad \text{Ecuación 5.3}$$

Donde:

$$\Delta T_1 = T_{C1, entrada} - T_{F1, salida}$$

$$\Delta T_2 = T_{C1, salida} - T_{F1, entrada}$$

⁴⁶ Ref. N° 5

Una vez realizados los cálculos correspondientes, se resumen los parámetros determinados en la *Tabla 5.11*, exponiendo inclusive el área de intercambio necesaria para el evaporador.

Tabla 5.11 - Parámetros de diseño para el intercambiador correspondiente a la Alternativa A.

Intercambiador N° 1 [Alternativa A]	
Calor a intercambiar (kW)	923,6
Coefficiente U (W/m ² .°C)	540,2
Área de intercambio (m ²)	22,9
ΔT_{mL}	74,7

Este equipo, dado que se trata de un vaporizador, se trata de un intercambiador de tubos y coraza. La configuración más común para un vaporizador es la tipo Kettle. En la *Figura 5.3* se muestra un esquema típico de este equipo. La diferencia principal con el intercambiador de tubos y coraza convencional es la carcasa. Esta tiene un volumen mayor, que permite contener a los vapores generados en equilibrio con el líquido, a medida que se van formando.

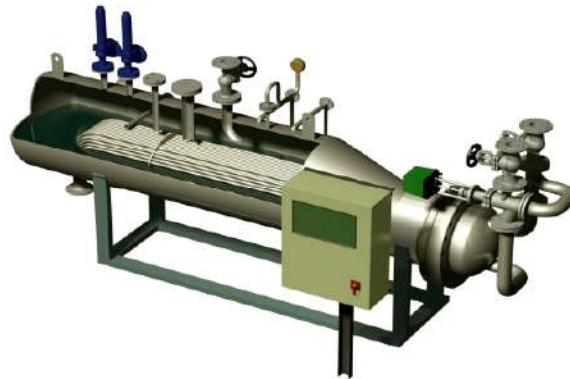


Figura 5.3 - Esquema de un intercambiador de calor de tipo Kettle.

Paso 5: Una vez finalizada la integración energética, es necesario calcular los requerimientos energéticos necesarios para acondicionar a las demás corrientes de la planta por medio de servicios auxiliares. En la *Figura 5.4*, se muestra el Diagrama de Red de la planta con la integración energética determinada y los intercambiadores de calor auxiliares.

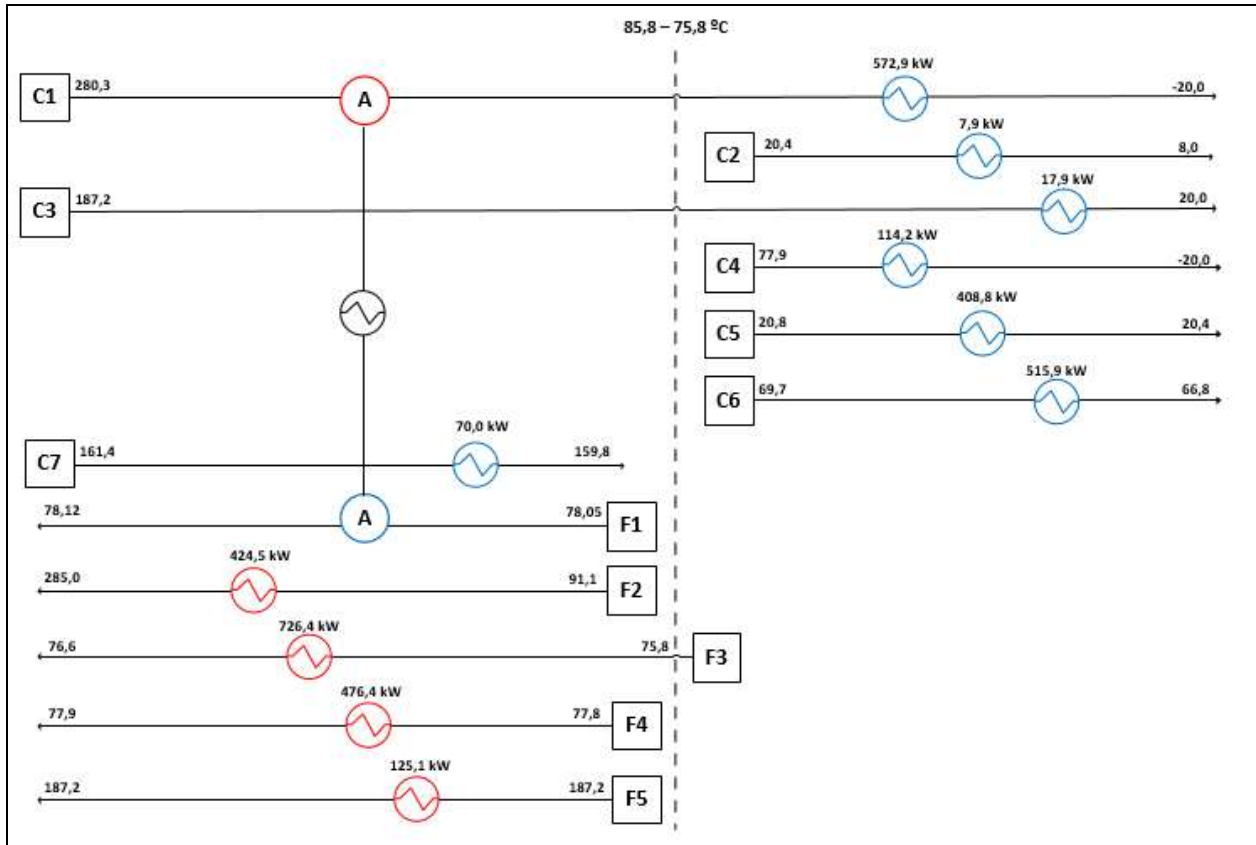


Figura 5.4 - Diagrama de red con la integración energética e intercambiadores de calor auxiliares.

5.4 - Intercambio de calor con servicios auxiliares

Para el cálculo de los requerimientos energéticos de calefacción/enfriamiento auxiliares se tomaron todas las corrientes que no formaron parte de la integración y se calculó su cambio de entalpía en función de las temperaturas de entrada y salida correspondientes. En la *Tabla 5.12*, se resumen los valores obtenidos en contraste con los informados por el software utilizado.

Tabla 5.12 - Requerimientos energéticos auxiliares.

	Calculados	Software
ΔH_{enf} (kW)	1703,0	1581,2
ΔH_{cal} (kW)	1752,3	1625,9

Como puede observarse, tanto los requerimientos energéticos calculados para enfriar como para calentar por medio de servicios auxiliares son mayores que los informados por el software. Esto se debe a que el mismo propone alternativas que maximizan la integración energética, sin tener en cuenta los criterios analizados y desarrollados en este informe. Es decir, las alternativas propuestas involucran corrientes que no se enfrían o calientan en su totalidad.

Sin embargo, las diferencias obtenidas para ambos casos no son significativas (aproximadamente 100 kW), por lo que se concluye que la decisión tomada es acertada.

De esta manera, se continúa con el análisis para definir los servicios auxiliares requeridos.

5.4.1 - Corrientes Frías

En la *Tabla 5.13* se detallan las corrientes a calentar por medio de fluidos auxiliares junto con sus condiciones de proceso.

Tabla 5.13 - Resumen de corrientes a calentar por fluidos auxiliares.

Corriente	Temperatura entrada (°C)	Temperatura salida (°C)	ΔH (kW)
F2	91,1	285	424,5
F3	75,8	76,6	726,4
F4	77,8	77,9	476,4
F5	182,9	187,2	125,1

5.4.1.1 - Elección del fluido calefactor

Para calefaccionar estas corrientes, lo primero que debe analizarse es la posibilidad de utilizar vapor de agua para llevarlo a cabo, debido a que es el fluido auxiliar más económico y de alto rendimiento. La temperatura máxima a alcanzar es de 285 °C, por lo que se debería contar con vapor de agua a una temperatura, al menos, 10 °C por encima. A esta temperatura, la presión del vapor de agua es de 8 Mpa (aproximadamente 80 atm) la cual es una presión muy alta. En este sentido, no se justifica colocar una caldera de alta presión para el proceso debido a su alto costo de operación, sumado a los aspectos de seguridad que involucran los equipos sometidos a altas presiones. Por lo general, este tipo de calderas se emplean en centrales térmicas donde sí se justifica el uso de vapor en estas condiciones. Sin embargo, observando la *Tabla 5.12*, se puede notar que las corrientes F3 y F4 se encuentran por debajo de los 100 °C en todo su rango, por lo que se justifica la implementación de vapor de agua como fluido auxiliar para estas corrientes.

Se debe seleccionar para el vapor de agua una presión de operación que asegure una temperatura de saturación mayor a la de las corrientes que se deben calentar. Esto no es un problema, debido a que a la presión atmosférica esta temperatura es de 100 °C. Lo primero que el lector podría considerar es que, a mayor temperatura de saturación, mayor será la fuerza impulsora para la transferencia de calor, y por lo tanto habrá una mejor eficiencia en el proceso. No obstante, esto no es aplicable a este fluido. Es cierto que altas presiones de vapor implican temperaturas más altas, pero por el contrario, tienen una energía latente más baja. Las tablas termodinámicas de vapor muestran que a medida que se aumenta la presión del vapor, la energía o calor latente disminuye y aumenta la energía o calor sensible. Lo que se quiere aprovechar en este tipo de equipos es, justamente, la energía latente asociada a la vaporización. Por lo tanto, se debe seleccionar la presión y temperatura de vapor efectiva más baja que permita un adecuado rendimiento operativo. Por este motivo, se selecciona una **presión de operación de 1 bar**, para tener el calor latente más alto posible. En la *Sección 5.5*, se profundizan cuestiones referidas al diseño y selección de la caldera de vapor requerida.

En lo que respecta a las corrientes F2 y F5, se opta por calefaccionarlas mediante el uso de un fluido térmico. Se seleccionó el mismo que se utilizó para calefaccionar al reactor en el *Capítulo 3*, de manera de poder unificar sus corrientes y utilizar una única caldera de fluido térmico. En la sección 5.5 - "*Equipos auxiliares*" se detalla su selección. Este fluido es el cuyo rango de temperatura recomendado va de -35 °C a 330 °C, lo que permite ajustarse adecuadamente en el rango requerido en el proceso. La *Tabla 5.14* contiene sus características principales.

Tabla 5.14 - Características del fluido térmico Dowtherm Q.

Dowtherm Q	
Tipo	<i>Sintético orgánico</i>
Uso recomendado	<i>Calentamiento</i>
Rango de temperaturas de uso [°C]	-35 - 330
Temperatura de congelación [°C]	-35
Temperatura máxima de funcionamiento [°C]	330

En la operación con el Dowtherm Q se utilizará una caldera específica para fluido térmico. Las cuestiones referidas a su selección se tratan con mayor detenimiento y nivel de detalle en la Sección 5.5. Se desea que el fluido salga de la caldera a una temperatura previamente fijada y que luego se divida e ingrese a los respectivos intercambiadores, para finalmente mezclarse e ingresar nuevamente a la caldera cerrando el ciclo; para esto se fijó una diferencia de temperaturas en la caldera entre la entrada y la salida.

Como se mencionó, la temperatura más alta que debe alcanzarse es de 285 °C, por lo que el fluido térmico debe estar, al menos, 10 °C por encima para asegurar un buen intercambio de calor en el equipo. Considerando que todos los equipos tendrán una disposición de flujo en contracorriente, la salida de esta corriente de proceso (285 °C) está en contacto con la corriente de entrada del fluido térmico, por lo que su temperatura mínima es 295 °C. Siguiendo el mismo razonamiento, la salida del fluido térmico estará en contacto con la entrada de las corrientes de proceso por lo que, según lo visto en la Tabla 5.12, su temperatura mínima será de 192,9 °C.

Respecto a la máxima temperatura de salida de la caldera, no hay limitaciones excepto las del propio fluido térmico. Para asegurar una buena fuerza impulsora se decide trabajar a la temperatura máxima que admite el Dowtherm Q, con un margen de seguridad de 5 °C por cuestiones de seguridad: a 325 °C.

Entonces, para seleccionar la diferencia de temperaturas que debe proporcionar la caldera se propusieron arbitrariamente dos alternativas: un $\Delta T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$ (de 325 a 305 °C) y otro de $\Delta T = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$ (de 325 a 285°C). Con estos valores se calculó el caudal de fluido térmico necesario para cada intercambiador (uno por cada corriente a calentar), así como también el área total de los equipos. Estos valores se obtuvieron utilizando las siguientes ecuaciones:

$$1) \Delta H_c = \Delta H_{FT} = m_{FT} \cdot Cp_{FT} \cdot \Delta T_{FT}$$

$$2) A = \frac{\Delta H_{FT}}{U \cdot \Delta T_{ML}}$$

Respecto al valor de U , se lo estimó a partir de los coeficientes locales sugeridos en bibliografía⁵ para fluidos térmicos y para solventes orgánicos.

Para fluidos térmicos: $h_{FT} = 60 - 700 \text{ W/m}^2\text{°C}$

Luego, podría obtenerse el coeficiente global con la suma de resistencias (*Ecuación 5.2*). Pero se debe tener presente que pueden presentarse dos situaciones, sabiendo que hay corrientes que presentan un cambio de fase y otras que sólo intercambian calor sensible. Esto implicaría que se debe contar con un valor de U específico para cada equipo, según sea la corriente que esté involucrada. Sin embargo, esto no es necesario por dos motivos: por un lado, el valor del coeficiente local para el fluido térmico es significativamente menor al de los solventes orgánicos, con o sin cambio de fase, por lo que la resistencia a la transferencia de calor está principalmente del lado del fluido; por otro lado, dado que se trata de una estimación, no es necesario contar con un valor muy detallado de este coeficiente, ya que el objetivo es tener un estimado del área total del equipo. Por lo tanto, se toma un valor promedio:

$$U = 275 \text{ W/m}^2\text{°C}$$

Para los equipos que utilizan vapor de agua como fluido auxiliar, se procedió de manera análoga, pero con las siguientes ecuaciones:

$$3) \Delta H_c = \Delta H_{vapor} = m_{vapor} \cdot \lambda_{vap}$$

$$4) A = \frac{\Delta H_{vapor}}{U \cdot \Delta T_{ML}}$$

Donde λ_{vap} es el calor latente de vaporización a la temperatura de operación, $\lambda_{vap} = 2250 \text{ kJ/kg}$.

El coeficiente U para el vapor de agua se obtuvo a partir del rango sugerido por bibliografía⁴⁷ para intercambiadores con vapor de agua y solventes orgánicos.

$$U_{vap} = 600 - 1200 \text{ W/m}^2\text{°C}$$

A continuación, en la *Tabla 5.15*, se resumen los resultados obtenidos para dos las alternativas propuestas para los intercambiadores que utilizan fluido térmico:

Tabla 5.15 - Resultados obtenidos para las alternativas propuestas.

	$\Delta T = 20\text{°C}$	$\Delta T = 40\text{°C}$
Caudal de fluido térmico (kg/h)	$5,104 \cdot 10^4$	$2,581 \cdot 10^4$
Área total (m²)	23.1	24,8
Q_{caldera} (kW)	721,5	721,5

⁴⁷ Ref. Nº 5

Como se puede observar, para el salto de 40 °C se obtiene aproximadamente la mitad del caudal de fluido térmico necesario respecto al salto de 20 °C, a costa de un leve aumento en el área total de los intercambiadores. Por otro lado, los requerimientos energéticos en la caldera son los mismos. Dado que el costo de bombeo del fluido repercute con mayor peso sobre los costos de operación, **se decide fijar el ΔT en 40 °C**, ya que se minimiza su caudal.

Por su parte, no se presta mayor importancia al aumento de área que se obtiene para esta alternativa debido a que entra dentro de los costos fijos, que luego se amortizan con el resto de los costos de la planta. Esto se explicará con mayor detalle en el *Capítulo 7*.

5.4.1.2 -Red de intercambiadores

Para la alternativa seleccionada, se muestran a continuación los parámetros de diseño de los intercambiadores requeridos y un esquema representativo de cada uno de ellos. Además, se presentan los intercambiadores que utilizan vapor de agua como fluido auxiliar:

Intercambiador N° 2	
Calor a intercambiar [kW]	726,4
Caudal de vapor [kg/h]	$1,16 \cdot 10^3$
Área de intercambio [m ²]	33,9
ΔT_{mL} [°C]	23,8



Intercambiador N° 3	
Calor a intercambiar (kW)	476,4
Caudal de vapor (kg/h)	760,6
Área de intercambio (m ²)	23,9
ΔT_{mL} (°C)	22,2



Intercambiador N° 4	
Calor a intercambiar (kW)	424,5
Caudal de fluido térmico (kg/h)	$1,52 \cdot 10^4$
Área de intercambio (m ²)	15,8
ΔT_{mL} (°C)	97,5



Este equipo tiene involucrada una corriente con una fracción de vapor en todo su recorrido, por lo tanto no puede tratarse de un intercambiador de placas. Debido a que el calor a intercambiar es significativa, no es conveniente utilizar un intercambiador de doble tubo. El equipo más adecuado es uno de tipo tubos y coraza.

Intercambiador N° 5	
Calor a intercambiar (kW)	125,1
Caudal de fluido térmico (kg/h)	$4,48 \cdot 10^3$
Área de intercambio (m ²)	3,8
ΔT_{mL} (°C)	119,1



Respecto a los intercambiadores N° 2, 3 y 5, la configuración más adecuada es la de tipo tubos y coraza. Todas estos equipos son los reboilers de las respectivas torres de destilación de cada corriente. En particular, se debe contar con intercambiadores de tipo Kettle.

5.4.2 - Corrientes Calientes

A continuación, en la *Tabla 5.16*, se presenta un resumen con las corrientes a enfriar por medio de fluidos auxiliares.

Tabla 5.16 - Resumen de corrientes a enfriar por fluidos auxiliares.

Corriente	Temperatura entrada [°C]	Temperatura salida [°C]	ΔH [kW]
C1	94,9	-20,0	572,9
C2	20,4	8,0	7,9
C3	187,2	20,0	17,9
C4	77,9	-20,0	114,2
C5	20,8	20,4	408,8
C6	69,7	66,8	515,9
C7	161,4	159,8	70,0

Como puede notarse, la mínima temperatura a alcanzar en el proceso es de $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$. Por este motivo, es necesario implementar un circuito de refrigeración, cuyo fluido refrigerante alcance dicha temperatura. En la *Figura 5.5* se muestra un diagrama tecnológico de un circuito de refrigeración simple.

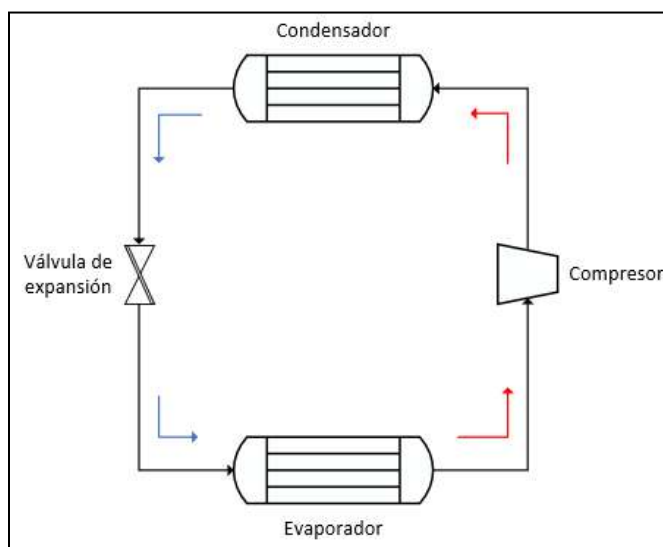


Figura 5.5 - Circuito de refrigeración simple.

El refrigerante atraviesa las distintas etapas respetando un cierto orden. En primer lugar, ingresa como gas al compresor, en el cuál aumenta su presión y su temperatura debido al trabajo que se le ejerce. En segundo lugar, ingresa a un condensador donde sufre un cambio de estado a presión constante y sale como líquido saturado. Luego, ingresa a una válvula de expansión cuyo objetivo es disminuir su presión y, en consecuencia, su temperatura. En último lugar, el fluido frío ingresa en un evaporador donde intercambia calor con el espacio o corriente que se desea refrigerar. Así, sale del mismo como vapor saturado, para finalmente ingresar en el compresor cerrando el ciclo.

Si bien el circuito de la *Figura 5.5* no es exactamente el que se eligió para refrigerar a las corrientes, las partes fundamentales que lo componen son las mismas, por lo que se lo toma como referencia para explicar el principio de funcionamiento y la toma de decisiones involucrada. En la sección 5.5 -“*Equipos auxiliares*” se tratará con mayor profundidad el diseño de este ciclo de refrigeración y su funcionamiento.

El sistema propuesto para enfriar a las corrientes calientes parte del mismo circuito presentado, pero con la siguiente modificación: el refrigerante se divide luego de pasar por la válvula de expansión e ingresa a cada uno de los intercambiadores necesarios; de esta manera, estos intercambiadores actúan como evaporadores. Luego todas las corrientes de refrigerante evaporado se juntan nuevamente e ingresan al ciclo de refrigeración. En la *Figura 5.6* se esquematiza esta variación.

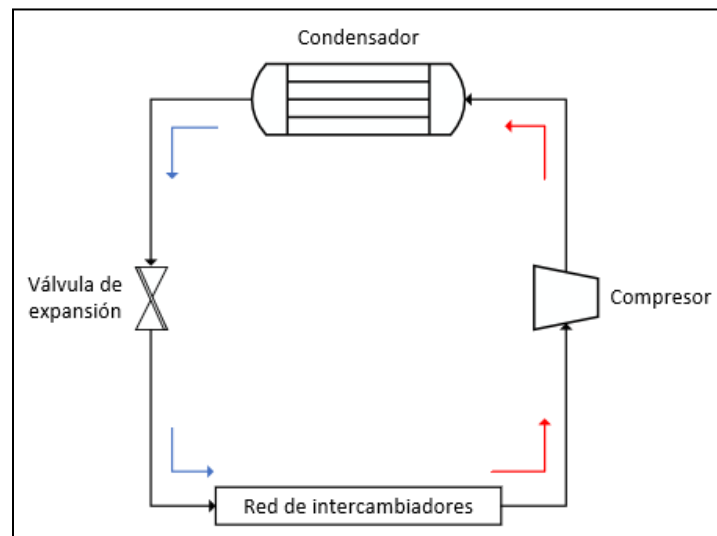


Figura 5.6 - Circuito de refrigeración propuesto.

5.4.2.1 - Elección del refrigerante

El refrigerante a utilizar debe reunir una serie de características deseables pero no excluyentes:

- Poseer una elevada entalpía de vaporización.
- Estar disponible comercialmente y a bajo costo.
- Ser químicamente estable.
- No ser tóxico, corrosivo, inflamable y/o contaminante.

Entre los refrigerantes industriales más utilizados están el R-717, R-134a, R-744, R-290 entre otros.

Antes de continuar, es importante explicar por qué no se optó por implementar directamente el mismo fluido térmico que se utilizó en la sección anterior para las corrientes frías, sabiendo que su rango de operación llega hasta $-35\text{ }^{\circ}\text{C}$. Si bien permitiría un buen intercambio de calor con las corrientes calientes, a continuación se puntúan los motivos por los cuales no resultaba conveniente esta opción:

- El fluido térmico tiene un calor específico significativamente menor al de los refrigerantes industriales, por lo que la velocidad de transferencia de calor es menor. Esto implicaría la necesidad de utilizar más caudal de fluido térmico en comparación con el fluido refrigerante, para la misma operación. Dicha situación repercute directamente sobre los costos de bombeo debido a que se trata de un aceite de elevado peso molecular.
- Por otro lado, para que el fluido térmico pueda alcanzar la temperatura requerida ($-25\text{ }^{\circ}\text{C}$), se necesita, a su vez, de otro fluido que se encuentre a una temperatura menor para que pueda intercambiar calor. Es decir, es necesario un sistema auxiliar de enfriamiento para este fluido. Sumado a los costos de bombeo, se le sumaría también el costo de compresión para el fluido refrigerante auxiliar. Esto no resulta conveniente desde el punto de vista de la eficiencia del proceso y los costos de operación.

Por estos motivos, se decidió diseñar el sistema de refrigeración propuesto.

El equipo de refrigeración debe cumplir una serie de requerimientos para su aplicación en la planta:

- Debe ser capaz de enfriar una corriente hasta $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$, que es la mínima temperatura de las corrientes de proceso. El refrigerante debe alcanzar al menos $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$, a fin de garantizar una mínima fuerza impulsora de $5\text{ }^{\circ}\text{C}$.
- En la etapa de compresión no se debe superar los $160\text{ }^{\circ}\text{C}$ de sobrecalentamiento del vapor. Temperaturas mayores conllevan fallas en el compresor.
- La presión en el evaporador debe ser superior a la atmosférica, esto para evitar filtraciones de aire al sistema. Por lo que el refrigerante elegido tiene que poder garantizar la temperatura deseada en el evaporador a una presión mayor a 1 atm .

Se ha optado por utilizar al amoníaco, también conocido como refrigerante R-717. Los motivos de su aplicación se listan a continuación:

- Tiene excelentes propiedades térmicas. Los sistemas con amoníaco tienen un coeficiente de rendimiento (COP) superior a la mayoría.
- Comparativamente es de los refrigerantes más baratos y con mayor disponibilidad.
- Tiene coeficientes de transferencia de calor relativamente altos, lo cual implica intercambiadores de calor y flujos de refrigerante más pequeños.
- A presión atmosférica la temperatura de evaporación es de $-35\text{ }^{\circ}\text{C}$, por lo que a la temperatura de trabajo no presenta inconvenientes de filtración de aire.
- No destruye la capa de ozono ni contribuye al calentamiento global.

Como desventajas, es un fluido inflamable y explosivo bajo ciertas condiciones. Es tóxico pero fácilmente detectable por su olor.

Respecto a la presión y temperatura del condensador, es necesario que el amoníaco se ponga en contacto con otro fluido que esté a menor temperatura para que efectivamente ocurra la condensación. Debido a que no hay otra corriente en la planta que se encuentre a una temperatura lo suficientemente baja para que ocurra este proceso, se optó por utilizar agua de refrigeración. Luego de absorber el calor del refrigerante, esta corriente de agua pasará por una torre de enfriamiento y, luego, volverá al condensador cerrando el ciclo.

Las condiciones climáticas en la localidad donde se desea instalar la planta condicionan a que la temperatura mínima de salida de la torre, para el agua fría, sea de $30\text{ }^{\circ}\text{C}$. Seleccionando como la mejor alternativa una diferencia entre la entrada y la salida del agua en la torre de $30\text{ }^{\circ}\text{C}$, se tiene que la mayor temperatura que se puede alcanzar en el proceso es $60\text{ }^{\circ}\text{C}$. Las cuestiones referidas al diseño y selección de la torre de enfriamiento serán tratadas con mayor detenimiento en la *Sección 5.5*.

5.4.2.2 - Red de intercambiadores

Como se mencionó, la red de intercambiadores para las corrientes calientes consiste en una serie de evaporadores por los cuales circula el refrigerante elegido. Sin embargo, como se incorporó el agua de enfriamiento como fluido auxiliar, surge la necesidad de evaluar la posibilidad de utilizarla también como fluido frío. En este sentido, la primera limitación que se presenta es el intervalo de temperaturas que admite el agua: estableciendo un criterio del ΔT_{\min} de $10\text{ }^{\circ}\text{C}$ en cada intercambiador, con disposición en contracorriente, sólo puede intercambiar calor aquellas corrientes cuya temperatura de salida se encuentre como máximo a $40\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($10\text{ }^{\circ}\text{C}$ por encima de la temperatura de entrada del agua).

Esto se resume en las siguientes posibilidades:

- Enfriar la corriente C1 desde 94,9 °C hasta 40 °C con agua de enfriamiento y luego con refrigerante hasta -20 °C;
- Enfriar la corriente C3, desde 187,2 °C hasta 40 °C con agua y luego con refrigerante hasta -20 °C;
- Enfriar la corriente C4 desde 77,9 °C hasta 40 °C con agua y luego con refrigerante hasta -20 °C;
- Enfriar a la corriente C6 completamente, de 69,7 °C a 66,8 °C con agua;
- Enfriar a la corriente C7 completamente, de 161,4 °C a 159,8 °C con agua.

Entonces, por conveniencia, podría continuarse con la alternativa propuesta para la corriente C1, en la que se realiza un enfriamiento en dos etapas, y la de las corrientes C6 y C7 en una sola. En el caso de las corrientes C3 y C4, el rango de temperaturas y calor que liberan con el agua implica equipos de intercambio de calor muy pequeños y no llevaría a una mejora sustancial al proceso.

Por lo tanto, las alternativas finales a presentar y comparar son las siguientes:

Alternativa A: utilizar el R-717 como fluido de enfriamiento para todas las corrientes calientes del proceso.

Alternativa B: utilizar agua de enfriamiento para enfriar parcialmente a la corriente C1 y completamente a las corrientes C6 y C7. Para todas las demás corrientes se utiliza R-717.

En este momento resta por determinar el área de los intercambiadores necesaria, con el fin de comparar ambas alternativas. Para ello es necesario definir los coeficientes de transferencia empleados y las expresiones que permiten obtener los caudales máscicos puestos en juego.

→ *Coefficientes globales de transferencia de calor:*

Agua como fluido auxiliar: $h_{agua} = 1000 - 11000 \text{ W/m}^2\text{°C}$

R-717 (en evaporación) como fluido auxiliar⁴⁸: $h_{Ref,evap} = 1000 - 2000 \text{ W/m}^2\text{°C}$

Se tomó para cada fluido refrigerante el valor medio de h y luego para cada intercambiador se calculó el correspondiente coeficiente global U mediante la suma de resistencias (*Ecuación 5.2*). Se debe tener en cuenta, para dicho cálculo, que se presentan dos casos nuevamente: aquellas corrientes que intercambian calor sensible y las que intercambian calor latente. Para todas estas corrientes, los coeficientes locales de transferencia de calor ya fueron especificados anteriormente, dado que son del tipo solventes orgánicos.

→ *Cálculo del caudal máscico de refrigerante:*

$$\Delta H_f = \Delta H_{NH3} = m_{NH3} \cdot \lambda_{NH3}$$

⁴⁸ Ref. N° 5

Debido a que el refrigerante está evaporándose, el intercambio de calor se da por calor latente y, por lo tanto, se utilizó el calor de vaporización a la temperatura de operación (-25 °C).

A continuación, en la *Tabla 5.17*, se resumen los resultados obtenidos de ambas alternativas propuestas con el fin de evaluar cuál es la más conveniente.

Tabla 5.17 - Resumen de alternativas propuestas.

	Alternativa A	Alternativa B
Caudal de refrigerante [kg/h]	$4,57 \cdot 10^3$	$2,23 \cdot 10^3$
Caudal de agua de enfriamiento [kg/h]	$2,92 \cdot 10^5$	$1,68 \cdot 10^5$
Área total intercambiadores [m²]	27,4	43,6
Número de intercambiadores	8	9
Potencia consumida en compresión [kW]*	479,8	233,8
Área del condensador [m²]*	131,7	64,2

*Los cálculos tanto de potencia de compresión como de área del condensador se presentan en el apartado correspondiente al ciclo de refrigeración en la *Sección 5.5*.

Como se observa en la *Tabla 5.17*, la Alternativa B presenta varias ventajas por sobre la primera. En primer lugar, cómo se utiliza agua de enfriamiento en algunos intercambiadores, el caudal de refrigerante a utilizar es menor, aproximadamente la mitad. Esto repercute directamente sobre la potencia consumida en la etapa de compresión, que es uno de los factores más importantes a la hora de diseñar un ciclo de refrigeración, debido a sus elevados costos operativos. Respecto al agua de enfriamiento a utilizar, también se observa que se requiere la mitad, aproximadamente, respecto a la primera alternativa. En cuanto al área total de los intercambiadores, la Alternativa A presenta las menores áreas y se debe principalmente a la mayor fuerza impulsora para la transferencia de calor que aporta el amoníaco frente al agua. Sin embargo, como el caudal del amoníaco es mayor para esta alternativa, el área del condensador del ciclo de refrigeración es mayor que para la Alternativa B.

Una vez expuestos los resultados y conclusiones para ambas alternativas **se decide continuar con la Alternativa B.**

A continuación se resumen los parámetros de diseño de los intercambiadores requeridos:

Intercambiador N° 6	
Calor a intercambiar [kW]	273,8
Caudal de agua [kg/h]	$7,86 \cdot 10^3$
Área de intercambio [m ²]	13,9
ΔT_{mL} [°C]	19,9
Coeficiente global U [W/m ² °C]	989,1



Intercambiador N° 7	
Calor a intercambiar [kW]	515,9
Caudal de agua [kg/h]	$1,48 \cdot 10^4$
Área de intercambio [m ²]	18,2
ΔT_{mL} [°C]	20,3
Coeficiente global U [W/m ² °C]	1398



Intercambiador N° 8	
Calor a intercambiar [kW]	69,9
Caudal de agua [kg/h]	$2,0 \cdot 10^3$
Área de intercambio [m ²]	0,43
ΔT_{mL} [°C]	115,0
Coeficiente global U [W/m ² °C]	1398



Intercambiador N° 9	
Calor a intercambiar [kW]	299,0
Caudal de amoníaco [kg/h]	799,2
Área de intercambio [m ²]	11,8
ΔT_{mL} [°C]	38,23
Coefficiente global U [W/m ² °C]	658,9



Intercambiador N° 10	
Calor a intercambiar [kW]	7,9
Caudal de amoníaco [kg/h]	21,2
Área de intercambio [m ²]	0,17
ΔT_{mL} [°C]	69,9
Coefficiente global U [W/m ² °C]	658,9



Intercambiador N° 11	
Calor a intercambiar [kW]	17,9
Caudal de amoníaco [kg/h]	46,8
Área de intercambio [m ²]	0,2
ΔT_{mL} [°C]	107,8
Coefficiente global U [W/m ² °C]	658,9



Intercambiador N° 12	
Calor a intercambiar [kW]	114,2
Caudal de amoníaco [kg/h]	306
Área de intercambio [m ²]	1,7
ΔT_{mL} [°C]	32,4
Coeficiente global U [W/m ² °C]	658,9



Intercambiador N° 13	
Calor a intercambiar [kW]	408,8
Caudal de amoníaco [kg/h]	$1,09 \cdot 10^3$
Área de intercambio [m ²]	13,6
ΔT_{mL} [°C]	45,8
Coeficiente global U [W/m ² °C]	658,9



Respecto al tipo de intercambiador posible para cada configuración propuesta, se tomaron los siguientes criterios:

- Todos los equipos que utilizan amoníaco son evaporadores, ya que el refrigerante se evapora en cada uno de ellos. Esto implica que en todos los casos se tiene una corriente como vapor, y por lo tanto no pueden utilizarse intercambiadores de placas. Esto reduce la selección a los de tipo tubos y coraza y los de tipo doble tubo.
- Para los condensadores de las torres de destilación (Intercambiadores N° 7, 8 y 13), se seleccionó un intercambiador de tubos y coraza.
- Para las corrientes de acondicionamiento de productos (Intercambiadores N°10 y 11) se seleccionó un intercambiador de doble tubo. Esto se tomó en base a los bajos valores de calor a intercambiar y área del equipo.
- Para los equipos restantes, se seleccionó un intercambiador de tipo tubos y coraza.

5.5 - Equipos auxiliares

5.5.1 - Calderas

Para calefaccionar a las corrientes frías se utilizaron dos fluidos auxiliares, vapor de agua y un fluido refrigerante. Dichos fluidos deben ser, a su vez, calefaccionados por una caldera apropiada.

Una caldera consiste en un equipo de intercambio de calor por donde circula un fluido, el cual recibe energía en forma de calor. Esta energía surge de la combustión de diferentes fuentes de energía, como pueden ser los combustibles fósiles, la biomasa, entre otros. Están compuestas por uno o más serpentines por los que circula el fluido y entre los que se hacen pasar los gases de la combustión. En la *Figura 5.7* se muestra una caldera convencional.



Figura 5.7 - Esquema de una caldera convencional.

5.5.1.1 - Caldera de vapor de agua

Entre las calderas comúnmente utilizadas en el sector industrial se encuentran las pirotubulares y las acuotubulares. La diferencia entre estos tipos de calderas está en la manera en que los tubos internos entran en contacto con los gases de combustión y el agua.

En las **pirotubulares**, el agua en estado líquido se encuentra en la carcasa, rodeando los tubos. Los gases de combustión se mueven por dentro de los tubos internos del recipiente, de esta manera el calor es transferido al agua almacenada. Estas calderas se caracterizan por el número de pasos que los gases de combustión recorren el largo del recipiente mientras transfieren calor al agua.

En calderas **acuotubulares**, en cambio, el agua fluye dentro de los tubos, mientras los gases de combustión lo hacen por dentro de la carcasa, por el lado exterior de los tubos. Ya que los tubos típicamente resisten presiones más altas que la carcasa, este tipo de caldera se utiliza en aplicaciones que requieran altas presiones. Aplicaciones típicas son la generación eléctrica o industrias como refinerías y destilerías.

Generalmente las calderas pirotubulares se usan hasta presiones de 25-30 bar y temperaturas máximas de 300 °C con la incorporación de sobrecalentadores de vapor. Mientras que las calderas acuotubulares son más adecuadas en usos para presiones y temperaturas mayores, y también para producciones de vapor a partir de 50 Ton/h.

Debido a que se seleccionó una presión de trabajo de 1 bar, es conveniente utilizar una **caldera de tipo pirotubular**, ya que son las adecuadas para presiones bajas.

Para seleccionar una caldera es necesario contar con el caudal de vapor necesario y el calor total a entregar. A continuación, en la *Tabla 5.18*, se resumen estos parámetros.

Tabla 5.18 - Parámetros operativos para la caldera de vapor de agua.

Caudal de vapor [kg/h]	1902,6
Calor a entregar [kW]	1202,4

Se seleccionó una caldera del catálogo⁴⁹ de la marca Distral™. Se resumen sus condiciones de diseño en la *Tabla 5.19*.

Tabla 5.19 - Caldera seleccionada.

Capacidad térmica [kW]	1471,6
Producción de vapor [kg/h]	2347,3
Volumen de agua [L]	3890
Consumo combustible [m³/h]	167,3
Disposición	<i>Horizontal</i>

⁴⁹ Ref. N° 6

5.5.1.2 - Caldera de fluido térmico

Estas calderas, en comparación con las de vapor de agua, tienen la ventaja de trabajar a altas temperaturas en fase líquida, manteniendo bajas presiones de trabajo. Esto las hace más convenientes desde el punto de vista de la seguridad del proceso.

Además del circuito para la red de intercambiadores, como se trató en el *Capítulo 3*, es necesaria la implementación de otro circuito de fluido térmico que se usa para calefaccionar al reactor. Se eligió, convenientemente, el mismo fluido para poder unificar sus caudales, de manera de adquirir una única caldera para ambos procesos.

En la *Tabla 5.20* se expresan los parámetros de interés, correspondientes a ambos circuitos.

Tabla 5.20 - Parámetros operativos para la caldera de fluido térmico.

	Reactor	Red de intercambiadores	Total caldera
Caudal de fluido térmico [m³/h]	45,6	34,4	80,0
Temperatura máxima de trabajo [°C]	325	325	325
Calor a entregar [kW]	877,9	721,5	1599,4

Se seleccionó una caldera⁵⁰ de la marca ATTSUTM, cuyas características se resumen en la *Tabla 5.21*.

Tabla 5.21 - Caldera de FT seleccionada.

Modelo	FT-1500
Potencia térmica útil [kW]	1,745 · 10 ³
Temperatura de diseño [°C]	350
Consumo combustible [Nm³/h]	187

⁵⁰ Ref. N° 7

5.5.2 - Bombas

Una bomba es un tipo de máquina hidráulica que permite el movimiento de un fluido incompresible mediante su aceleración.

Existen distintos tipos de bombas, pero el fundamento de operación es similar para todas: la variación de la presión del fluido entre la brida de aspiración e impulsión. En primer lugar, el fluido experimenta un brusco descenso de su presión en la entrada, a continuación, se le aporta energía en el interior del equipo, lo que hace que la presión a la salida sea mayor.

Existen diversos tipos de bombas. Dos de las más utilizadas son las bombas centrífugas y las bombas de desplazamiento positivo.

La *bomba centrífuga* es la más común y utilizada para bombear líquidos en general. Está formada por dos elementos: el impulsor y la carcasa. Por un lado, el impulsor es el elemento encargado de aportar energía al fluido, el cual está compuesto por una serie de álabes que se utilizan para impulsarlo. Por otro lado, este conjunto se encuentra en el interior de la carcasa donde se produce el movimiento rotatorio, el aporte de energía y la variación de presiones. Básicamente, el fluido entra por el impulsor y este es acelerado debido al aporte de energía, dirigiéndose desde el centro a la periferia, dando también el mencionado aumento de presión. A continuación, el fluido sale al perímetro de la carcasa, donde se reduce su velocidad a causa del aumento de la sección. En la *Figura 5.8* se muestra un diagrama de una bomba centrífuga típica.

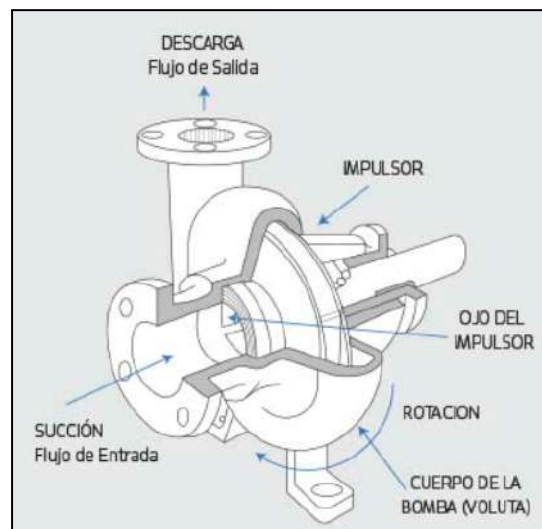


Figura 5.8 - Esquema de bomba centrífuga típica.

Las bombas centrífugas se aplican principalmente para el desplazamiento de líquidos de baja o media viscosidad, a presiones de trabajo moderadas y caudales altos. Algunas de las industrias en las que se aplican son las de tratamiento y potabilización de aguas, desalinización, química, alimentaria, farmacéutica, cosmética o minería, entre otras muchas.

Una bomba de *desplazamiento positivo* es aquel dispositivo que permite el desplazamiento de un líquido mediante la reducción de su volumen de forma alternativa o periódica. Esta reducción del volumen provoca un aumento de la presión en el fluido y, por lo tanto, un aumento de su energía y su movimiento.

Se pueden distinguir dos grupos. Por un lado, se encuentran las bombas rotativas, que son las que logran el movimiento del líquido mediante una acción de rotación. Además, se pueden encontrar múltiples configuraciones dentro de este tipo de turbomáquina: engranajes, lóbulos, tornillo, palas, peristálticas o multifase. Por otra parte, existen las bombas recíprocas o alternativas. Estas basan su funcionamiento en la variación de la presión dentro de una cámara mediante el movimiento de uno o varios émbolos o diafragmas, que llevan el líquido desde una cavidad de aspiración (acción de succión) a una de descarga (acción de compresión).

Las bombas de desplazamiento positivo son más apropiadas para tratar caudales de mayor viscosidad a caudales constantes, como pueden ser aguas residuales o hidrocarburos. Por ello se suelen aplicar en industrias como las de tratamiento de aguas residuales o la petroquímica.

El tipo de corrientes que se tienen en la planta se corresponden principalmente con solventes orgánicos poco viscosos, que no presentan sólidos en suspensión. Más adelante en esta sección, se detallan cuáles son las corrientes involucradas que se necesitan presurizar. Estas bombas se las considera bombas críticas, las cuales se eligen para el diseño. Se decide seleccionar entre los tipos de bombas mencionados una **bomba de tipo centrífuga** dada su conveniencia para el tipo de corrientes en el proceso, su simplicidad de operación y su amplia utilización en la industria.

Para la selección del modelo adecuado de bomba se recurre a las llamadas curvas características de la bomba, aportadas por el fabricante. Se necesitan tres curvas diferentes:

- Las de caudal y carga de la bomba, llamadas curvas Q-H o de altura desarrollada;
- Las de potencia del motor necesaria;
- Las de Carga Positiva Neta de Aspiración Requerida (NPSH_r)

La altura desarrollada o carga de la bomba se obtiene mediante la ecuación de Bernoulli entre los puntos de descarga y admisión de la bomba. Se llega a la siguiente ecuación:

$$H = \frac{\Delta p}{\rho \cdot g} + \Delta z + \widehat{E}_v \quad [\text{m.c.a}] \quad \text{Ecuación 5.4}$$

Donde el primer término a la izquierda de la igualdad representa la diferencia de presión que se tiene entre la descarga y la succión. El segundo término contempla la diferencia de altura entre estos dos puntos. El tercer término se refiere a las pérdidas de carga que se tienen por accesorios o tramos de cañería rectos.

Por otro lado, la carga neta de aspiración requerida se calcula en función de la NPSH disponible. Este valor se calcula como:

$$NPSH_{disp} = \frac{p_{admisión} - p_{vapor}}{\rho \cdot g} \text{ [m.c.a]} \quad \text{Ecuación 5.5}$$

Siendo p_{vapor} , la presión de vapor de la corriente.

Por un lado, la NPSH requerida es la presión mínima que se debe aportar al líquido en la brida de aspiración para que no se produzca el fenómeno de cavitación. Esta depende del diseño de la bomba y de la velocidad del rotor, y se puede ver influenciada por el flujo de líquido si este desciende demasiado. Por otro lado, la NPSH disponible es la presión que se da en el punto de funcionamiento de la bomba en las condiciones de trabajo una vez instalada. Esta depende de las características del fluido y de la ubicación de la bomba en la instalación. La NPSH disponible debe ser mayor que la requerida para que no se produzca cavitación. Para que una bomba funcione sin cavitación debe de cumplirse la relación siguiente, en la que se añade 0,5 metros por seguridad:

$$NPSH_{disp} \geq NPSH_{req} + 0,5m \text{ [m.c.a]}$$

Respecto a la potencia del motor necesaria, esta se obtiene de las curvas de la bomba, ingresando con la potencia útil (P_u) necesaria para impulsar al fluido. La potencia total consumida tiene en cuenta las pérdidas de carga y rendimientos de los elementos que intervienen en el motor. La potencia útil se calcula según:

$$P_u = \frac{\rho \cdot g \cdot H \cdot Q}{3600} \text{ [W]}$$

Las curvas características se construyen normalmente mediante pruebas realizadas con agua, por lo que sus datos se deben recalculan si se van a bombear líquidos con otras propiedades físicas. El modo de proceder, en el caso de las bombas centrífugas, para el empleo de estas curvas es el siguiente:

- 1) Conocer el fluido a bombear, la temperatura de bombeo y las propiedades físicas del fluido (densidad y viscosidad) a dicha temperatura.
- 2) Establecer el caudal volumétrico a desarrollar (m^3/h).
- 3) Conocer la carga de la bomba, o altura desarrollada, para lo que hay que determinar previamente las alturas totales de impulsión y aspiración.
- 4) Con la carga y el caudal que se precisan se acude a la curva Q-H y, fijando estas dos magnitudes, se determina el diámetro del rodete, que en caso de no resultar un valor exacto, se escoge el valor mayor más cercano.
- 5) Con el diámetro de rodete determinado y el caudal, en la curva de potencia se determina el consumo de la bomba. El valor leído en la curva se debe incrementar en un 15 % como margen de seguridad.
- 6) Finalmente, en la curva de NPSH_r, se determina este valor, para el caudal desarrollado.

5.5.2.1 - Bomba B1

En la *Figura 5.9* se muestra un esquema de una de las corrientes de proceso que necesita ser presurizada. Se trata de la corriente "3.10", que abandona la torre de destilación T-304 a 1 bar y debe ingresar a la siguiente, T-305 a 15 bares.

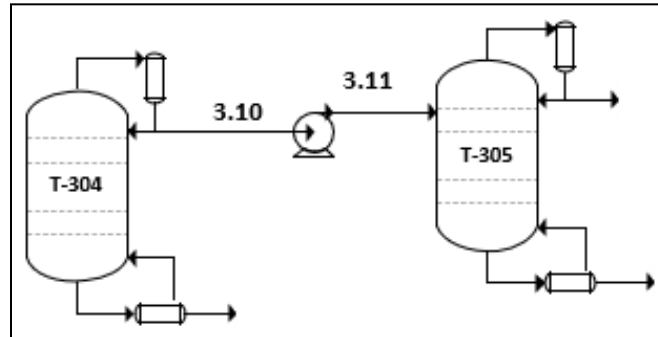


Figura 5.9 - Esquema de las corrientes de proceso

A continuación, en la *Tabla 5.22*, se muestran las características y requerimientos de esta corriente. Como criterio para el cálculo de la altura de diseño a partir de la *Ecuación 5.4* se consideró el aumento de presión requerida para alcanzar las condiciones de operación y se estimó la variación de altura y las pérdidas de carga como un 15 % adicional al valor anterior. Para el valor de densidad se tomó un promedio ponderado para las dos sustancias principales que la componen (etanol y acetato de etilo). Respecto al cálculo del $NPSH_{disp}$, se tomó una presión de vapor promedio para la corriente teniendo en cuenta su composición, a través de los parámetros de la ecuación de Antoine.

Tabla 5.22 - Condiciones operativas para la bomba B1.

Caudal [m³/h]	0,946
Temperatura de entrada [°C]	68,7
Presión entrada [bar]	1
Presión salida [bar]	15
Potencia requerida [kW]	0,42
Altura desarrollada [m.c.a]	197
$NPSH_{disp}$ [m.c.a]	3,3

En función de los parámetros definidos para la bomba necesaria para presurizar la corriente se seleccionó de catálogo⁵¹ una bomba de la marca Grundfos™. A continuación se muestran sus parámetros de diseño en la *Tabla 5.23*:

⁵¹ Ref. Nº 8

Tabla 5.23 - Bomba seleccionada.

Marca	Grundfos
Modelo	CRNE 1-25 PV-CA-A-V-HQQV
Presión máxima [bar]	25
Eficiencia estimada [%]	70
Potencia consumida [kW]	1,55
NPSH_{req}[mca]	0,96

En la *Figura 5.10* se muestran las curvas características de la bomba indicadas por el fabricante junto con el punto de operación requerido.

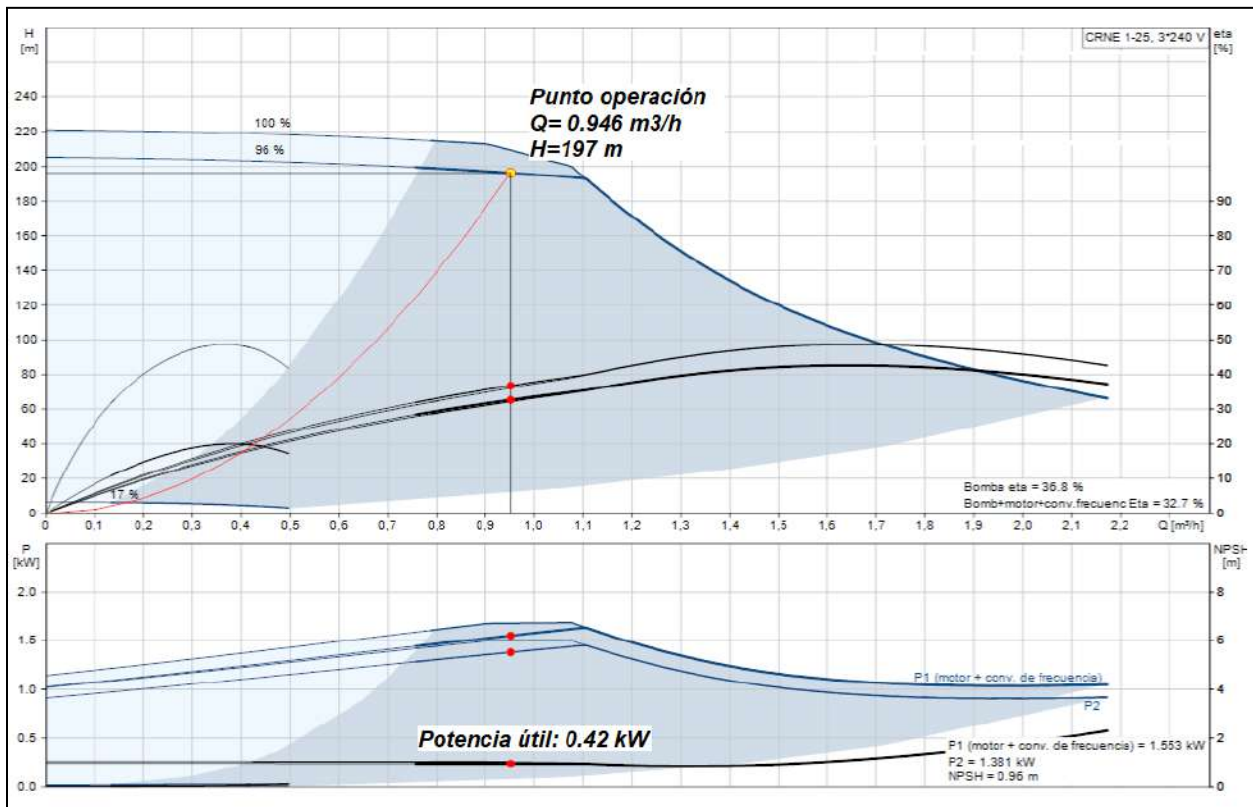


Figura 5.10 - Curvas características de la bomba B1.

Puede observarse que el punto de operación cae dentro de la región de trabajo de la bomba, por lo que es adecuada para su utilización en planta. Además, estas curvas indican el valor de $NPSH_{req}$ para el proceso, a continuación se verifica si se cumple el criterio mencionado en la *Ecuación 5.5*. Este criterio indica que el valor de $NPSH_{req}$ más un adicional de $0,5 \text{ mca}$ debe ser menor o igual al valor de $NPSH_{disp}$ para asegurar que la bomba no sufra cavitación. Este valor resulta de $NPSH_{req} + 0,5 \text{ m} = 1,46 \text{ m} < NPSH_{disp}=3,3 \text{ m}$. Por lo tanto, la bomba se encuentra en una zona de operación segura.

5.5.2.2 - Bomba B2

Otra corriente que necesita pasar por una bomba es “3.19”, que es la corriente de etanol purificada que se recircula a la torre de absorción. En este caso, la sobrepresión que se debe asegurar es pequeña (10 kPa aproximadamente). Sin embargo, como en esta etapa del diseño no se cuenta con información acerca de la ubicación de los equipos en la planta, no se puede conocer a qué distancia se encuentran las torres de destilación (T-304) y de absorción (T-302), por lo que no es posible conocer la longitud exacta de cañería necesaria entre ellas. Esto implica que no se pueden conocer con exactitud las pérdidas de carga que sufre el fluido debidas al transporte en los tramos de cañería. Además, como esta corriente entra por el tope de la torre, es necesario proporcionar una sobrepresión para elevar al fluido.

Los valores habituales de pérdida de carga suelen estar entre 39 y 80 kPa para la admisión y la descarga de la bomba⁵², respectivamente. Con fines prácticos, se dimensiona una bomba para lograr una sobrepresión de 100 kPa, de manera de contemplar estos efectos. Para la altura de diseño, se tomó un 20 % del valor de la sobrepresión. A continuación, en la *Tabla 5.24*, se resumen las condiciones operativas necesarias para la bomba. Para los cálculos se consideró a la corriente como si fuera etanol puro.

Tabla 5.24 - Condiciones operativas para la bomba B2.

Caudal [m³/h]	1,617
Temperatura de entrada [°C]	77,9
Presión entrada [bar]	1
Presión salida [bar]	2
Potencia requerida [kW]	0,059
Altura desarrollada [m.c.a]	17,0
NPSH_{disp} [m.c.a]	12,3

Nuevamente, se seleccionó de catálogo⁵³ una bomba de la marca Grundfos™. A continuación se muestran sus parámetros de diseño en la *Tabla 5.25*:

⁵² Ref. N° 9

⁵³ Ref. N° 8

Tabla 5.25 - Bomba seleccionada.

Marca	Grundfos
Modelo	CR 1-4 A-A-A-E-HQQE
Presión máxima [bar]	16
Altura máxima (m)	25,4
Eficiencia estimada [%]	79
Potencia consumida [kW]	0,248
NPSH _{req} [mca]	0,8

En la *Figura 5.11* se muestran las curvas características de la bomba seleccionada, junto con su punto de operación.

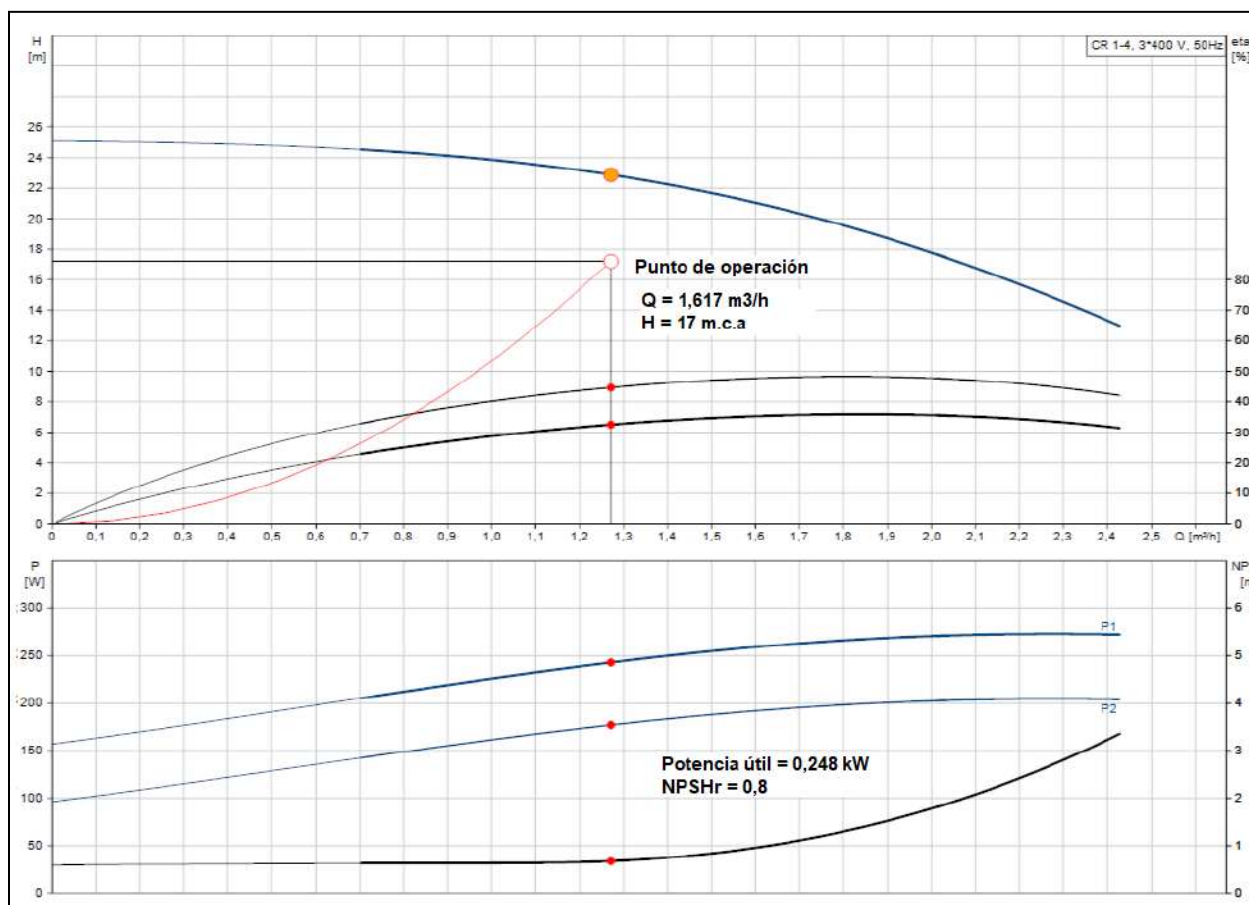


Figura 5.11 - Curvas características de la bomba.

Se puede verificar que el punto de operación se sitúa dentro de los límites de la bomba, y se cumple el criterio del NPSH.

5.5.2.3 - Bomba B3

Otra de las bombas críticas contempladas para el análisis es la de ingreso de agua a la torre de enfriamiento. Como se tratará en la Sección 5.5.6, la torre se diseñó para un caudal de agua de enfriamiento de $1,675 \cdot 10^5$ kg/h ($167,5$ m³/h). Análogamente al caso anterior, se desconoce la ubicación de los equipos y cañerías, por lo que no es posible determinar las caídas de presión asociadas al transporte. Para esta torre la corriente también ingresa por el tope. Opera a presión atmosférica, por lo que se considera, nuevamente, una sobrepresión de 1 bar para diseñar la bomba que impulsa el agua. Para la altura de diseño, se consideró un 20 % adicional.

En la *Tabla 5.26*, se resumen las condiciones operativas necesarias para la bomba.

Tabla 5.26 - Condiciones operativas para la bomba B3.

Caudal [m³/h]	167,5
Temperatura de entrada [°C]	60
Presión entrada [bar]	1
Presión salida [bar]	2
Potencia requerida [kW]	6,1
Altura desarrollada [m.c.a]	13,4
NPSH_{disp} [m.c.a]	10,3

Nuevamente, se seleccionó de catálogo⁵⁴ una bomba de la marca Grundfos™. A continuación se muestran sus parámetros de diseño en la *Tabla 5.27*:

Tabla 5.27 - Bomba seleccionada.

Marca	Grundfos
Modelo	CR 1-4 A-A-A-E-HQQE
Presión máxima [bar]	16
Altura máxima (m)	38,2
Eficiencia estimada [%]	91
Potencia consumida [kW]	15,2
NPSH_{req}[mca]	4,8

⁵⁴ Ref. N° 8

En la *Figura 5.12* se muestran las curvas características de la bomba seleccionada, junto con su punto de operación.

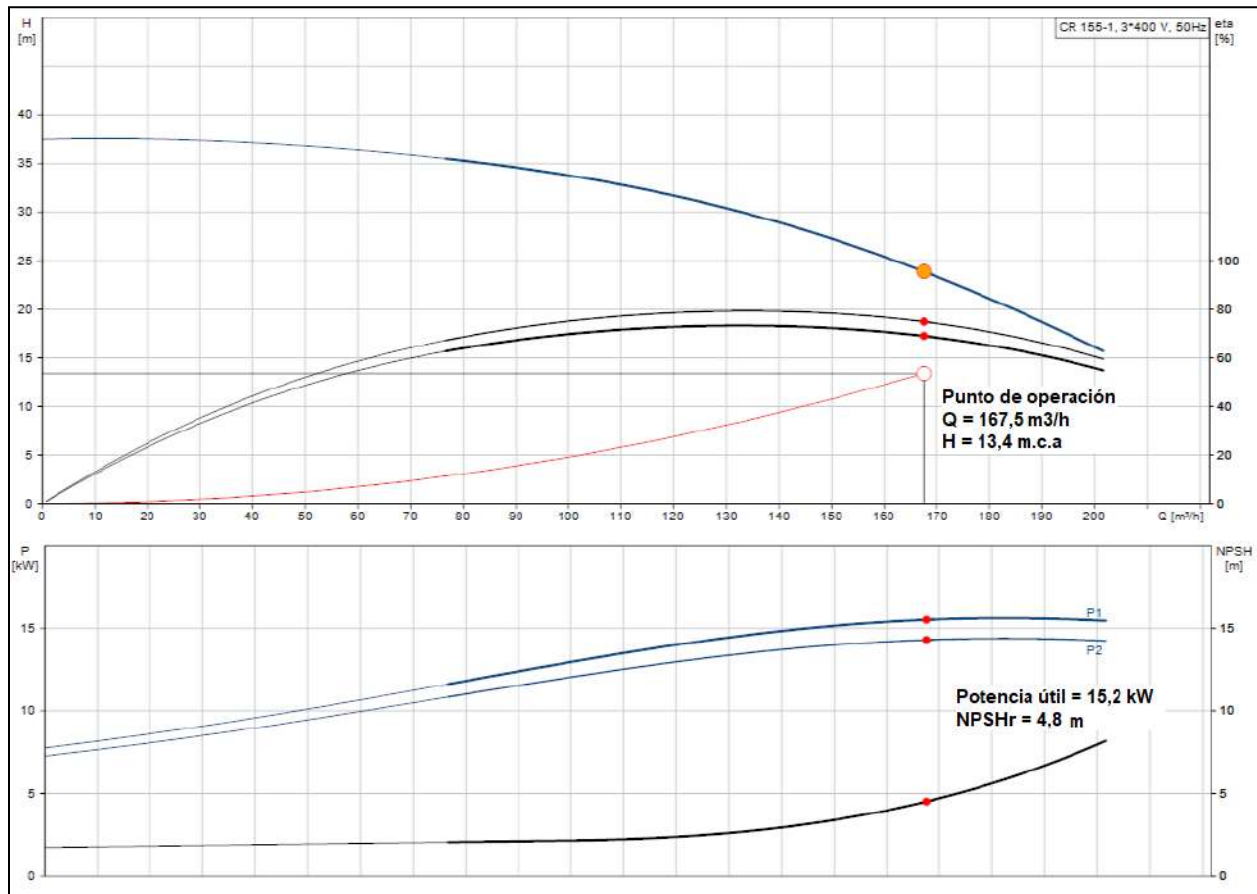


Figura 5.12 - Curvas características de la bomba.

Se verifica que el punto de operación se sitúa dentro de los límites de la bomba, y se cumple el criterio del NPSH.

5.5.2.4 - Bomba B4

Esta bomba se diseña para suministrar el caudal de fluido térmico necesario en los circuitos requeridos. Como se indicó en la *Sección 5.5.1* en esta misma sección, el caudal total necesario es de 80 m³/h. Con fines prácticos, y análogamente a como se procedió para las bombas B1 y B2, se diseñó la bomba para que la presión diferencial sea de 1 bar, considerando un 20 % adicional para contemplar las diferencias de altura. La principal diferencia con el resto de las bombas, es que el rango de temperaturas en el que se encuentra esta corriente es muy elevado, por encima de los 300 °C. Por lo tanto, se debe seleccionar una bomba que permita operar de manera adecuada.

En la *Tabla 5.28* se resumen las condiciones operativas necesarias para la bomba.

Tabla 5.28 - Condiciones operativas para la bomba B4.

Caudal [m³/h]	80
Temperatura de entrada [°C]	325
Presión entrada [bar]	1
Presión salida [bar]	2
Potencia requerida [kW]	2,9
Altura desarrollada [m.c.a]	17,2
NPSH_{disp} [m.c.a]	8,4

Se seleccionó de catálogo⁵⁵ una bomba de la marca Flowserve™. A continuación se muestran sus parámetros de diseño en la *Tabla 5.29*:

Tabla 5.29 - Bomba seleccionada.

Marca	Flowserve
Modelo	ZLND
Presión máxima [bar]	6
Temperatura máxima [°C]	350
Altura máxima (m)	38
Eficiencia estimada [%]	75
Potencia consumida [kW]	6,5
NPSH_{req}[mca]	2,5

En la *Figura 5.13* se muestran las curvas características de la bomba, junto con el punto de operación.

⁵⁵ Ref. N° 10

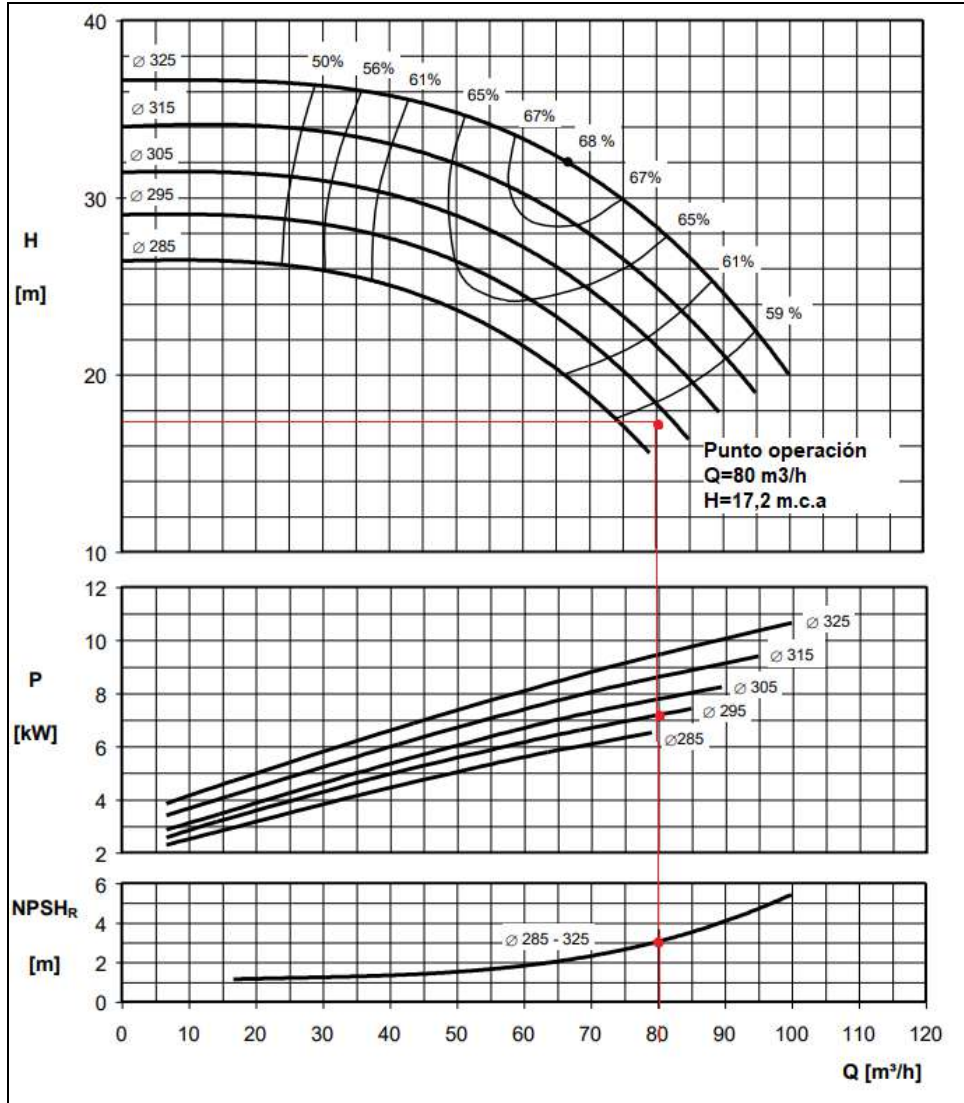


Figura 5.13 - Curvas características de la bomba.

5.5.3 - Sopladores

Los sopladores o forzadores industriales son equipos mecánicos o electromecánicos que se utilizan en un proceso para emitir un flujo constante y fuerte de gas o aire. Estos pueden ser accionados mediante un motor eléctrico, por combustión o hidráulico. Los sopladores y compresores de baja presión están diseñados específicamente para aplicaciones que requieren una presión de entre 0,3 y 3 bar

Su principio de funcionamiento es similar al de un compresor. Se aspira el gas por el lado de succión del equipo, los rotores y los impulsores rotan, y finalmente el gas se presuriza y es liberado. Dependiendo de cómo muevan al gas, los sopladores pueden clasificarse como de desplazamiento positivo o centrífugos.

Desplazamiento positivo: estos tipos de sopladores, que albergan dos rotores, atrapan un cierto volumen de gas, luego lo descargan o lo fuerzan contra la presión del sistema. Una vez en funcionamiento, un soplador gira a la misma velocidad, pero en dirección opuestas, para introducir gas en el elemento soplador. A medida que los rotores giran, el gas es arrastrado hacia el lado de entrada del soplador y pasa a las áreas entre los rotores y la carcasa del soplador. El gas se mueve alrededor de los rotores y la carcasa del soplador hacia la salida. Dentro del soplador, el volumen de gas no cambia. Más bien, se desplaza de un extremo de la máquina al otro.

Centrífugo: el gas entra en el centro de un impulsor giratorio y se divide entre las palas del impulsor. A medida que el impulsor gira, acelera el gas hacia afuera utilizando la fuerza centrífuga. En el alojamiento del soplador circundante, este gas de alta velocidad se difunde y disminuye la velocidad para crear presión. Debido a que las máquinas centrífugas operan con presión y caudal como variables dependientes, los sopladores centrífugos funcionan mejor como máquinas de carga base o en aplicaciones con presión constante.

A continuación, se detallan aquellas corrientes de proceso o servicio que requieren ser impulsadas por este tipo de equipos. Sólo se tienen en cuenta para el análisis aquellos equipos “críticos”.

5.5.3.1 - Soplador S1

Como se mencionó en el *Capítulo 3*, es necesario que la corriente que ingresa al reactor se encuentre a una presión por encima de la atmosférica, de manera de contemplar las pérdidas de carga asociadas. Esta presión, sin embargo, no es muy elevada (128 kPa), por lo que se justifica la utilización de un forzador o soplador, los cuales operan a presiones bajas.

La corriente que ingresa al reactor se trata de una mezcla de la alimentación fresca, proveniente de la planta de producción de bioetanol, más la corriente de etanol recirculada del sistema de purificación. Según se indicó en la *Sección 5.3*, se va a colocar un vaporizador para llevar a estado de vapor saturado a esta mezcla, previo al ingreso del siguiente intercambiador de calor que la lleva a las condiciones de reacción. Se decide colocar el compresor a la salida del vaporizador. Esto presenta una ventaja al proceso: al comprimir la mezcla gaseosa, aumenta su temperatura debido al cambio en el volumen. Esto implica que el requerimiento energético en el intercambiador que se encuentra aguas abajo sea menor.

En principio se selecciona de catálogos un soplador que se adecúe a los requerimientos del proceso, sin considerar una caída de presión en el intercambiador mencionado. Dado que en esta etapa del diseño no se requiere diseñar estos equipos de intercambio de calor, no es posible obtener su dimensionamiento, y por lo tanto no es posible estimar la caída de presión que sufre el gas al atravesarlo. En una etapa posterior de diseño se debe contar con este parámetro e incluirlo en la selección del compresor en cuestión.

A continuación, en la *Tabla 5.30*, se detallan los parámetros requeridos para impulsar a la corriente mencionada:

Tabla 5.30 - Parámetros operativos del soplador 1.

Caudal (m³/h)	2523
ΔP [kPa]	26,7
Potencia [kW]	22,5

Se seleccionó un soplador⁵⁶ de la marca MaproBioGas™. Este tipo de sopladores están específicamente diseñados para operar con biogas, y dado que esta corriente está compuesta casi en su totalidad por etanol, se considera que es adecuado utilizarlo en la planta. A continuación, se detallan sus parámetros en la *Tabla 5.31*.

Tabla 5.31 - Soplador seleccionado.

Modelo	CM 550
Potencia máxima [kW]	50
Caudal máximo [m³/h]	3570
Presión de descarga máxima [kPa]	197

⁵⁶ Ref. N° 11

5.5.3.2 - Soplador S2

Otra corriente gaseosa del proceso que necesita ser impulsada es la corriente “3.2”, que se corresponde con la corriente de ingreso a la torre de absorción presentada en el *Capítulo 4*. Esta corriente debe ingresar por el fondo de la torre, en contracorriente con el líquido. Al atravesarla, esta corriente pierde carga al atravesar el lecho relleno. Si bien para esta etapa del diseño se ignoraron las caídas de presión en la torre, de todas formas, es necesario contar con un forzador para esta corriente. Como no se cuenta con información precisa acerca de estas pérdidas de carga, se debe contar con un criterio que permita estimarlas. Según bibliografía consultada⁵⁷, normalmente, los absorbedores y desorbedores se suelen diseñar para caídas de presión del gas de 200 a 400 N/m² por metro de espesor empacado. Considerando el peor escenario posible, se selecciona el extremo superior del intervalo. Afectando a esta cantidad por la altura de la torre, se tiene una caída de presión de 2,4 kPa aproximadamente. Esto indica que el equipo más adecuado para impulsar esta corriente es un soplador. A continuación, en la *Tabla 5.32*, se mencionan sus condiciones operativas.

Tabla 5.32 - Parámetros operativos del soplador 2.

Caudal (m³/h)	306,3
ΔP [kPa]	2,4
Potencia [kW]	1,5

Se seleccionó, nuevamente, un soplador⁵⁸ de la marca MaproBioGas™. A continuación, se detallan sus parámetros en la *Tabla 5.33*.

Tabla 5.33 - Soplador seleccionado.

Modelo	CL 60-M HG
Potencia máxima [kW]	2,7
Caudal máximo [m³/h]	370
Presión de descarga máxima [kPa]	120

⁵⁷ Ref. N° 12

⁵⁸ Ref. N° 11

5.5.4 - Válvulas de reducción de presión

Una válvula reguladora de presión, como su nombre lo indica, regula la presión del fluido, generalmente para reducirla. Son instaladas en sistemas hidráulicos y neumáticos a nivel industrial, comercial y doméstico, de acuerdo con su diseño, materiales del cuerpo y los empaques. Para seleccionar las válvulas adecuadas, se deben tener en cuenta algunas variables para un diseño y funcionamiento eficientes. Estas variables son: presión de entrada, presión de salida, rango de flujo y características del fluido. Es importante contar con la información de la corriente que debe atravesar la válvula para poder seleccionar los materiales que mejor se ajusten. Dentro de los parámetros más importantes se encuentran la temperatura y la presencia de sólidos disueltos que puedan generar incrustaciones.

En la *Figura 5.14* se observa un corte de una válvula reductora de presión típica con sus distintas partes, donde (1) es una restricción cuya función es facilitar la apertura de la válvula, (2) es la cámara superior que en función de su presión diferencial mueve el émbolo hacia arriba o hacia abajo, (3) es el piloto que comanda la operación de la válvula, (4) es el disco con su asiento que producen el cierre de la válvula, (5) es un válvula aguja que acelera o lentifica el cierre de la válvula restringiendo el flujo de agua hacia la cámara superior (no restringe el flujo en sentido contrario), y (6) es una válvula de seccionamiento manual ubicada aguas abajo de la válvula que cuando se cierra comanda el cierre de la válvula principal.

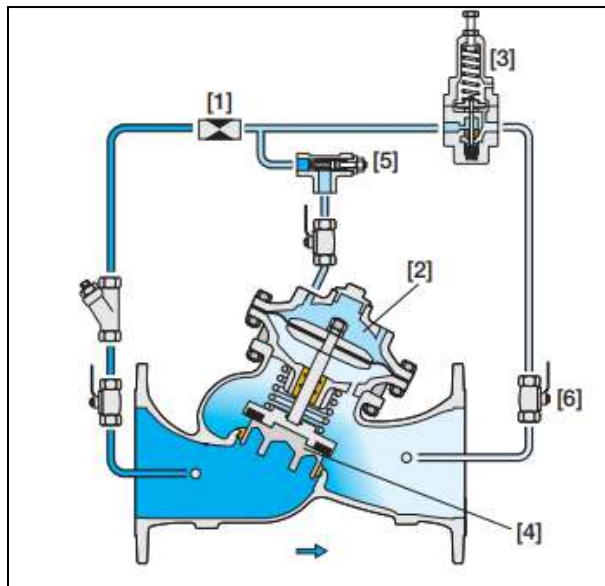


Figura 5.14 - Esquema de válvula reductora de presión.

A la hora de seleccionar estas válvulas es necesario tener un factor en cuenta: la cavitación. Este fenómeno es muy importante en válvulas de control y específicamente en válvulas reductoras de presión, y tiene un efecto importante en la vida útil de los sistemas y en su operación. La cavitación daña la válvula y la tubería mediante vibración y erosión de sus paredes internas. También causa ruidos elevados.

Cuando las válvulas reductoras de presión trabajan en posiciones cercanas al cierre, es decir cuando el área de pasaje del líquido se encuentra muy reducida, el flujo se acelera para compensar esta disminución de área, la mayor velocidad hace caer la presión. Cuando la presión cae y alcanza la presión de vapor del líquido, se forman cavidades de vapor o burbujas que son arrastradas por el flujo. Cuando se alejan del obturador de la válvula, el área de pasaje se vuelve a incrementar, la velocidad disminuye, la presión aumenta y las burbujas de vapor colapsan por implosión generando altísimas presiones (colapso de la cavidad de vapor) y micro jets que erosionan la pared de la válvula si se encuentran cerca de ella.

En la planta es necesaria la instalación de dos válvulas reductoras de presión:

- **Válvula 1:** A la salida de la torre de destilación de acetato de etilo, T-305, la corriente de tope -3.13- se debe despresurizar hasta la presión de operación de la torre de destilación anterior, y luego ingresar como corriente recirculada.
- **Válvula 2:** A la salida de la torre de destilación T-305, pero ahora se trata de la corriente de fondo -3.16-, la cual debe ser despresurizada hasta la presión atmosférica, a la salida del intercambiador de calor.

En la *Figura 5.15* se muestra un esquema de la planta con las válvulas mencionadas.

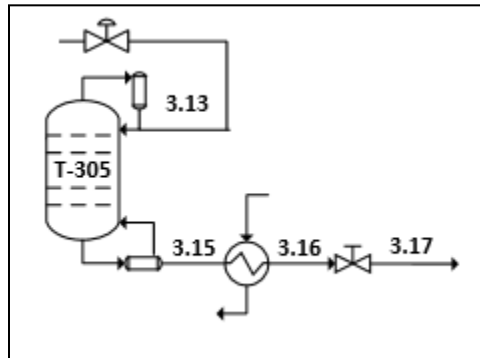


Figura 5.15 - Esquema de la torre de destilación T-305

A continuación, se resumen las características de estas corrientes (*Tabla 5.34*):

Tabla 5.34 - Corrientes de proceso involucradas.

	Corriente 3.13	Corriente 3.15
Caudal [m³/h]	1,2	0,22
Presión entrada [bar]	15	15
Presión salida [bar]	1	1
Temperatura de entrada [°C]	160,5	20

5.5.4.1 - Válvula 1

La principal dificultad que se presenta es conseguir una válvula que permita operar con líquidos a elevada temperatura como se tiene en el proceso (corriente 3.13). Teniendo en cuenta esto y los demás parámetros de esta corriente se seleccionó de catálogo⁵⁹ una válvula que sea acorde a las necesidades operativas. La válvula seleccionada es de la marca ValfontaTM, a continuación, en la *Tabla 5.35*, se muestran sus características:

Tabla 5.35 - Válvula reductora de presión seleccionada para la corriente 3.13.

Marca	Valfonta
Modelo	M1
Presión máxima [bar]	40
Presión mínima [bar]	0,1
Presión diferencial máxima [bar]	20
Caudal mínimo [m³/h]*	3
Temperatura máxima admisible[°C]	250

**Aclaración: si bien el caudal mínimo es mayor a los caudales que tienen las corrientes del proceso, el proveedor indica en el catálogo que es posible reducir el Kv (coeficiente de capacidad de la válvula) para pequeños caudales.*

Para evitar que la válvula cavite, se cuenta con gráficos provistos por el fabricante con zonas de cavitación en función de la diferencia de presión que sufre el fluido al atravesarla. En la *Figura 5.16* se muestra este gráfico. El eje x corresponde a la presión aguas abajo de la válvula reductora, y el eje y a la presión aguas arriba. La zona amarilla delimita la región de cavitación, y es la zona que se debe evitar para el diseño de la válvula. También es deseable evitar la zona de operación ruidosa y por lo tanto se debe diseñar en la zona de operación segura.

⁵⁹ Ref. N° 13

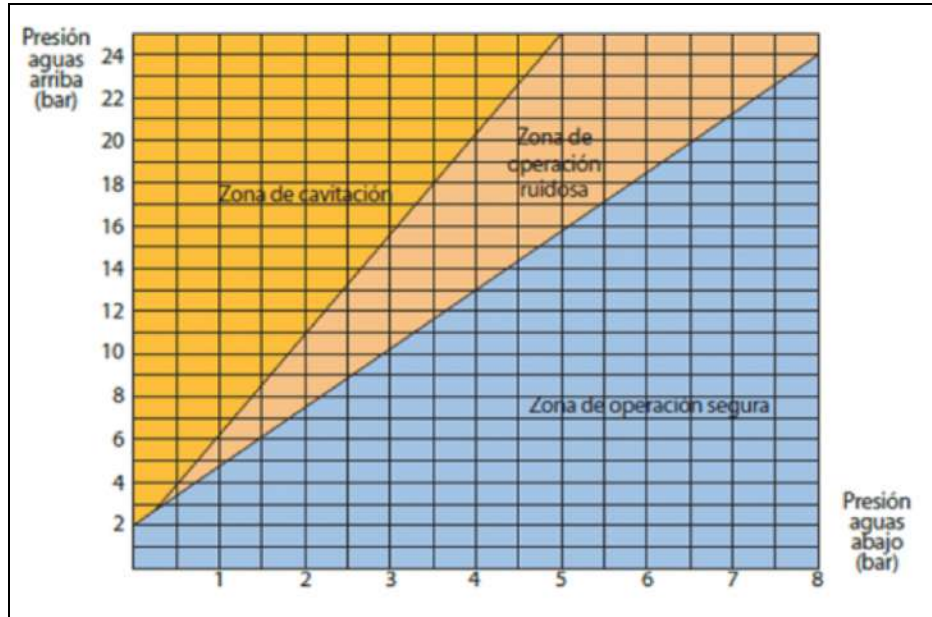


Figura 5.16 - Zonas de cavitación en válvula reductora de presión.

Como se mencionó, la caída de presión necesaria para esta corriente es $\Delta P=14$ bar. Si se observa la *Figura 5.16*, entrando con 15 bar de presión en el eje de ordenadas, y con 1 bar en el eje de abscisas, se obtiene un punto de operación que cae dentro de la región de cavitación. Para evitar este efecto se decide implementar un arreglo de dos válvulas en serie, de la siguiente manera: En la primera válvula, se selecciona una caída de presión de 10 bar, es decir la presión aguas abajo resulta de 5 bares. De esta manera, se trabaja en la zona de operación segura. Para la segunda válvula, se parte de 5 bar como presión aguas arriba y se llega a 1 bar aguas abajo. En este caso, se cae dentro de la zona ruidosa. Para no involucrar una tercera válvula al arreglo, se decide operar a la segunda válvula hasta la mínima presión que asegure una zona de operación segura. Esta presión se corresponde con 1,2 bar aproximadamente y se considera despreciable la diferencia respecto a la presión deseada.

5.5.4.2 - Válvula 2

Para la corriente “3.16”, dado que no hay requisito sobre su temperatura, se seleccionó una válvula de catálogo⁶⁰ de la marca Bermad™. A continuación se resumen sus variables de diseño, en la *Tabla 5.36*:

Tabla 5.36 - Válvula reductora de presión seleccionada para la corriente 3.16.

Marca	Bermad
Modelo	700-ES
Presión máxima [bar]	25
Presión mínima [bar]	1
Presión diferencial máxima [bar]	20
Caudal mínimo [m³/h]	0,1
Temperatura máxima admisible[°C]	80

A continuación se presenta el gráfico con las zonas de cavitación provisto por el fabricante para esta válvula, en la *Figura 5.17*.

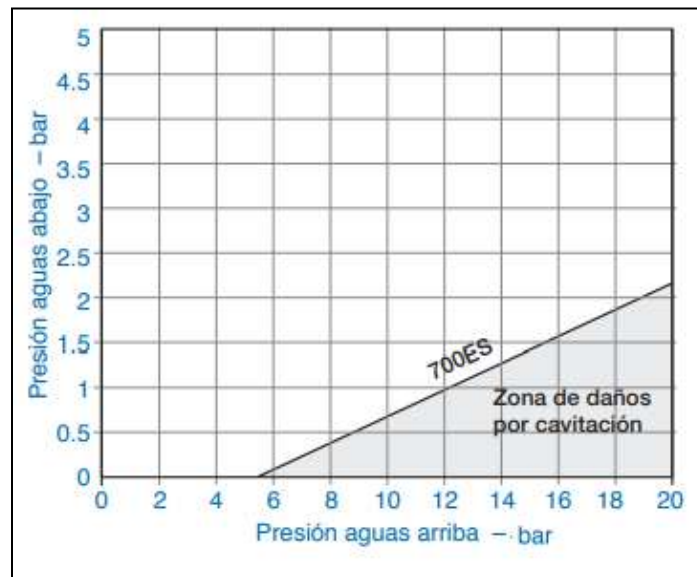


Figura 5.17 - Zonas de cavitación en válvula reductora de presión.

Para esta válvula, se presenta nuevamente la situación obtenida en el caso anterior. Ingresando con 15 bar de presión aguas arriba, se ve que para una presión en la descarga de 1 bar, el punto de operación se sitúa dentro de la zona de cavitación. Se propone, entonces, un arreglo de válvulas, de la siguiente manera: la primera opera con una diferencia de presión de 10 bar, es decir, de 15 a 5 bar, mientras que la segunda con una diferencia de 4 bar, resultando finalmente en la presión deseada.

⁶⁰ Ref. N° 14

5.5.5 - Equipo de refrigeración

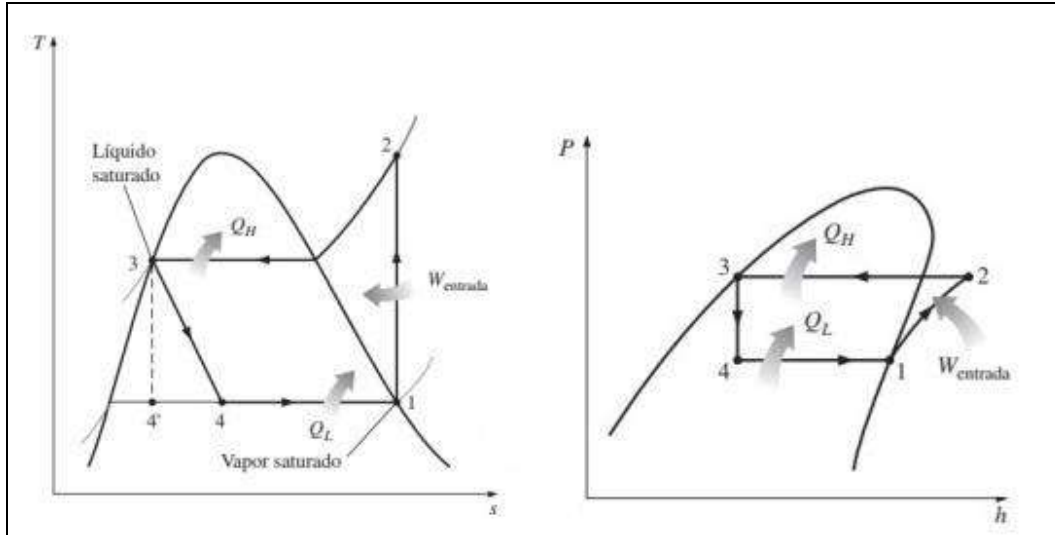
Son equipos muy versátiles y ampliamente utilizados, tanto en la industria como en el ámbito comercial y doméstico. Pueden operar en un amplio rango de temperaturas, y alcanzar valores tan bajos como $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$.

A diferencia de las torres de enfriamiento, implican un mayor costo económico y una mayor complejidad técnica. Sin embargo, permiten alcanzar temperaturas más bajas y obtener un mayor control sobre su valor.

Todos los equipos de refrigeración, independientemente de su configuración, operan con el ciclo de compresión de vapor. El fluido que circula por el sistema de refrigeración recibe el nombre de refrigerante, y los hay de diversos tipos.

El ciclo de compresión de vapor se puede ilustrar en un diagrama temperatura vs. entropía o en un diagrama presión vs. entalpía (ver *Figura 5.18*). El ciclo se compone de 4 etapas principales: compresión, condensación, expansión y evaporación. A continuación, se detalla cada una de las etapas en un ciclo ideal.

- Compresión isentrópica (1-2): El gas refrigerante, a baja temperatura y presión, ingresa al compresor. Allí su presión y temperatura aumentan, no obstante, sin cambiar su entropía. A la salida de esta etapa (punto 2) el refrigerante está sobrecalentado.
- Condensación (2-3): El vapor sobrecalentado y a alta presión ingresa al condensador. Allí el refrigerante intercambia calor con un fluido auxiliar, generalmente aire o agua. En la salida (punto 3) el refrigerante está como líquido sobresaturado.
- Expansión isoentálpica (3-4): El refrigerante ingresa a una válvula expansora que reduce su presión y temperatura sin modificar su entalpía. En el punto 4 el refrigerante es una mezcla líquido-vapor a baja presión.
- Evaporación (4-1): El refrigerante ingresa a un intercambiador de calor, donde se pone en contacto con la corriente que se desea enfriar (o la habitación a enfriar). Allí el refrigerante absorbe calor y se evapora hasta llegar al punto 1.



a) b)
Figura 5.18 - Diagramas de a)entropía y b)entalpía para un ciclo de refrigeración.

En los ciclos reales, el refrigerante experimenta un leve sobrecalentamiento a la salida del evaporador, con el fin de evitar la entrada de líquido al compresor.

5.5.5.1 - Temperatura mínima

Para escoger esta temperatura es importante considerar dos puntos contrapuestos:

- Operar a la mayor temperatura posible permite disminuir la potencia del compresor y, en consecuencia, los costos productivos.
- La diferencia mínima de temperatura entre el refrigerante y el fluido de proceso debe ser lo más alta posible, a fin de permitir el diseño de equipos más pequeños. Se recomienda operar con una diferencia de entre 5 a 10 °C.

Como regla general, se procura mantener los costos operativos al mínimo, entonces se opta por **operar a la mayor temperatura posible: -25 °C**. Esta temperatura garantiza una diferencia mínima de temperaturas de 5 °C.

La presión de saturación del amoníaco correspondiente a -25 °C es de 151,6 kPa. A esta presión se elimina el riesgo de filtración de aire.

5.5.5.2 - Temperatura máxima

Para escoger esta temperatura se deben contemplar diversos aspectos:

- A mayor temperatura, la presión que debe desarrollar el compresor es mayor. Con una presión lo suficientemente alta se puede dar lugar a fallas. Además, altas presiones implican mayor potencia de compresión.
- El agua fría utilizada en el condensador debe estar más fría que el refrigerante caliente. El agua de torre se puede enfriar hasta 30 °C debido a las condiciones climáticas de la localidad. Esto se trata con mayor detenimiento en la *Sección 5.5.6*.
- A mayor temperatura, menor es el tamaño del condensador, debido a que la fuerza impulsora media es mayor.
- En la etapa de compresión, el gas se sobrecalienta. Es importante que esta temperatura sea inferior a la máxima admitida por el compresor. Mientras más grande sea el salto de presión, mayor será el sobrecalentamiento. En compresores industriales comunes se encontró que la temperatura máxima de operación no debe exceder los 160 °C. Más adelante en esta sección serán tratadas las cuestiones referidas al diseño y selección del compresor.

Por lo explicado, se opta por operar a la mínima temperatura posible, a fin de disminuir la potencia de compresión, la presión en los equipos y el sobrecalentamiento. El límite inferior está limitado por la temperatura del agua fría y el sobrecalentamiento. El agua fría que ingresa al condensador está a 30 °C y eleva su temperatura hasta la salida. La temperatura de condensación debe permitir una adecuada diferencia de temperatura entre el refrigerante y el agua. Sin embargo, para temperaturas de condensación superiores a 40 °C, el sobrecalentamiento excede el límite de 160°C de los compresores seleccionados, y la compresión debería realizarse en más de una etapa.

Finalmente, se opta por operar con una **temperatura de condensación de 40 °C**. A esta temperatura, y considerando una eficiencia de 95 % del compresor, la temperatura de sobrecalentamiento es de 155 °C aproximadamente.

A continuación, en la *Figura 5.19*, se muestra un esquema del ciclo de refrigeración propuesto en un diagrama presión-entalpía.

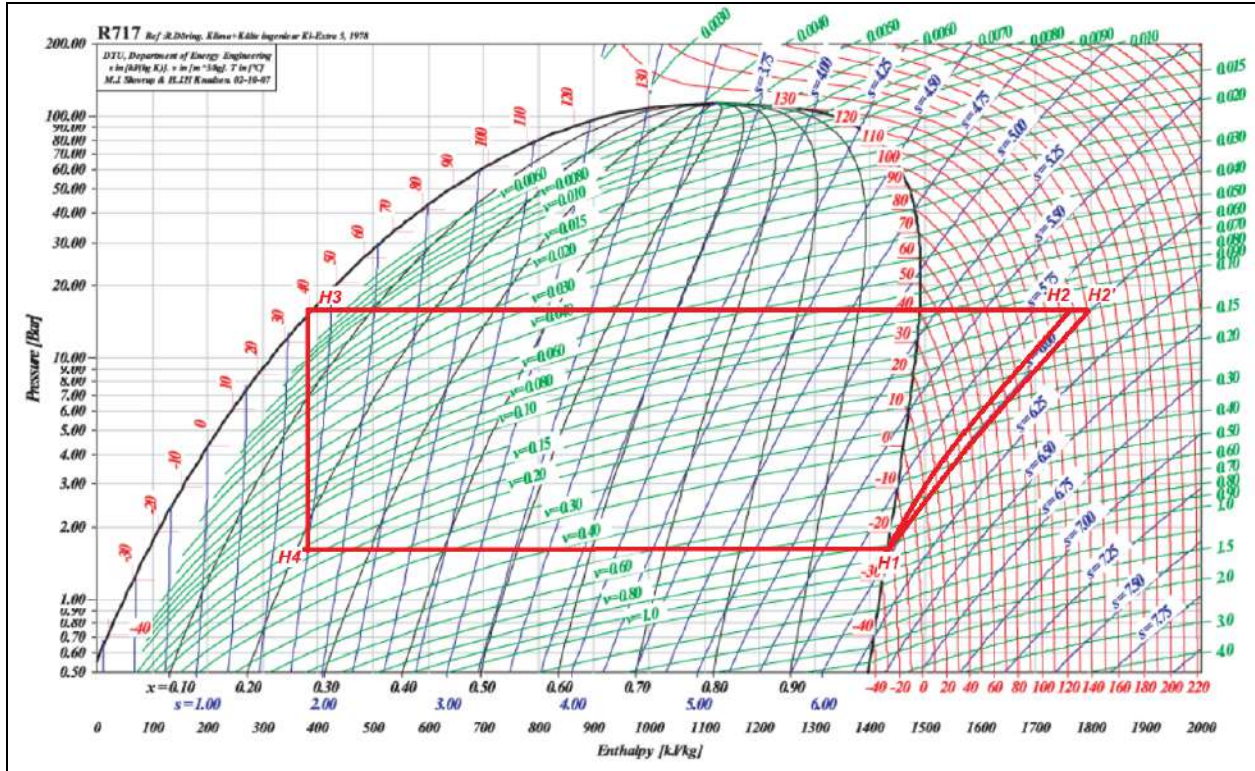


Figura 5.19 - Diagrama presión-entalpía para el ciclo de refrigeración propuesto.

5.5.5.3 - Trabajo de compresión

El trabajo de compresión se obtiene como la diferencia de entalpías del gas entre la entrada y la salida del compresor:

$$\text{Trabajo} = W = H_{\text{salida}} - H_{\text{entrada}} = H'_2 - H_1$$

Luego, la potencia requerida en la etapa de compresión se obtiene como el producto entre el trabajo de compresión y el caudal de refrigerante que atraviesa el circuito.

$$\text{Potencia} = W \cdot m_{\text{Ref}}$$

Los valores de entalpía se obtienen de la lectura del gráfico presión-entalpía (Figura 5.19) y la masa de refrigerante se calculó previamente en la Sección 5.4.2 del presente informe.

5.5.5.4 - Capacidad de refrigeración

Corresponde al calor total que es intercambiado en el evaporador, o lo que es lo mismo, el calor total capaz de absorber de las corrientes del proceso. Se calcula mediante la siguiente expresión:

$$\text{Capacidad del sistema de refrigeración} = \Delta H_{\text{evaporador}} * m_{\text{refrigerante}} = 662 \text{ kW}$$

Donde $\Delta H_{\text{evaporador}}$ corresponde a la diferencia de entalpía entre la entrada del evaporador y su salida, es decir, $H_1 - H_4$ (Figura 5.19).

En la Tabla 5.37 se muestra un resumen con los parámetros de diseño del sistema de refrigeración completo.

Tabla 5.37 - Parámetros de diseño del sistema de refrigeración

Temperatura de evaporación [°C]	-25
Presión de evaporación [kPa]	151,5
Temperatura de condensación [°C]	40
Presión de condensación [kPa]	1555,3
Caudal de refrigerante [kg/h]	$2,23 \cdot 10^3$
Potencia del compresor [kW]	233,8
Temperatura de sobrecalentamiento [°C]	155
Capacidad de refrigeración [kW]	662

5.5.5.5 - Compresor

Con el valor de potencia calculado y el caudal de refrigerante a comprimir, se seleccionó de catálogos un compresor que cumpla con los requerimientos del proceso. La limitación principal que se presenta es la temperatura de descarga del compresor. El equipo elegido tiene que soportar esta temperatura sin incurrir en fallas operativas. El compresor seleccionado⁶¹ es de la marca Mayekawa™, en la Tabla 5.38 se muestran sus especificaciones:

Tabla 5.38 - Compresor seleccionado para el sistema de refrigeración

Modelo	280JL-V
Potencia máxima [kW]	397,3
Capacidad de refrigeración [kW]	709
Temperatura máxima admisible[°C]	160

⁶¹ Ref. N° 15

5.5.5.6 - Condensador

Como se detalló en el apartado de selección de las condiciones de operación del ciclo, la temperatura de condensación está condicionada por la temperatura del agua de refrigeración que se puede disponer en la localidad. Por este motivo, la temperatura mínima de condensación a emplear es de 40 °C. Por lo expuesto en el diseño y selección del compresor del ciclo, la temperatura de sobrecalentamiento que tiene el vapor al entrar al condensador es de aproximadamente 155 °C. Esto implica que el condensador debe, en primer lugar, enfriar al refrigerante hasta la condición de vapor saturado, y luego condensarlo a esa temperatura y presión correspondiente. Es decir, se trata de un desobrecalentador. Sin embargo, el refrigerante tiene un calor de condensación mucho mayor al calor sensible del vapor, por lo que normalmente se considera que la etapa de remoción de calor latente es la más significativa en el equipo. El calor a intercambiar en cada una de estas etapas de enfriamiento se obtiene de la siguiente manera:

$$Q_{sensible} = m_{ref} \cdot C_{p_{ref,vapor}} \cdot (T_{condensador} - T_{sobrecalentamiento})$$

$$Q_{latente} = m_{ref} \cdot \lambda_{cond}(T_{condensador})$$

Para el Cp del vapor se tomó el valor promedio entre la temperatura de condensación y la de sobrecalentamiento, dado que no varía significativamente en este intervalo. El valor de λ_{cond} se tomó como el correspondiente a 40 °C. El calor obtenido para las etapas de sobrecalentamiento y condensación resultó, respectivamente, en **150,5 kW y 675,9 kW**, resultando en un total de **826,4 kW**. Se verifica que la etapa más significativa es la de condensación. Sin embargo, no se puede ignorar la etapa de sobrecalentamiento porque se estaría incurriendo en un error a la hora de dimensionar el condensador.

Como se indicó, se utilizará agua de enfriamiento para condensar el refrigerante. Para asegurar una diferencia de temperatura mínima entre las corrientes de 5 °C, el agua abandona el equipo a 35 °C. Esto se explica con mayor detenimiento en la sección 5.5.6 - "Torre de enfriamiento".

Para el cálculo de los coeficientes globales de transferencia de calor se tomaron los siguientes intervalos para los coeficientes locales de cada corriente:

$$h_{agua} = 1000 - 11000 \text{ W/m}^2\text{°C}$$



$$h_{Ref,cond} = 2500 - 6000 \text{ W/m}^2\text{°C}$$

Respecto al coeficiente local para el amoníaco, se tomó el menor valor del intervalo, para considerar el peor caso posible. Luego, mediante la suma de resistencias se obtuvo el coeficiente global.

Análogamente a como se procedió con los demás intercambiadores tratados en este capítulo, se calculó el área necesaria para el intercambio. A continuación, en la *Tabla 5.39*, se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 5.39 - Dimensiones del condensador.

Condensador	
Calor a intercambiar [kW]	826,4
Caudal de agua [kg/h]	$1,423 \cdot 10^5$
Área de intercambio [m ²]	64,2
ΔT_{mL} [°C]	7,21
Coeficiente global U [W/m ² °C]	1786

Dado que el equipo presenta cambio de fase, el intercambiador más adecuado es de tubos y coraza.

5.5.5.7 - Válvula de expansión

La válvula de expansión es un componente clave en el sistema de refrigeración. Se ubica entre el depósito de refrigerante (a la salida del condensador) y la entrada del evaporador. Su función es despresurizar la corriente de refrigerante hasta la presión del evaporador, y la de suministrar el caudal adecuado para que el evaporador trabaje en sus condiciones óptimas.

A diferencia de una válvula simple, la VET es capaz de regular la cantidad de refrigerante que ingresa al evaporador, a fin de mantener su salida constante frente a eventuales variaciones en la carga térmica del evaporador. Sus componentes y su funcionamiento se explican a continuación:

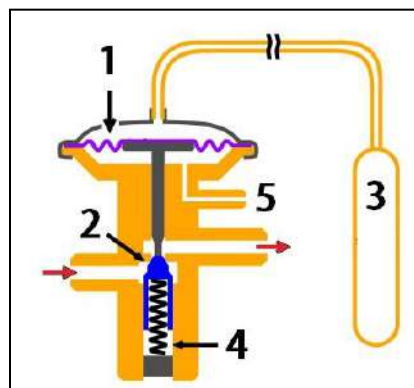


Figura 5.20 - Esquema de válvula de expansión termostática.

El ingreso de refrigerante al evaporador es regulado por el vástago de la válvula (2), el cual está asociado al diafragma (1). Sobre el diafragma actúan 3 presiones, y el equilibrio entre ellas determina la apertura de la válvula:

- Presión del bulbo: La válvula cuenta con un bulbo sensor (3) ubicado en la salida del evaporador. Dentro contiene una mezcla líquido/vapor, la cual varía su presión acorde a la temperatura del bulbo. Frente a un aumento de temperatura, la presión de la mezcla empuja el diafragma hacia abajo.
- Presión del resorte (4): Es ajustada manualmente, y su valor es acorde al sobrecalentamiento deseado. Empuja el diafragma hacia arriba.
- Presión de compensación (5): Corresponde a la presión a la salida del evaporador. En sistema de baja carga o sin distribuidor, se toma la presión a la salida de la válvula (compensación interna), la cual se considera igual a la presión a la salida del evaporador. En sistemas de alta carga o con distribuidor (evaporador con múltiples circuitos), la caída de presión en el evaporador es significativa. Entonces, se toma la presión a la salida del evaporador (compensación externa). Esta presión empuja el diafragma hacia arriba

El equilibrio de fuerzas sobre el diafragma es el siguiente:

$$F_{bulbo} = F_{resorte} + F_{compensador}$$

Si la carga del evaporador aumenta, el sobrecalentamiento en la salida del evaporador es mayor, entonces la presión del bulbo aumenta. El diafragma se desplaza hacia abajo, y abre más la válvula. El mayor caudal abastece la carga del evaporador y la temperatura de sobrecalentamiento disminuye.

Por el contrario, si la carga del evaporador disminuye, el sobrecalentamiento en la salida del evaporador es menor, entonces la presión del bulbo disminuye. El diafragma se desplaza hacia arriba, y cierra más la válvula. El menor caudal abastece la carga del evaporador y la temperatura de sobrecalentamiento aumenta.

Para la selección de la válvula correcta, es necesario conocer tres (3) datos: la capacidad de refrigeración del circuito, la temperatura de saturación del evaporador, y la caída de presión a través de la válvula. Esta última se considera como la diferencia entre las presiones de saturación del condensador y evaporador, despreciando las caídas de presión. Se resumen estas variables en la *Tabla 5.40*:

Tabla 5.40 - Requerimientos de la válvula de expansión.

Capacidad de refrigeración [kW]	662
Temperatura de saturación del evaporador [°C]	-25
Caída de presión [kPa]	1403,8

No se ha podido encontrar una válvula con la capacidad de refrigeración requerida, entonces, se decide implementar un arreglo de tres válvulas en paralelo, cada una con una capacidad de refrigeración de 220,5 kW, aproximadamente. De esta manera, cada válvula tiene una tercera parte de la capacidad total.

La empresa Danfoss™ ofrece tablas⁶² para seleccionar la válvula adecuada. Primero se escoge la tabla correspondiente al amoníaco y, luego, se ingresa con la temperatura del evaporador y la caída de presión. Se escoge el modelo con capacidad nominal igual o levemente superior a la capacidad del evaporador. Se resumen sus características en la *Tabla 5.41*.

Tabla 5.41 - Válvula seleccionada para el sistema de refrigeración.

Modelo	TEA 85-85
Capacidad de refrigeración nominal [kW]	262
Capacidad de refrigeración [kW]	709
Caída de presión (kPa)	1400

La capacidad nominal, bajo estas condiciones, es 262 kW, es decir, un 19 % superior a la requerida. Pese al valor ligeramente superior, la válvula tiene la capacidad de regular el caudal, entonces se la considera apta.

5.5.6 - Torre de enfriamiento de agua

Este equipo es ampliamente utilizado en la industria, dado su bajo costo de construcción y de operación. Sin embargo, su capacidad de enfriamiento está limitada a las condiciones climáticas y, en promedio, logra enfriar entre 10 °C y 30 °C el agua entrante.

Independientemente del tipo de torre, todas operan de forma similar: el agua caliente, que cae a través de la torre, se pone en contacto directo con una corriente de aire que tiene una temperatura menor a la temperatura del agua y una humedad relativa inferior a la de saturación. Bajo estas condiciones, una fracción del agua es evaporada, originando que la temperatura del aire y su humedad aumenten, y que la temperatura del agua descienda. El fenómeno de transferencia de masa (evaporación) tiene lugar en la superficie del relleno, el cual está diseñado para ofrecer una gran superficie por unidad de volumen, magnificando así la tasa de evaporación total.

La eficiencia de la torre está íntimamente ligada a las condiciones atmosféricas. En particular a la temperatura y la humedad relativa.

⁶² Ref. N° 16

Las torres se diferencian entre sí en base al método para movilizar el aire. A continuación se listan los arreglos de torre más comunes:

- *Atmosférica*: este arreglo no requiere ventiladores, la circulación del aire depende de los vientos dominantes. Esta característica, limita su uso a zonas de fuertes y constantes vientos.
- *Tiro natural*: mediante un diseño en forma de chimenea, el aire logra circular sin ventiladores aun en zonas de poco viento.
- *Tiro forzado y tiro inducido*: Ambas son torres a contracorriente y requieren el uso de ventiladores para la circulación del aire. La principal diferencia entre ambas torres es que la de tiro forzado tiene ubicado su ventilador en la parte inferior de la torre, mientras que la de tiro inducido lo tiene ubicado en la parte superior.

En el presente informe no se aborda el diseño detallado de la torre, motivo por el cual el análisis matemático es obviado. Se toma como principio de diseño la “aproximación al bulbo húmedo”, el cual indica que la temperatura de salida del agua es entre 2,5 °C y 5 °C superior a la temperatura de bulbo húmedo del aire (T_{bh}).

Para obtener la temperatura de bulbo húmedo (Ver *Figura 5.21*) basta con conocer la temperatura del aire (T_a) y su humedad absoluta (Y'). Luego con la ayuda de un diagrama psicrométrico, se sigue la trayectoria de saturación adiabática hasta interceptar la curva de 100 % de saturación y en el eje horizontal se lee la temperatura de bulbo húmedo.

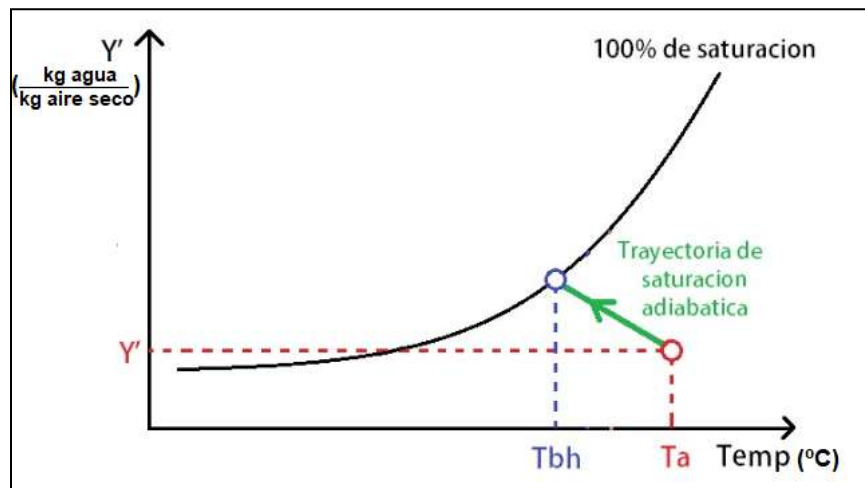


Figura 5.21 - Determinación de la temperatura de bulbo húmedo a partir del diagrama psicrométrico.

Como se advierte en la *Figura 5.21*, los únicos factores a tener en cuenta (al menos en esta etapa de diseño) son la temperatura del aire y su humedad absoluta. De tal forma que una menor temperatura del aire, así como una menor humedad absoluta, permiten alcanzar menores temperaturas de bulbo húmedo. Esto es ilustrado en la *Figura 5.22*.

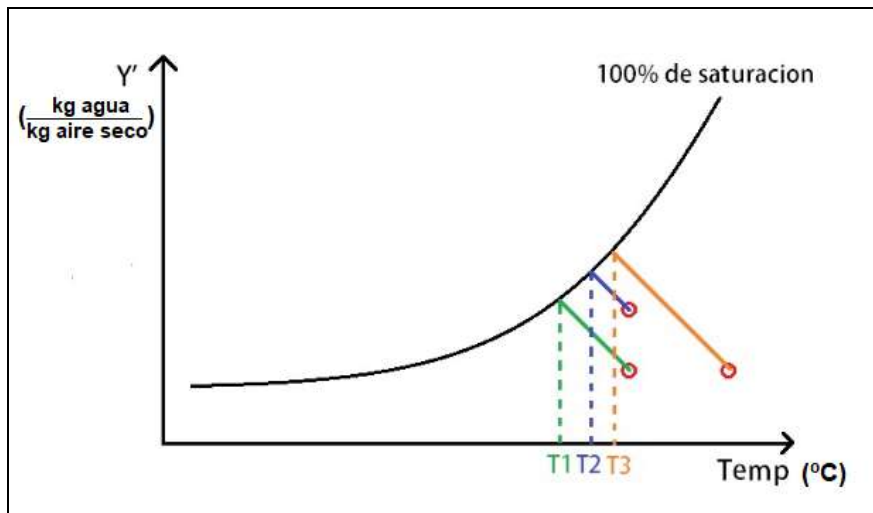


Figura 5.22 - Efecto de la variación de la temperatura del aire y la humedad sobre la temperatura de bulbo húmedo.

En el diseño preliminar de la torre de enfriamiento es necesario definir dos parámetros básicos: la temperatura de entrada y de salida del agua. En base a estos parámetros, luego se puede diseñar el resto del equipo.

5.5.6.1 - Temperatura de salida

Como se explicó previamente, se hará uso de la “aproximación de bulbo húmedo”, cuya temperatura es consecuencia directa de la temperatura del aire y su humedad absoluta. Estos dos parámetros, deben ser obtenidos de la zona donde se instalará la torre, en este caso, la provincia argentina de Tucumán.

Mediante el sitio web de la *Estación Experimental Agroindustrial Obispo Colombres (EEAOC)*⁶³, se obtiene el registro histórico de temperatura y humedad en la región.

En esta página se ofrecen los valores de temperatura máxima y mínima, así como los de humedad relativa máxima y mínima para cada día en el periodo de tiempo seleccionado. Es importante resaltar que el máximo en temperatura se corresponde con el mínimo en humedad relativa. De igual manera, el mínimo de temperatura se corresponde con el máximo de humedad relativa. Este comportamiento se puede observar en las *Figuras 5.23 y 5.24*, que representan un día tipo de verano en Tucumán.

⁶³ Ref. N° 17



Figura 5.23 - Temperaturas por hora en un día de verano en la provincia de Tucumán.

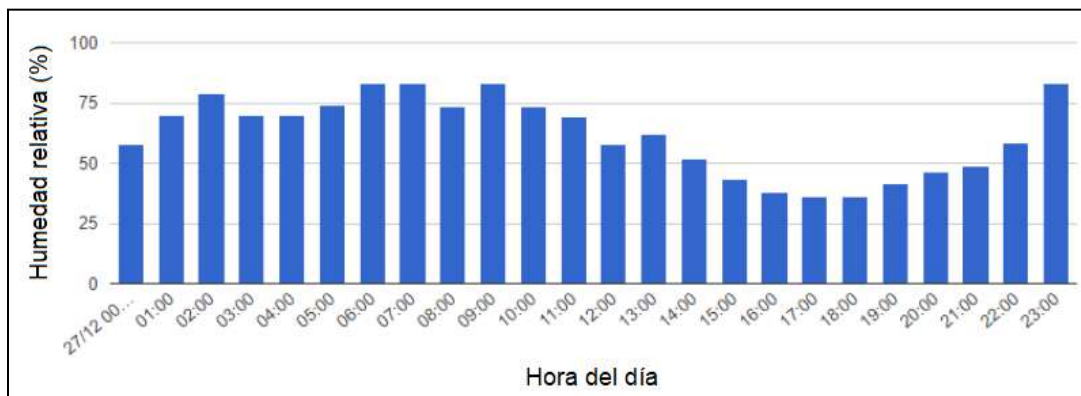


Figura 5.24 - Humedad relativa por hora en un día de verano en la provincia de Tucumán.

Luego para cada día se calculan dos temperaturas de bulbo húmedo: Una utilizando la máxima temperatura con la mínima humedad y la otra utilizando la mínima temperatura y la máxima humedad. De estas dos temperaturas, se contempla la más alta. A modo ilustrativo, en la *Figura 5.25* se observa la temperatura de bulbo húmedo para los meses cálidos del año 2021

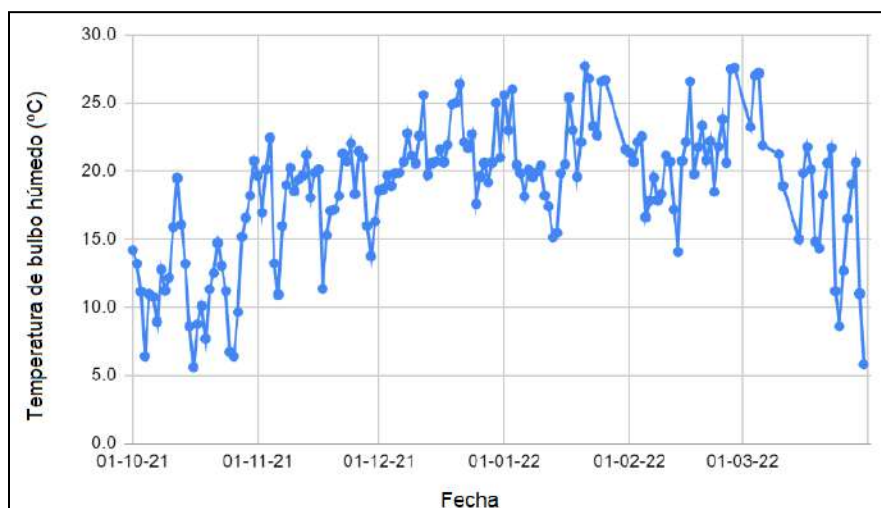


Figura 5.25 - Temperatura de bulbo húmedo promedio obtenida en los meses de verano en la región.

Para el diseño de la torre se considera la máxima temperatura de bulbo húmedo, que sea solo superada por el 5 % de los días. La temperatura seleccionada fue 25 °C y la máxima absoluta 27,6 °C. De esta forma, se garantiza una fuerza impulsora de al menos 5 °C. Y en el peor de los casos, de 2,4 °C.

Finalmente, aplicando un margen de 5 °C. La temperatura de salida del agua de la torre es de 30 °C.

5.5.6.2 - Temperatura de entrada

Junto con la temperatura de entrada, define el salto térmico de la torre. En su elección deben considerarse diversos factores:

- Caudal de agua: A mayor salto térmico, es menor el requerimiento de agua. Esto se debe a que el agua almacena mayor cantidad de calor por unidad de masa. El menor requerimiento de agua repercute en una menor potencia de bombeo y menor tamaño de la torre.
- Capacidad de la torre: Independientemente de la temperatura, el calor a retirar del sistema es el mismo. Sin embargo, cuanto menor es el salto térmico, mayor es la potencia que requiere la torre. Esto se debe a que la fuerza impulsora media es menor, y por lo tanto, la transferencia de calor es más lenta. Entonces, el caudal de aire a suministrar es mayor, lo que implica que el ventilador consuma más potencia.
- Corrientes a enfriar: Según la temperatura seleccionada, habrá corrientes que puedan ser o no enfriadas con agua. Si la temperatura del agua excede a la de la corriente, la transferencia de calor no será posible.
- Condensador del compresor: El refrigerante se condensa por agua, entonces es necesario que la temperatura del agua sea inferior en todo momento a la temperatura de condensación.

El uso de agua fría más importante está dado por el condensador. En este equipo se considera únicamente el uso de agua como fluido auxiliar, dado que el aire seco posee una temperatura mayor y su coeficiente de transferencia de calor es mucho menor.

Como se explica en el *Sección 5.5.5*, la temperatura del condensador es de 40 °C, y el sobrecalentamiento alcanza los 155 °C. Dado que el calor latente es casi 5 veces más grande que el calor sensible, se considera que el refrigerante está en prácticamente todo el condensador a 40 °C.

A fin de garantizar una fuerza impulsora mínima de 5 °C, la temperatura de salida del agua del condensador se selecciona en 35 °C. Bajo estas condiciones, el caudal de agua necesario para condensar el refrigerante es de **39,54 kg/s**.

Para el resto de los intercambiadores de la planta que utilizan agua de enfriamiento como fluido frío, se puede seleccionar una temperatura de salida mayor, esto con el fin de disminuir el requerimiento de agua total.

Como se explicó previamente, a mayor salto térmico, menor es el caudal. Sin embargo, se selecciona como límite 60 °C, a fin de poder enfriar la corriente C6 con agua y lograr una diferencia mínima de temperatura de 10 °C aproximadamente, según lo explicado en la Sección 5.4.2. Las corrientes que se enfrían con el agua de torre son: C1 (parcialmente), C6 y C5, que se corresponden con los intercambiadores N° 6, 7 y 8, respectivamente. En la *Tabla 5.28* se puede observar el caudal de agua necesario en estos intercambiadores para los distintos saltos de temperatura propuestos.

Tabla 5.28 - Caudal de agua necesario en los intercambiadores.

		Caudal de agua total (kg/h)
Salto de temperatura (°C)	30-35	1,48.10 ⁵
	30-60	2,47.10 ⁴

Se puede notar a simple vista que con un salto de 30 °C, el agua requerida para enfriar estas corrientes es mucho menor que para el salto de 5 °C. Por lo expuesto, se selecciona una temperatura de salida del agua de 60 °C para los intercambiadores. Una vez que ambos caudales de agua alcancen su temperatura final en sus respectivos intercambiadores, se juntan estas corrientes con el fin de tener una única corriente de entrada a la torre. Para esto, se obtiene la temperatura final resultante de la mezcla de las corrientes, mediante un balance de energía en estado estacionario, como sigue:

$$\sum m. T. Cp_{entrada} = \sum m. T. Cp_{salida}$$

Considerando que en el intervalo de temperaturas de trabajo el Cp del agua no varía significativamente, se lo toma como una constante. Luego, se despeja la temperatura final del agua:

$$T_{entrada.torre} = \frac{60^{\circ}C \cdot (m_{intercambiador\ 1} + m_{intercambiador\ 4} + m_{intercambiador\ 5}) + 35^{\circ}C \cdot m_{condensador}}{m_{intercambiador\ 1} + m_{intercambiador\ 4} + m_{intercambiador\ 5} + m_{condensador}}$$

La temperatura resultante es de **39,7 °C** y el caudal de agua total, teniendo en cuenta lo requerido en el condensador y los intercambiadores es de **1,67.10⁵ kg/h**.

5.5.6.3 - Selección de la torre

Del apartado anterior, se recopilan los parámetros operativos de la torre de enfriamiento. Se detallan en la *Tabla 5.29*.

Tabla 5.29 - Parámetros operativos de la torre de enfriamiento.

Temperatura de entrada [°C]	39,7
Temperatura de salida [°C]	30
Salto térmico [°C]	9,7
Temperatura de bulbo húmedo [°C]	25
Caudal de agua total [kg/h]	1,67.10 ⁵

Para seleccionar el equipo que se adapte a las condiciones, se utiliza el catálogo⁶⁴ y el método propuesto por la empresa GOHL™. El procedimiento de selección se detalla a continuación.

En base al salto térmico y el caudal operativo de agua se obtiene el calor Q_B :

$$Q_B = Cp_{agua} \cdot m_{agua} \cdot (T_{entrada} - T_{salida}) = 1880,9 \text{ kW}$$

Luego se obtiene el factor k_1 de los diagramas disponibles. Con el valor de k_1 se obtiene la potencia nominal, Q_N .

$$k_1 = 1,18 \quad ; \quad Q_N = Q_B / k_1 = 1594 \text{ kW}$$

Del catálogo se busca un equipo con igual o mayor Q_N . Se selecciona el equipo 2/28 Z con Q_N y flujo nominal de agua (G_N) igual a 1634 kW y 2,44.10⁵ kg/h, respectivamente. El siguiente paso es obtener k_2 . Para esto se debe dividir el caudal operativo entre el nominal e ingresar al diagrama correspondiente. El valor de k_2 obtenido es 1, aproximadamente, luego se obtiene el nuevo valor de Q_N como:

$$Q_N = Q_B / (k_1 \cdot k_2) = 1594 \text{ kW}$$

Como el nuevo valor de Q_N es menor que el del equipo, se da por finalizado el cálculo. En la *Tabla 5.30* se resumen los parámetros de la torre.

⁶⁴ Ref. N° 18

Tabla 5.30 - Parámetros operativos de la torre de enfriamiento.

Modelo	2/28 Z
Capacidad de enfriamiento nominal [kW]	1634
Caudal de agua nominal [kg/h]	$2,44 \cdot 10^5$
Salto térmico [°C]	9,7
Cantidad de ventiladores	2
Potencia absorbida por los ventiladores [kW]	12,3
Consumo eléctrico de los ventiladores [kW]	30

Bibliografía Capítulo 5

1. Ficha de Datos de Seguridad del Acetaldehído. Disponible en: <https://www.uv.mx/pozarica/cq/files/2021/02/3.-Acetaldehido.pdf>. Fecha de consulta: 8/11/22.
2. Ficha de Datos de Seguridad del Acetato de Etilo. Disponible en: <https://www.uv.mx/pozarica/cq/files/2022/04/3.-Acetato-de-Etilo.pdf>. Fecha de consulta: 8/11/22.
3. Çengel, Y., Boles, M., Obregón, México, 2011, "Termodinámica", 7° Edición.
4. Software desarrollado por el Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Ambiental de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Valladolid, España.
5. Cao, E., Buenos Aires, Argentina, 1983, "Intercambiadores de Calor", Apéndice 20, Pág. 152 y 153.
6. Catálogo de calderas pirotubulares de la marca Distral™. Disponible en: <http://www.delgadoyasociados.net/images/Distral%202019.pdf>
7. Catálogo de calderas de fluido térmico de la marca ATTSU™. <https://pdf.directindustry.es/pdf/attsu-termica-sl/calderas-fluido-termico-ft/37754-754226.html>
8. Bomba CRNE 1-25 PV-CA-A-V-HQQV de la marca Grundfos™. Disponible en: <https://product-selection.grundfos.com/ar/products/cr-cre-cri-crie-crn-crne-crt-crte/crne/crne-1-25-99386176?tab=variant-curves&pumpsystemid=1696705883>
9. Branan, C. (2005). Rules of thumb for chemical engineers: a manual of quick, accurate solutions to everyday process engineering problems, Gulf Professional, Amsterdam.
10. Catálogo de bombas centrífugas de la marca Flowserve™. Disponible en: <https://comquima.com/FitxersWeb/235323/c9362-bomba-sihi-sterling-ztnc-50200-aa-002-1b-2-de-segunda-mano.pdf>
11. Catálogo de sopladores, ventiladores y compresores para biogas, de la marca MaproBioGas™. Disponible en: https://maprint.com/wp-content/uploads/2021/03/Cod_0122_US_0918.pdf
12. Treybal, R. (2000). Operaciones de Transferencia de Masa (2a. ed.). Mexico: McGraw-HillInteramericana. p- 244.



CAPÍTULO VI

SUBPLANTA DE
LICUACIÓN DE HIDRÓGENO

6.1 - Objetivos

- Analizar las distintas maneras de almacenar el hidrógeno y seleccionar la más conveniente.
- Diseñar un ciclo de licuación de hidrógeno para su almacenamiento y posterior venta.

6.2 - Introducción

A pesar de que su utilización es una realidad, el hidrógeno presenta actualmente restricciones tecnológicas y económicas como, por ejemplo, sus elevados costes de producción, las dificultades en su almacenamiento o la seguridad en su manipulación, que pueden limitar un uso más extensivo y su participación en un futuro escenario energético.

Tal y como se mencionó en los capítulos anteriores, para que sea posible transportar y comercializar el hidrógeno es necesario realizarle un tratamiento previo que permita almacenarlo de manera segura.

En este capítulo, por un lado se detallan brevemente las distintas tecnologías existentes para su acondicionamiento y posterior almacenamiento y, por otro lado, se diseña un ciclo de licuefacción.

6.3 - Almacenamiento del hidrógeno

El hidrógeno es un combustible con elevada densidad de energía gravimétrica pero con baja densidad de energía volumétrica con respecto a otros combustibles. Esto tiene como resultado que, por unidad de volumen, el hidrógeno almacena menor cantidad de energía que otros vectores energéticos como, por ejemplo, el gas natural o el diésel; como consecuencia se necesitan enormes volúmenes de hidrógeno para proveer de energía a procesos de alta demanda. Por este motivo, la investigación sobre almacenamiento de hidrógeno es en estos momentos muy intensa con el objeto de encontrar sistemas que permitan almacenar la mayor cantidad de hidrógeno en el menor volumen posible.

Las distintas alternativas posibles para el almacenamiento de hidrógeno son las siguientes:

- Tanques de almacenamiento de hidrógeno comprimido,
- Tanques de almacenamiento de hidrógeno líquido criogénico,
- Materiales en estado sólido: hidruros metálicos y nanoestructuras de carbono.

A continuación se describen brevemente cada una de las alternativas mencionadas, junto con sus ventajas y desventajas.

6.3.1 - Hidrógeno comprimido

El almacenamiento del hidrógeno en forma de gas presurizado es el método más habitual y el más desarrollado, ya que aprovecha el efecto que tiene la compresión sobre el volumen del gas. No obstante, comprimir hidrógeno supone un considerable consumo de energía, el cual se incrementa cuanto mayor es la presión final. Para comprimir 1 kg de hidrógeno desde la presión atmosférica hasta presiones entre 200 - 800 bar con un compresor multietapas se requiere entre 10 y 17 MJ, respectivamente; a modo de ejemplo, el metano se puede comprimir con un consumo de energía hasta siete veces inferior.

Una vez presurizado, el hidrógeno se almacena en depósitos cilíndricos similares a los utilizados con el gas natural comprimido. La mayoría de estos depósitos consisten en una estructura cilíndrica con casquetes esféricos en los extremos. En cada casquete hay aberturas que permiten el flujo saliente o entrante del gas y válvulas para el control del flujo.

Los depósitos para hidrógeno comprimido se fabrican con materiales de alta resistencia para asegurar su durabilidad. Sin embargo, su diseño no está totalmente optimizado: tienen un gran volumen y presentan todavía problemas de seguridad. Dados los problemas que implica la utilización de hidrógeno a presiones tan elevadas, los requerimientos del depósito, desde el punto de vista de sus propiedades mecánicas, deben ser muy estrictos. Los depósitos, por tanto, deben ser ligeros y muy resistentes. Por ello, los prototipos actuales se construyen con materiales compuestos de fibras de vidrio, fibras de carbono y aluminio y, según dicha composición, se clasifican en los cinco tipos que se resumen en la *Tabla 6.1*.

Tabla 6.1. Tipos de tanque para almacenar hidrógeno gaseoso.

Tipo de tanque	Presión máxima (bar)	Construcción	Aplicaciones
Tipo I	300	Acero o aluminio	Aplicaciones estacionarias (laboratorios, uso en industria química)
Tipo II	200	Aluminio recubierto parcialmente con fibra de vidrio	Aplicaciones estacionarias (hidrogeneras)
Tipo III	700	Aluminio recubierto completamente con fibra de vidrio	Aplicaciones móviles (vehículos con celdas de combustible)
Tipo IV	1000	Únicamente fibra de carbono	Investigación, industria aeroespacial

En la *Figura 6.1* se muestra una configuración típica de un tanque de almacenamiento Tipo IV.

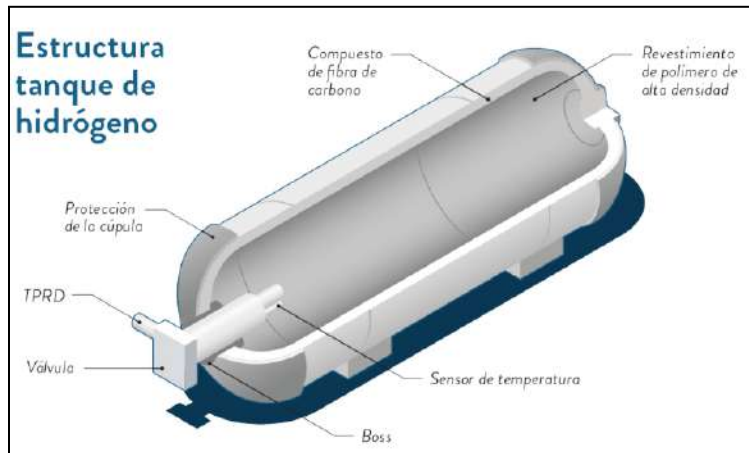


Figura 6.1 Esquema de un tanque típico para almacenamiento de hidrógeno comprimido.

La principal limitación de este tipo de almacenamiento es el gran volumen ocupado y el peso del equipo. Un sistema de almacenamiento de hidrógeno gaseoso a una presión de 250 bar pesa casi cuatro veces y ocupa más de cuatro veces el espacio de un sistema de almacenamiento de hidrógeno líquido. El aumento de la presión del gas reduce el volumen de almacenamiento necesario pero requiere de depósitos más robustos. No obstante, la relación entre el peso total del sistema y el volumen de hidrógeno apenas cambia. Este exceso de volumen supone un gran inconveniente cuando el espacio disponible es limitado, concretamente en aplicaciones móviles.

6.3.2 - Hidrógeno líquido

El hidrógeno líquido presenta una densidad gravimétrica y energética muy superior a la del hidrógeno en estado gaseoso. Así, con la licuefacción del hidrógeno se logra una reducción de volumen mayor que en la compresión, superándose la mayoría de los problemas relacionados con el peso y el tamaño de los sistemas de almacenamiento de gas. Sin embargo, el hidrógeno líquido solo existe por debajo de los $-240\text{ }^{\circ}\text{C}$, y alcanzar temperaturas criogénicas incorpora bastante complejidad al proceso.

El almacenamiento del hidrógeno líquido a tan bajas temperaturas se realiza en depósitos aislados mediante vacío llamados Dewar o bien en tanques de doble capa que contienen otro

fluido criogénico intermedio, materiales aislantes, o simplemente un espacio en donde se realiza vacío. En cualquier caso se debe minimizar cualquier transferencia de calor entre el hidrógeno líquido contenido y el entorno. A menudo los tanques para el almacenamiento estacionario de hidrógeno líquido son esféricos, ya que esta geometría ofrece la mínima superficie para un volumen determinado y, por lo tanto, una menor área de transferencia de calor del ambiente hacia el tanque. No obstante, es imposible almacenar hidrógeno en forma líquida indefinidamente. Incluso el mejor aislamiento no impide que se transfiera algo de calor desde el ambiente, provocando la evaporación de parte del hidrógeno y el aumento de la presión del tanque.

Aunque los sistemas de almacenamiento de hidrógeno líquido eliminan el peligro asociado con las altas presiones del hidrógeno comprimido, conllevan ciertos riesgos relacionados con las bajas temperaturas. Uno de ellos es el riesgo de quemaduras por frío por contacto con el hidrógeno líquido, sus vapores y las superficies de los depósitos. Además, el acero al carbono, sometido a temperaturas por debajo de $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$, directa o indirectamente, se fragiliza, siendo más sensible a las fracturas. Por último, si las superficies de tuberías y depósitos no están bien aisladas, el aire del ambiente puede condensar sobre ellas, generando una alta concentración de oxígeno que supone un elevado riesgo de incendio o explosión si cae sobre un material combustible.

El proceso de recarga de los tanques criogénicos no es un problema en sí; sin embargo, se necesita que las líneas estén termostatzadas y, por lo tanto, la necesidad de sistemas de refrigeración y compresores hacen que el proceso global sea más complicado que el almacenamiento de hidrógeno comprimido. No obstante, el almacenamiento criogénico comparado con el almacenamiento de gas comprimido presenta la ventaja de que la presión de trabajo es relativamente baja y además los volúmenes requeridos para almacenar la misma cantidad de hidrógeno son mucho menores. Aún así los sistemas de almacenamiento de hidrógeno líquido pueden ser de cuatro a diez veces más grandes y pesados que un depósito equivalente de diésel.

6.3.3 - Hidrógeno sólido

Se utiliza esta denominación para los sistemas de almacenamiento en los que el hidrógeno gaseoso pasa a formar parte de la composición molecular de un compuesto sólido, bien por reacción y adsorción, como en el caso de los hidruros metálicos, o bien únicamente por adsorción como en los compuestos orgánicos.

Los sistemas de almacenamiento por hidruros metálicos se basan en el principio de que ciertos metales, en condiciones de alta presión y temperaturas moderadas, absorben hidrógeno gaseoso formando hidruros metálicos. Cuando estos hidruros metálicos se calientan a baja presión, se libera el hidrógeno. En resumen, estos metales absorben y expelen hidrógeno como si fueran esponjas.

Las ventajas de los sistemas de almacenamiento por hidruros metálicos giran en torno a que el hidrógeno se convierte en parte de la estructura química del metal por sí mismo y, por lo tanto, no requieren de altas presiones o de temperaturas criogénicas para funcionar. Puesto que el hidrógeno es liberado desde el hidruro a bajas presiones, este tipo de almacenamiento es intrínsecamente el más seguro de todos.

Existen muchas clases de hidruros metálicos aunque todos se basan en aleaciones metálicas de magnesio, níquel, hierro y titanio. En general, los hidruros metálicos se dividen entre los de alta y baja temperatura de desorción.

Los hidruros de alta temperatura son más económicos y almacenan más hidrógeno que los hidruros de baja temperatura, pero requieren gran cantidad de calor con el fin de liberar el hidrógeno. Por el contrario, las bajas temperaturas de desorción de algunos hidruros pueden ser un problema ya que el gas se libera demasiado fácilmente en condiciones ambientales. Para solucionar este problema, los hidruros de baja temperatura deben ser presurizados, lo que aumenta la complejidad del proceso. En ocasiones se utilizan mezclas de hidruros de baja y alta temperatura para mantener algunas de las ventajas inherentes a cada tipo y reducir los inconvenientes.

Además de la temperatura a la que se libera el hidrógeno, otro aspecto crítico es el peso del sistema. Incluso los mejores hidruros metálicos contienen solo un 8 % de hidrógeno en peso y, por lo tanto, tienden a ser pesados y costosos. Una limitación de los sistemas de almacenamiento por hidruros metálicos es que deben cargarse con hidrógeno de alta pureza o, por el contrario, se contaminarían con la correspondiente pérdida de capacidad. En este sentido, el oxígeno y el agua son los principales competidores del hidrógeno puesto que se adsorben químicamente sobre la superficie de los metales impidiendo el posterior enlace químico con el hidrógeno. La capacidad de almacenamiento perdida por dicha contaminación puede ser reactivada en cierta medida con calor.

Otro problema asociado con los hidruros metálicos se refiere a su estructura: estos compuestos normalmente se producen en forma de granos o de polvo para aumentar la superficie disponible para el almacenamiento del gas, y este material particulado es muy sensible al desgaste, lo que reduce su rendimiento además de poder ocasionar el taponamiento de conductos y en el peor de los casos de los sistemas de seguridad.

Debido a la mayor información y simplicidad asociada al almacenamiento del hidrógeno en estado gaseoso y líquido, se seleccionan estas dos alternativas para comparar. Se descarta del análisis el almacenamiento de hidrógeno en estado sólido.

6.3.4 - Comparación entre los sistemas de almacenamiento

Como se mencionó, sólo se tendrán en cuenta para el análisis los métodos de almacenamiento de hidrógeno comprimido y licuado. A continuación, en la *Tabla 6.2* se resumen las ventajas y desventajas de ambos métodos.

Tabla 6.2. Ventajas y desventajas de los métodos de almacenamiento de H₂.

Método	Ventajas	Desventajas
Hidrógeno comprimido	<p>-Es la tecnología con más experiencia, almacenamiento estacionario a 50 bar y almacenamiento en transporte (350 y 700 bar). De esta forma se puede transportar por carretera, ferrocarril, barco, avión y gasoductos. El almacenamiento subterráneo resulta lo más económico.</p>	<p>-A bajas presiones, la cantidad de hidrógeno almacenado es pequeña.</p> <p>-La compresión del hidrógeno hasta 350 bar consume alrededor del 20 % de la energía contenida en el hidrógeno.</p> <p>- La energía por unidad de volumen almacenada es mucho menor que en los combustibles fósiles líquidos.</p> <p>- Los contenedores o cilindros son pesados.</p>
Método	Ventajas	Desventajas
Hidrógeno líquido	<p>- Amplio conocimiento de la tecnología.</p> <p>- Un tanque estándar almacena más cantidad de hidrógeno que el hidrógeno comprimido a 700 bar.</p> <p>- Es el método más económico para almacenamiento a largo plazo.</p>	<p>-La licuación (enfriamiento a 20 K) es un proceso que consume entre el 30-40 % de la energía contenida en el hidrógeno.</p> <p>-Problemas de eficiencia y seguridad del proceso por la evaporación flash.</p> <p>-La energía almacenada por unidad de volumen es menor que en los combustibles fósiles líquidos.</p> <p>- Requiere una elevada pureza a la entrada (>99,99 %)</p>

En la *Tabla 6.3* se presentan los parámetros más significativos de los dos métodos de almacenamiento de hidrógeno seleccionados.

Tabla 6.3. Parámetros comparativos para ambos métodos propuestos⁶⁵.

Método	Hidrógeno comprimido	Hidrógeno licuado
Temperatura (°C)	Ambiente	-253
Presión (bar)	350-700	1
Capacidad volumétrica (kg _{H2} /L)	20-40	70
Coste del sistema (USD/kWh)	12-16	6
Problemas de seguridad	Altas presiones	Bajas temperaturas

Como se puede observar en la *Tabla 6.3*, el hidrógeno licuado, a pesar de tener sus desventajas, presenta notables mejoras en los parámetros referidos al almacenamiento por unidad de volumen, costo total y presión de operación. **Se decide continuar el análisis con la licuación como método de almacenamiento**, debido a sus múltiples ventajas frente a la compresión.

6.4 - Licuación - métodos

El proceso de licuefacción consiste en la transformación de gas a líquido mediante la modificación de condiciones de presión y temperatura, en un ciclo termodinámico. Este ciclo utiliza una combinación de intercambiadores de calor, compresores y una válvula de expansión Joule-Thomson (ver *Sección 6.5.2*), para lograr el enfriamiento necesario y producir algo de líquido. El líquido se elimina y el gas enfriado se devuelve al compresor a través de los intercambiadores de calor. Existen varios ciclos termodinámicos para la licuefacción, pero en este apartado se detallan los más relevantes a nivel industrial. En particular, se detallan los ciclos de Linde-Hampson simple, Linde-Hampson con pre-enfriamiento, y de Claude.

⁶⁵ Ref. N° 1

6.4.1 - Ciclo de Linde-Hampson simple

El ciclo de Linde-Hampson simple consiste en el ciclo de licuación más sencillo pero, a pesar de su simplicidad, no sirve para licuar el hidrógeno debido a que no permite alcanzar la temperatura criogénica de almacenamiento (20 K). Sumado a esto, no es eficiente desde el punto de vista energético debido a la gran cantidad de energía que hay que suministrar. Sin embargo, es necesario conocerlo en detalle, debido a que a partir de este ciclo se desprenden los demás, de mayor complejidad.

Este ciclo consiste en un compresor, un intercambiador de calor, una válvula de expansión Joule-Thomson, y un tanque reservorio. En la *Figura 6.2* se muestra un esquema tecnológico del ciclo junto con su representación en el diagrama temperatura-entropía.

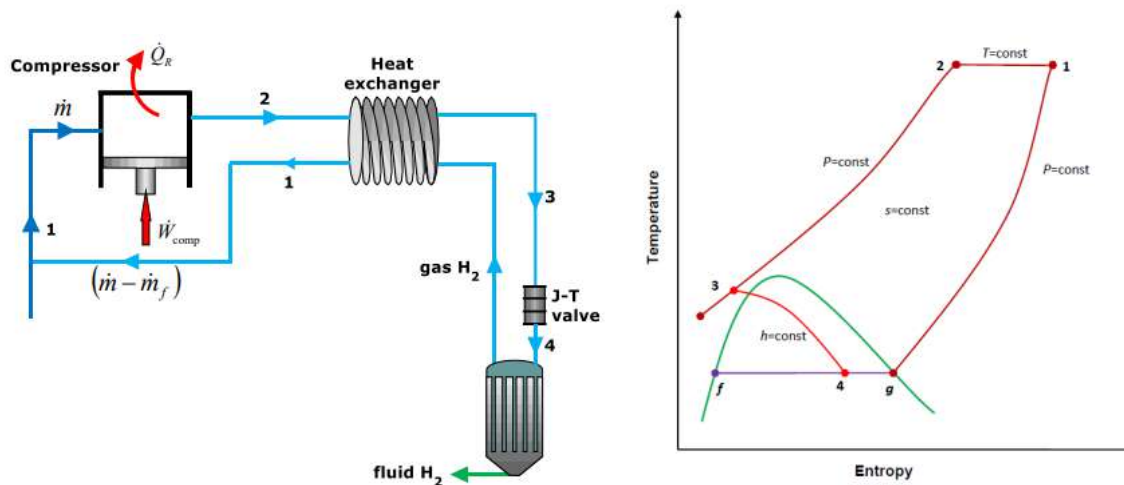


Figura 6.2 - a) Diagrama tecnológico del ciclo Linde-Hampson simple y b) Representación en el diagrama T-s.

En el estado 1, el gas de entrada se mezcla con el gas de retorno. Esta mezcla se comprime isotérmicamente hasta el estado 2. Luego, el gas a alta presión se enfría en el intercambiador de calor, con la porción de gas de retorno, y luego se expande en la válvula de expansión. La fracción líquida se recoge en el tanque reservorio y la fracción de vapor se retorna al sistema, cerrando el ciclo.

6.4.2 - Ciclo de Linde-Hampson con pre-enfriamiento

El ciclo de Linde-Hampson simple, como se mencionó, no es eficiente. Una alternativa para mejorar la eficiencia energética y el desempeño del ciclo es el ciclo de Linde-Hampson con pre-enfriamiento. Esto se da al disminuir la temperatura de entrada al intercambiador de calor principal. El enfriamiento se logra mediante un fluido refrigerante auxiliar, normalmente amoníaco o nitrógeno. En la *Figura 6.3* se muestra un esquema tecnológico de este ciclo junto con su representación en el diagrama T-S.

El análisis termodinámico del ciclo puede hacerse de manera similar al caso del ciclo simple, con algunas modificaciones. Ahora, la mezcla de gases a la entrada, luego de la compresión, pasan por un primer intercambiador de calor, con fluido refrigerante, y luego pasan por el intercambiador principal del ciclo.

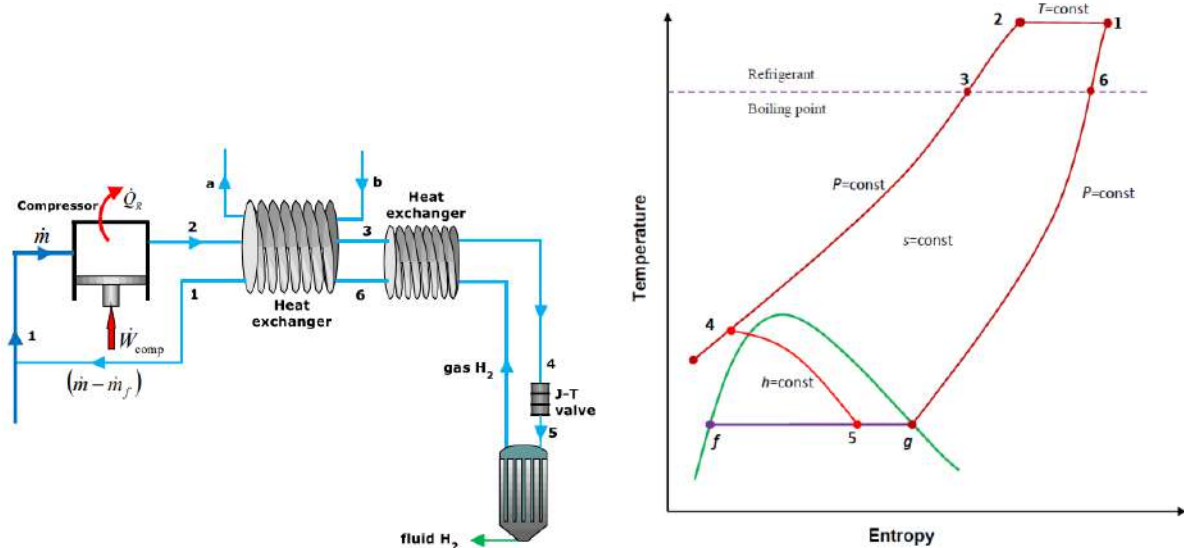


Figura 6.3. a) Diagrama tecnológico del ciclo Linde-Hampson con pre-enfriamiento y
b) Representación en el diagrama T-s.

La ventaja de este ciclo con respecto al de Linde-Thompson simple es que posee un mejor rendimiento termodinámico. Sin embargo, su desventaja principal es que se debe contar con un circuito secundario para el fluido refrigerante.

6.4.3 - Ciclo de Claude

La válvula de expansión del ciclo es deseable desde el punto de vista económico del proceso, debido a su simplicidad, pero no lo es desde el punto de vista termodinámico, debido a que actúa de manera irreversible. Este ciclo propone la utilización de una turbina de expansión, además de la válvula, para poder remover la energía del gas y producir algo de trabajo. En la *Figura 6.4* se muestra un diagrama de este ciclo y su representación en el diagrama T-S.

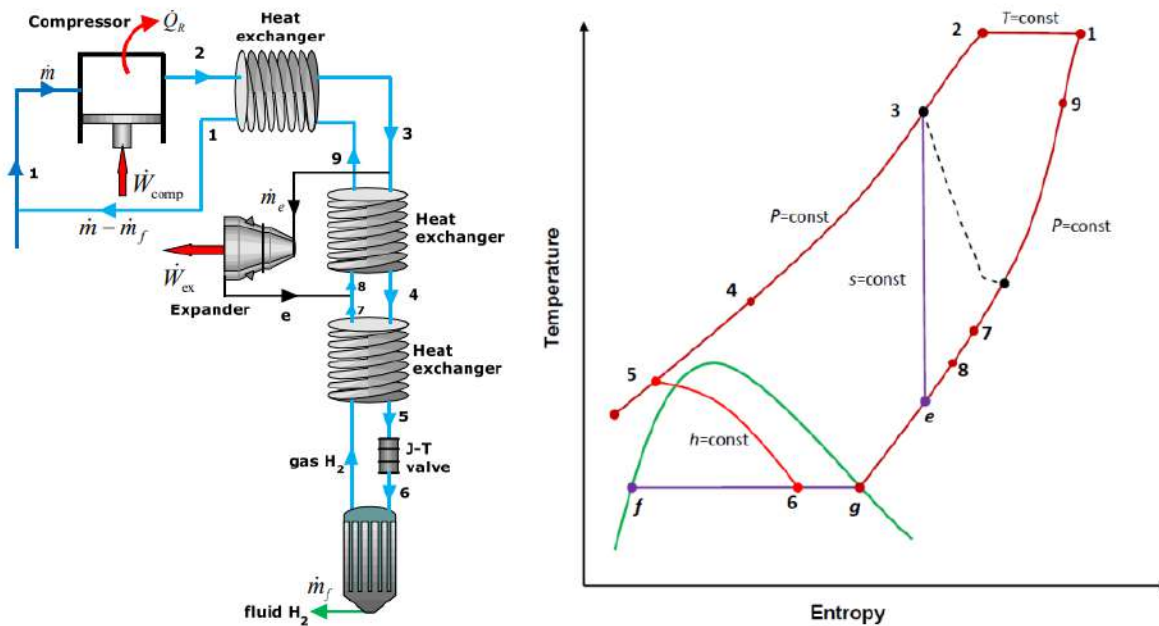


Figura 6.4. a) Diagrama tecnológico del ciclo de Claude y b) Representación en el diagrama T-s.

Este ciclo, si bien tiene más equipos, presenta el mayor rendimiento termodinámico, junto con la mayor recuperación de líquido, respecto a los casos anteriores. **Se selecciona este ciclo para continuar con el análisis.** En la *Sección 6.5.2* se detalla en profundidad el análisis termodinámico del ciclo junto con la selección de las condiciones operativas óptimas.

6.5 - Diseño de la subplanta

6.5.1 - Purificación de la corriente de hidrógeno

Uno de los aspectos a considerar previo al diseño del ciclo de licuefacción, es la pureza de la corriente de entrada al sistema. Como se trató en el *Capítulo 4*, la corriente de hidrógeno que abandona el absorbedor por el tope se encuentra purificada en un 99,6 %, aproximadamente. Esta es la máxima pureza que se puede obtener dadas las condiciones de operación de esa torre. Para poder ingresar al ciclo de licuefacción es necesario que esta corriente se encuentre con una pureza del 99,99 % o superior, debido a que las temperaturas alcanzadas son muy bajas (-253 °C aproximadamente) y esto provocaría que las impurezas se solidifiquen, obstruyendo las cañerías y los equipos de intercambio de calor involucrados en el proceso. Por lo tanto, es sumamente importante purificar a la corriente de hidrógeno hasta el valor de pureza indicado, a fin de realizar un diseño adecuado que permita prolongar la vida útil de los equipos que componen el ciclo.

En lo que respecta a la purificación del hidrógeno, se destacan tres métodos principales: separación por medio de membranas, destilación criogénica y adsorción por cambio de presión. A continuación se resume brevemente cada uno de ellos.

6.5.1.1 - Membranas

En este método, como su nombre lo indica, se utiliza una membrana como método de separación. A la corriente que se desea purificar se la hace pasar por la membrana y por acción de distintas fuerzas impulsoras, ya sea una diferencia de presión, de concentración o de potencial eléctrico, se separan, selectivamente, aquellos compuestos no deseados. De esta manera se obtiene, por un lado, una corriente rica en hidrógeno, llamada permeado, y una corriente rica en impurezas, que se denomina retenido o concentrado. En la *Figura 6.5* se muestra un esquema típico de una membrana.

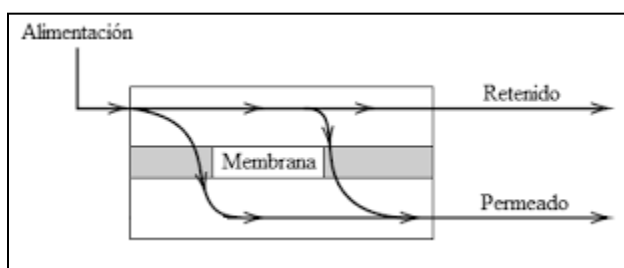


Figura 6.5 - Representación esquemática típica de una membrana.

La principal ventaja de esta tecnología es la obtención de gases de alta pureza. Otras ventajas son su fácil operación, su compacidad y portabilidad. Adicionalmente, este proceso es fácilmente combinable con otras operaciones de separación⁶⁶. Pese a las ventajas de operación que supone, esta tecnología no está casi aplicada a nivel industrial, con excepción de un tipo de membrana, como se menciona más adelante en este apartado. No obstante, durante los últimos años se ha implementado en diversas operaciones de separación de gases.

Una parte fundamental en el diseño de membranas es la elección de su material ya que esto determina gran parte del coste económico, no solo en su inversión a la hora de fabricarse, sino en su operación. En función del material y su eficiencia para la separación, varía la cantidad de pasos por la membrana que se deben realizar para conseguir una separación deseada. Aunque existen varios tipos de membranas, las dos más empleadas son:

- **Membranas de paladio:** son las de mejor calidad, al presentar una permeabilidad del hidrógeno mucho más elevada que el resto de componentes gaseosos. Está formada por una aleación de paladio, generalmente con una composición de en torno al 90 %, y otro elemento metálico como plata o cobre. Consiguen purezas y recuperaciones muy altas, superiores al 99,999 % y 99 % respectivamente. Su rango de aplicación está restringido a la pequeña y mediana escala, y actualmente no se cuenta con este tipo de tecnología para la purificación del hidrógeno a escala industrial.
- **Membranas poliméricas:** suelen estar compuestas por varias capas de polímero y son más resistentes a la humedad, además de ser más baratas. Los materiales de preparación más utilizados habitualmente son el poliestireno y el polimetilmetacrilato. Son ampliamente utilizados a nivel industrial y permiten alcanzar purezas del hidrógeno de hasta un 98 %, con recuperaciones en torno al 95 %⁶⁷.

⁶⁶ Ref. N° 2

⁶⁷ Ref. N° 3

6.5.1.2 - Destilación criogénica

Este método se basa en la destilación de una mezcla de gases a muy bajas temperaturas, de entre -150 °C y -200 °C. Se centra en la separación de los compuestos en función de los distintos puntos de ebullición, con lo que las condiciones de operación dependen de la mezcla a separar. El hidrógeno, al tener un punto de ebullición significativamente más bajo que el resto de componentes (-253 °C aproximadamente), permanece en estado gaseoso, mientras que los demás compuestos condensan. De esta manera puede conseguirse una pureza del hidrógeno elevada.

Con respecto a su uso para separar hidrógeno a nivel industrial, actualmente no se encuentra muy desarrollado, debido a sus elevados costos de inversión y de operación, al trabajar con temperaturas tan bajas. Aunque este método presenta una alta recuperación de hidrógeno, existen otros métodos que logran una pureza superior. Por lo general la pureza alcanzada se encuentra en torno al 98 % con recuperaciones del 95 %⁶⁸.

6.5.1.3 - Adsorción por cambio de presión (PSA)

La adsorción por cambio de presión, comúnmente conocido como PSA por sus siglas en inglés (Pressure Swing Adsorption) es una tecnología basada en el fenómeno físico de la adsorción, como su nombre lo indica. Durante el proceso PSA se logra la purificación del hidrógeno reteniendo las impurezas que lo acompañan en un lecho de partículas adsorbentes. La clave del proceso reside en la influencia que la presión tiene sobre el proceso de adsorción. Este sistema se compone de varios lechos de adsorción, entre 2 y 10, en los cuales se hace pasar la corriente a purificar. En función de la presión de operación, se tienen procesos de adsorción o de desorción, por lo que se operan de manera alternada para tener, a la salida, un flujo constante de hidrógeno con la pureza deseada. Opera, generalmente, a presiones entre 10 y 40 bar y temperaturas entre los 0 a 60 °C. Este método es el más empleado a nivel industrial para la purificación del hidrógeno, logrando obtener purezas de hasta el 99,999 % y recuperaciones cercanas al 90 %⁶⁹. En la *Figura 6.6* se muestra una configuración típica de un sistema de este tipo.

⁶⁸ Ref. N° 4

⁶⁹ Ref. N° 5

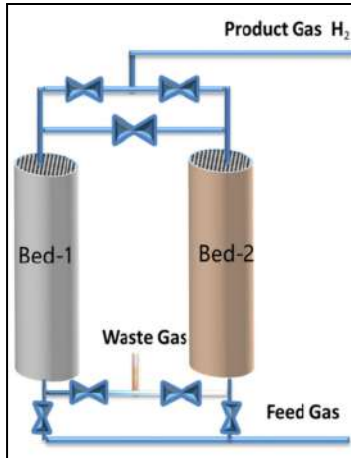


Figura 6.6 - Representación típica de un sistema PSA.

La secuencia de etapas que se llevan a cabo en el sistema se puede resumir de la siguiente manera:

- **Adsorción:** La adsorción tiene lugar a alta presión (entre 10 y 40 bares). La mezcla de gases pasa por el lecho de adsorbente. El adsorbente atrapa las moléculas de gas fácilmente adsorbibles, mientras que las moléculas de gas que no son fácilmente adsorbibles o no lo son en absoluto pasan a través del lecho. El lecho adsorbente sigue reteniendo moléculas de gas hasta que alcanza su capacidad máxima.
- **Despresurización:** La despresurización es el primer paso de la regeneración (desorción) del lecho adsorbente. A medida que la presión desciende, las moléculas de gas del lecho adsorbente se liberan y el gas resultante se descarga del depósito de adsorción. Este gas se conoce como “gas de cola” y sirve como combustible. Normalmente abandona el proceso a la presión atmosférica.
- **Purga:** El lecho adsorbente se purga con el gas de cola para regenerarlo completamente.
- **Represurización:** La represurización se hace con la mezcla de gases hasta que se restablecen las condiciones del proceso de adsorción.

La secuencia mencionada anteriormente se da de manera cíclica en todos los adsorbedores, de forma alternada, de manera de obtener un flujo constante del gas purificado a la salida.

A continuación se resumen las características principales de los métodos de purificación propuestos, en la *Tabla 6.4*:

Tabla 6.4 - Resumen de las principales tecnologías para purificar hidrógeno.

Método		Pureza alcanzada (%)	Recuperación de hidrógeno (%)	Aplicación
Membranas	Poliméricas	92 - 98	> 85	Gran escala. Aplicaciones industriales
	De Paladio	> 99,9999	Hasta 99	Pequeña escala. Aplicaciones en laboratorio.
Destilación criogénica		90 - 98	95	Gran escala. Aplicaciones industriales.
Adsorción por cambio de presión (PSA)		99,999	80 - 90	Gran escala. Aplicaciones industriales.

Antes de seleccionar el método más conveniente para la purificación del hidrógeno es necesario recordar que el nivel de pureza a alcanzar para ingresar al circuito de refrigeración es de, al menos, del 99,99 %. Por lo tanto se descartan rápidamente los métodos de destilación criogénica y membranas poliméricas, debido a que la pureza alcanzada no es suficiente.

Entre las opciones restantes, se descartan las membranas de paladio debido a su imposibilidad de utilizarlas a escala industrial. Se selecciona, entonces, un **sistema de adsorción por cambio de presión (PSA)** para purificar a la corriente de hidrógeno que ingresa a la subplanta.

En la *Sección 6.6* se detallan las cuestiones acerca de su selección. Se define una **presión de entrada al sistema de 15 bar, y una temperatura de 30 °C**. En el apartado correspondiente se profundiza acerca de la selección de estas variables.

Como no es posible contar con las caídas de presión que sufre el gas al atravesar el lecho, con fines prácticos se supone que la presión de salida de la corriente de hidrógeno purificada es la misma que la presión de operación, 15 bar. Respecto a la temperatura, el proceso no indica que hay un cambio sustancial en esta variable, por lo que se supone que también permanece constante e igual a la de operación, 30 °C. Con respecto a la recuperación, se asume una recuperación promedio dentro del rango informado por el fabricante, del 85 %. Finalmente, quedan definidas las propiedades de la corriente de salida del sistema PSA. En estas condiciones ingresa el gas al ciclo de licuefacción. Se resumen en la *Tabla 6.5*:

Tabla 6.5. Propiedades de la corriente de salida del sistema PSA.

Caudal másico [kg/h]	74,24
Temperatura [°C]	30
Presión [bar]	15
Pureza [%]	99,9999

6.5.2 - Ciclo de licuefacción

Como se mencionó en la *Sección 6.4*, el ciclo elegido para realizar el proceso de licuefacción es el ciclo de Claude, debido a que presenta el mejor rendimiento líquido, frente a los otros ciclos. A continuación, en la *Figura 6.7*, se presenta el diagrama de flujo propuesto, con sus respectivas modificaciones para adaptarlo a las condiciones del proceso. En las siguientes secciones se indagará acerca de las condiciones de operación y la configuración óptima, por lo que este esquema puede modificarse.

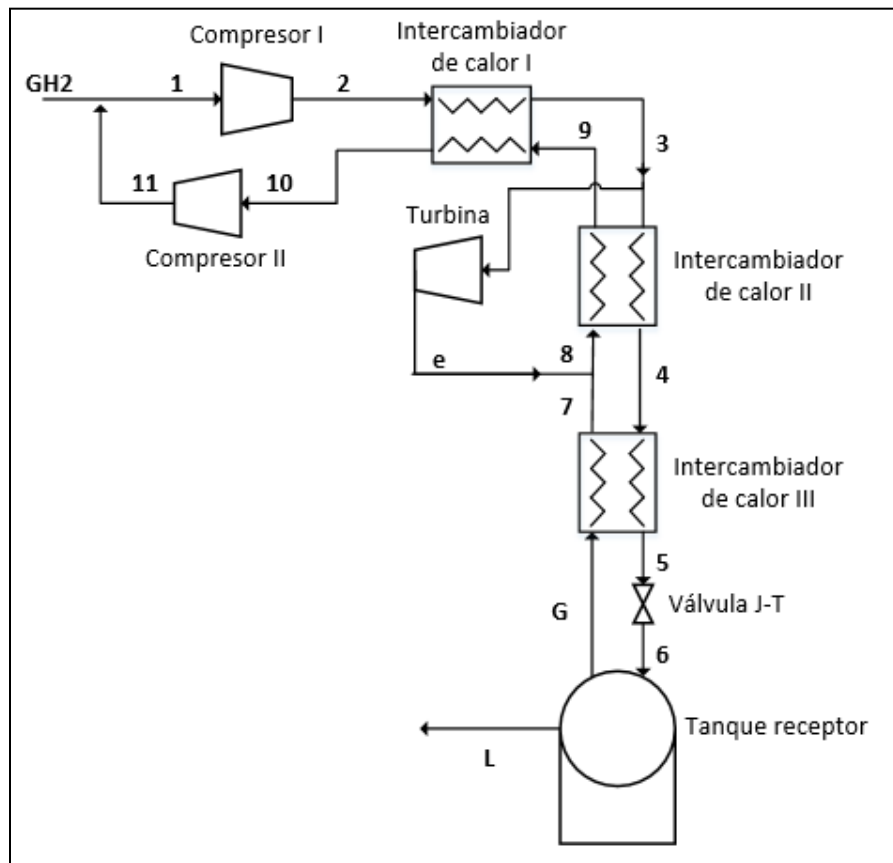


Figura 6.7 - Diagrama tecnológico preliminar del ciclo de licuefacción propuesto.

En forma resumida, el ciclo se desarrolla de la siguiente manera: el gas de entrada se combina con el gas de retorno, y la corriente resultante se comprime en forma isotérmica (idealmente). Luego la corriente pasa por un intercambiador de calor para enfriarse, a presión constante. Posteriormente se separa una fracción z del gas y se envía a una turbina de expansión. La fracción remanente continúa avanzando por los intercambiadores de calor restantes y luego ingresa a la válvula de expansión J-T. Aquí, el líquido subenfriado se expande, provocando su enfriamiento y una disminución en la presión. La corriente abandona la válvula como mezcla líquido-vapor, que luego ingresa al tanque reservorio. Allí se almacena la fracción líquida y se

retorna la fracción gaseosa al ciclo. Esta corriente de retorno, debido a que se encuentra a la mínima temperatura del sistema, sirve como fluido frío en los intercambiadores de calor II y III (ver *Figura 6.7*). Antes de entrar al segundo intercambiador, esta corriente se mezcla con la fracción z expandida en la turbina con el objetivo de enfriarla parcialmente y luego atraviesa los intercambiadores restantes. Como último elemento, un compresor aumenta la presión de la corriente hasta la presión de entrada, cerrando así el ciclo.

6.5.2.1 - Elementos del ciclo

6.5.2.1.1 - Válvula Joule-Thomson

El equipo crítico en este ciclo es la válvula de expansión Joule-Thomson. Esta válvula lleva su nombre debido al efecto J-T, que describe el cambio de temperatura de un gas o líquido real cuando se lo hace pasar a través de una válvula o un sólido poroso mientras se lo mantiene aislado para que no se intercambie calor con el medio ambiente. El fluido sufre una caída de presión isoentálpica, lo cual provoca una disminución de su temperatura. Este fenómeno se produce debido al coeficiente de Joule-Thomson variable, que se puede describir mediante la siguiente ecuación:

$$\mu_{J-T} = \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_h$$

En general, para todos los fluidos este coeficiente es positivo, provocando que el efecto generado sobre el fluido durante la expansión sea de enfriamiento. Sin embargo, hay algunas excepciones. En particular para el hidrógeno, este coeficiente puede ser negativo, provocando el efecto contrario, es decir, de calentamiento. Debido a que este coeficiente varía según la presión y temperatura de entrada, es necesario establecer los rangos de estas variables para que sea positivo, y poder lograr el efecto deseado en el ciclo. En la *Figura 6.8* se muestra la curva de inversión para el hidrógeno a diferentes temperaturas y presiones⁷⁰. La pendiente de la línea tangente en la curva presenta el valor del coeficiente de Joule-Thomson a cualquier temperatura y presión.

⁷⁰ Ref. N° 6

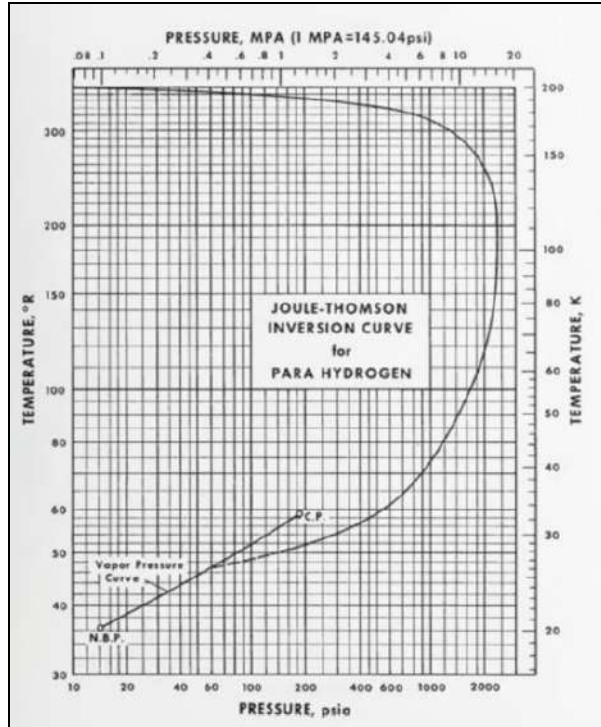


Figura 6.8 - Curva de expansión Joule-Thomson para el hidrógeno. Extraído de Ref N° 6.

Como puede apreciarse, el coeficiente J-T invierte su signo para temperaturas de entrada menores a los 100 K y a medida que la temperatura sigue disminuyendo, la presión de entrada también puede ser menor, alcanzando valores cercanos a la presión atmosférica. También puede notarse que el valor de la pendiente es máximo para los 100K y 18 MPa, y varía cada vez menos conforme disminuyen estas variables.

En la *Figura 6.9* es posible observar el efecto deseado para el hidrógeno en el ciclo: al disminuir drásticamente la presión del fluido, se da un efecto de enfriamiento. En este caso, el coeficiente J-T es positivo.

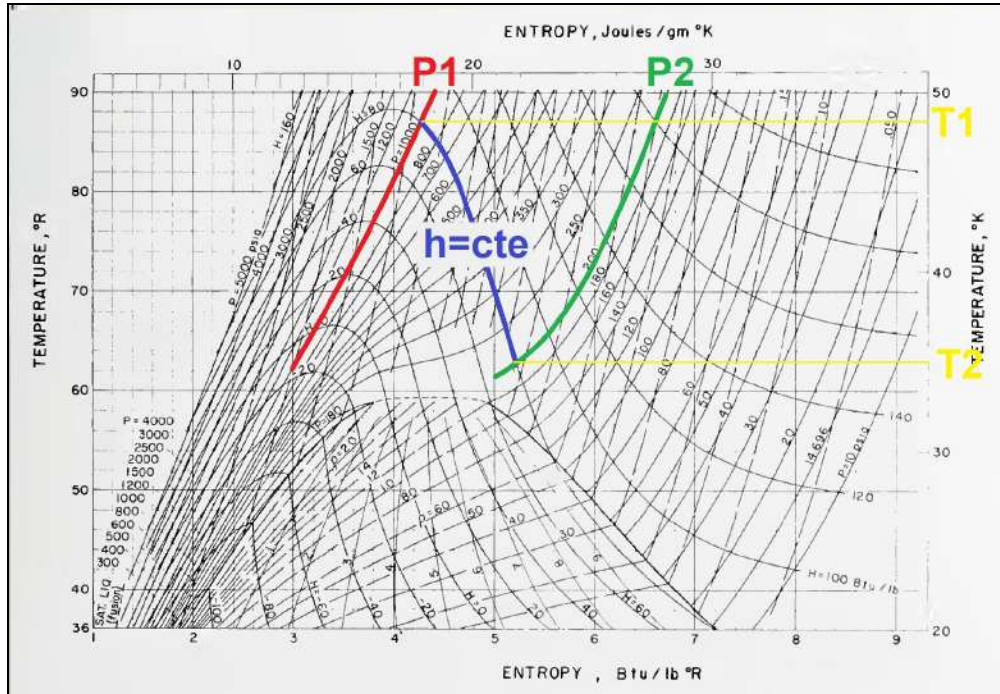


Figura 6.9 - Efecto de enfriamiento Joule-Thomson en diagrama T-S del hidrógeno.

Sin embargo, para igual temperatura, si la presión es muy alta, al descomprimir puede producirse un aumento en la temperatura. En este caso, el coeficiente es negativo, lo que provoca el efecto contrario al deseado. Este efecto se ilustra en la Figura 6.10.

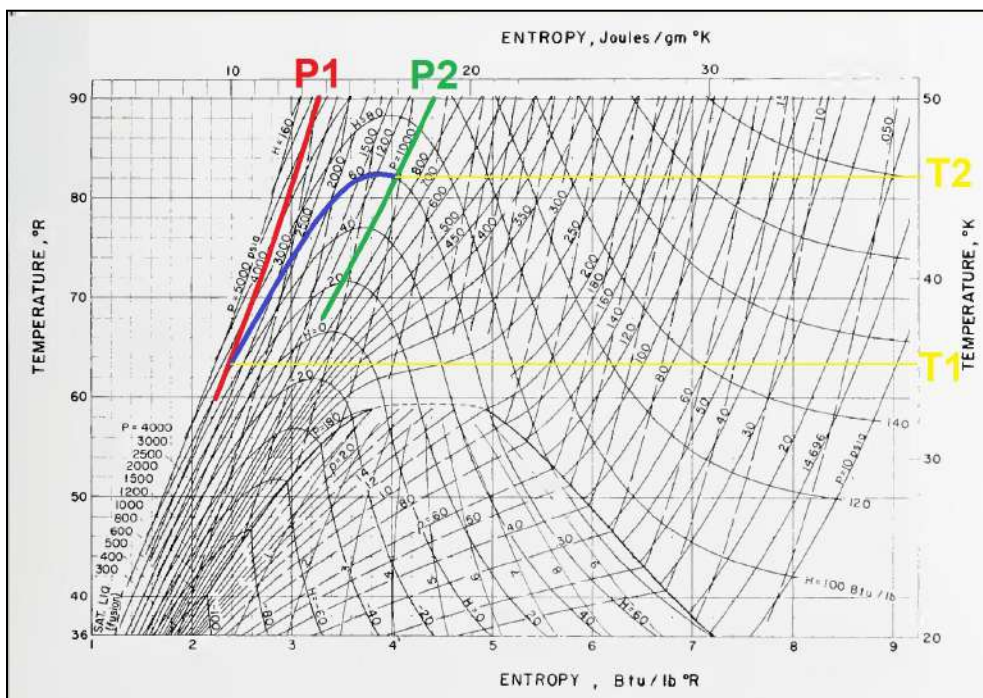


Figura 6.10 - Efecto de calentamiento Joule-Thomson en diagrama T-S del hidrógeno.

El objetivo de incorporar la válvula de Joule-Thompson al sistema es obtener una fracción de hidrógeno líquido a su salida; esta fracción depende de las condiciones de entrada y de salida de la válvula. En todos los casos las condiciones a la salida deben corresponder a las de saturación y, a su vez, mientras más cercana sea la entalpía de la mezcla en la salida a la del gas saturado, mayor será la fracción de líquido obtenida.

$$\text{Fracción líquida} = x = \frac{h_G - h_{mezcla}}{h_G - h_L}$$

Condiciones de entrada

En la *Figura 6.11* se representa la fracción líquida en función de la presión de entrada para diferentes temperaturas de entrada e iguales condiciones de salida.

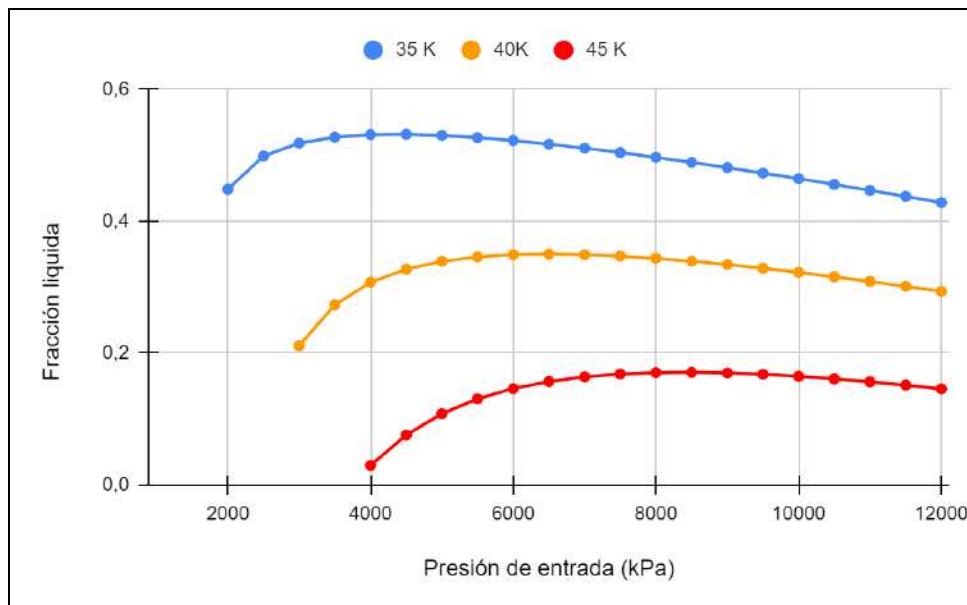


Figura 6.11 - Fracción líquida en función de la presión de entrada para diferentes temperaturas de entrada. Presión de salida constante e igual a 120 kPa.

De la *Figura 6.11* se concluye que mientras más baja sea la temperatura de entrada, mayor es la fracción líquida obtenida. También se observa que existe una presión de entrada óptima, que permite obtener la fracción líquida más alta. Este valor, a su vez, corresponde con la mínima entalpía para las condiciones de entrada (*Figura 6.12*).

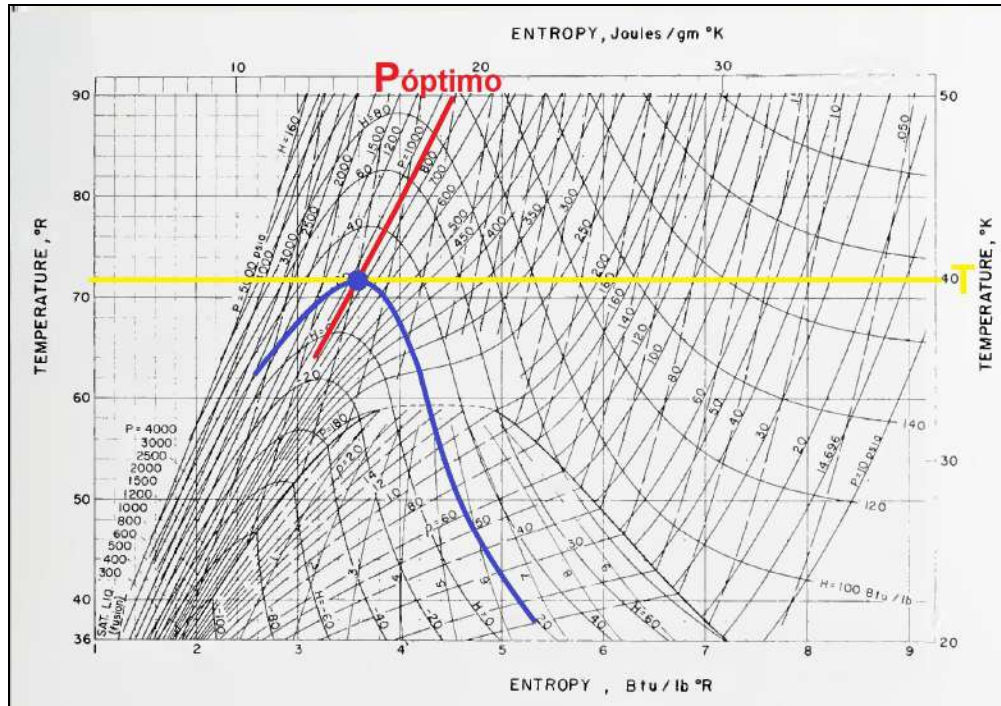


Figura 6.12 - Presión de entrada óptima para temperatura de entrada fija en diagrama T-S.

Condiciones de salida

En la Figura 6.13 se representa la fracción líquida y la temperatura de salida en función de la presión de salida para determinadas condiciones de entrada.

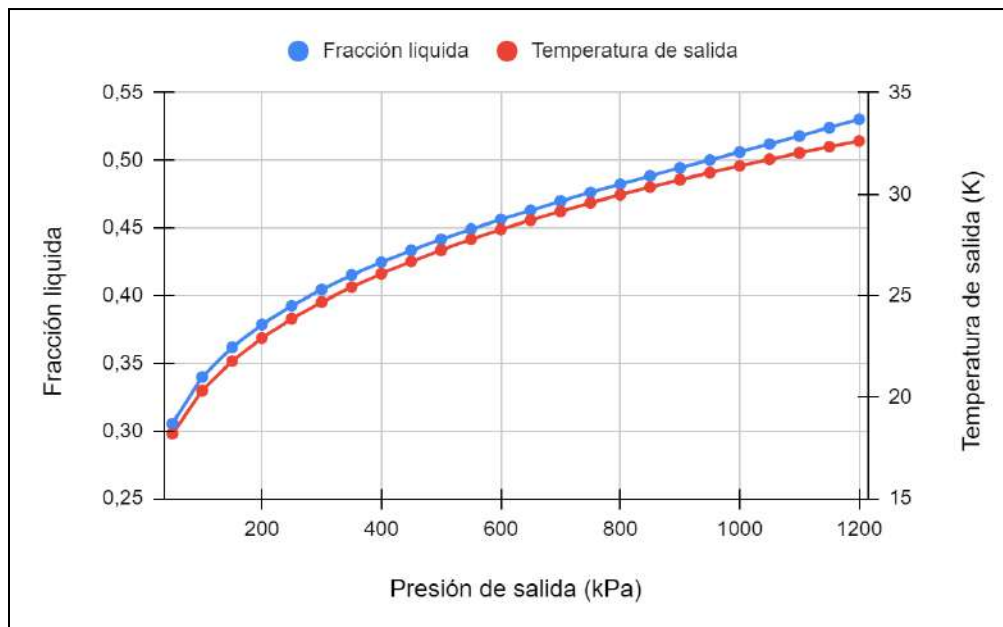


Figura 6.13 - Fracción líquida y temperatura de salida en función de la presión de salida. Condiciones de entrada constantes e iguales a 7000 kPa y 40 K.

De la *Figura 6.13* es posible concluir que una mayor presión de salida permite obtener una mayor fracción líquida. Este efecto también es posible verlo en el diagrama temperatura-entropía, donde, a medida que disminuye la presión (a entalpía constante), la fracción líquida disminuye (*Figura 6.14*).

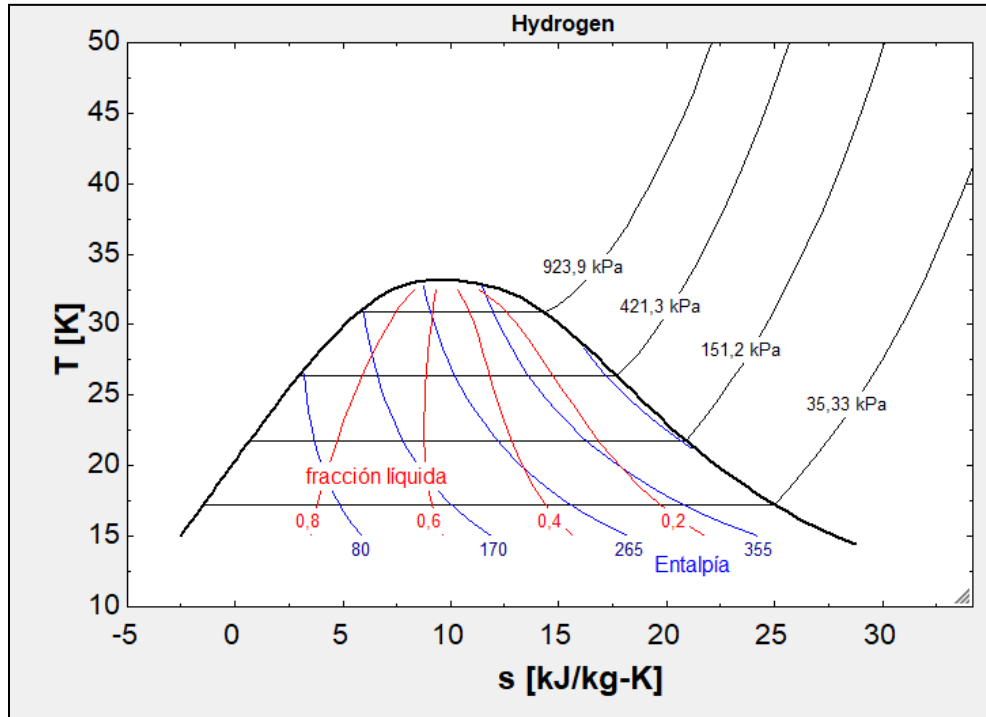


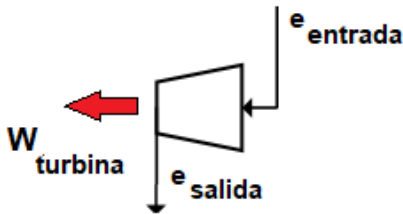
Figura 6.14 - Fracción líquida en función de la presión de salida siguiendo una trayectoria isoentálpica. Diagrama T-S.

Condiciones de operación óptimas

Por lo expuesto anteriormente, es preferible operar a la menor temperatura de entrada posible (con su presión óptima) y a la mayor presión de saturación posible en la salida. No obstante, más adelante en el análisis, se explican otros factores que impiden operar en estas condiciones ideales.

Cabe aclarar que no existe una válvula completamente isoentálpica. No obstante, para el diseño, no se consideran las pérdidas de eficiencia en la válvula.

6.5.2.1.2 - Turbina de expansión



Una fracción de la corriente “3” se desvía hacia la turbina de expansión. Su función es la de generar una corriente fría “e” que se adicione a la “7” y, de esta forma, satisfacer los requerimientos energéticos de los intercambiadores I y II.

Su funcionamiento es similar al de la válvula de expansión J-T, pero en vez de operar de forma isoentálpica lo hace de forma isentrópica.

La temperatura de la corriente de salida dependerá de las condiciones de entrada y las de salida.

Condiciones de entrada

En la *Figura 6.15* se ilustra el efecto de la presión de entrada sobre la temperatura de salida para distintas temperaturas de entrada. En todos los casos la presión de salida es la misma.

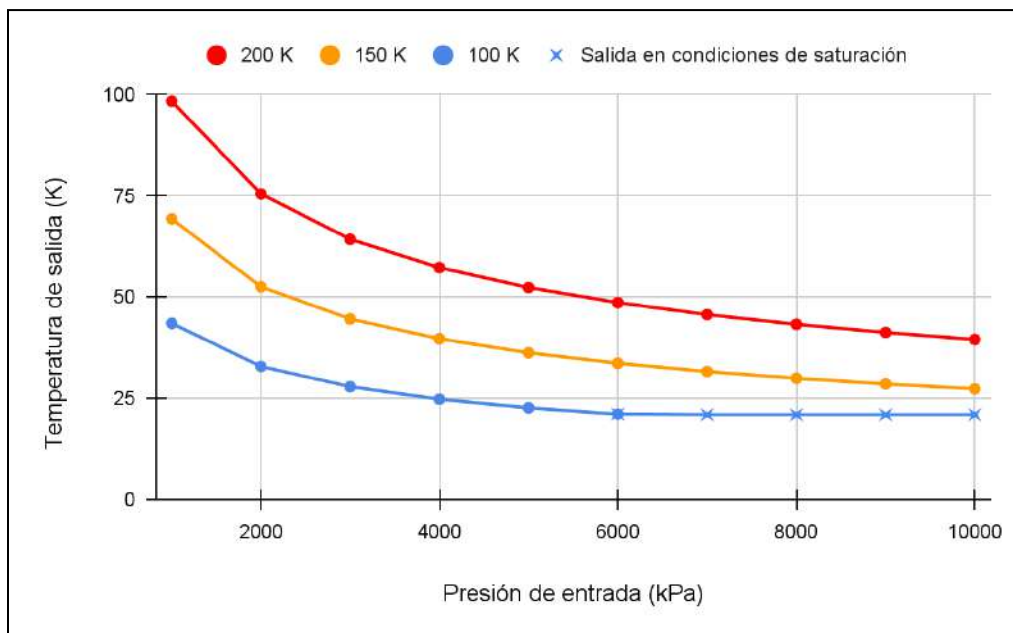


Figura 6.15 - Temperatura de salida en función de la presión de entrada para diferentes temperaturas de entrada. Presión de salida constante e igual a 120 kPa.

De la *Figura 6.15* se concluye que mayores presiones y menores temperaturas de entrada permiten obtener menores temperaturas en la salida.

Condiciones de salida

Para iguales condiciones de entrada, la presión de salida influye en la temperatura de salida, este efecto se observa en la *Figura 6.16*.

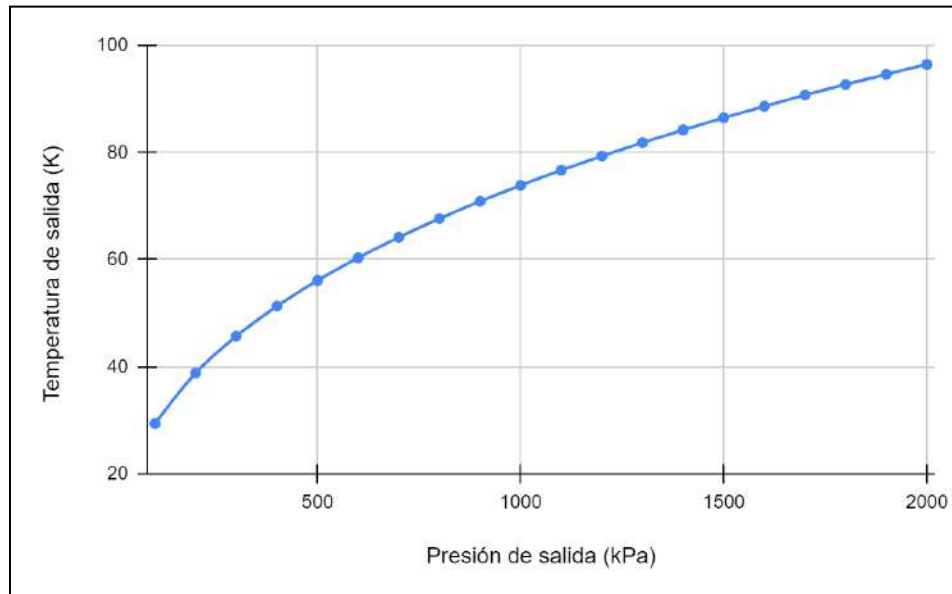


Figura 6.16 - Temperatura de salida en función de la presión de salida. Condiciones de entrada constantes e iguales a 7000 kPa y 150 K.

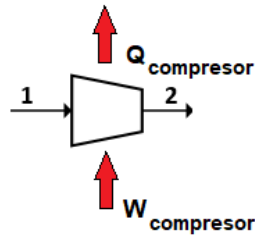
De la *Figura 6.16* se concluye que una menor presión de salida permite obtener menores temperaturas.

Condiciones de operación óptimas

Para lograr la menor temperatura en la salida se debería operar con altas presiones y bajas temperaturas en la entrada, y bajas presiones en la salida. Sin embargo, se debe evitar las condiciones de saturación en la salida, dado que la formación de gotas puede estropear la turbina.

Las condiciones de operación de la turbina están condicionadas por las presiones de la válvula de expansión y la temperatura en “3”. Más adelante en el análisis se indaga en sus efectos.

6.5.2.1.3 - Compresor I



Este compresor es una pieza fundamental en el ciclo dado que permite alcanzar la presión que es requerida en la válvula J-T. La compresión entre los puntos 1 y 2 se da, idealmente, de manera isotérmica. Sin embargo, se sabe que un compresor no puede operar en estas condiciones, sino que el calor generado en la compresión se transfiere al fluido provocando un aumento en su temperatura. La mayoría de los compresores operan en referencia a una curva politrópica, tal que la presión y el volumen del gas se encuentran relacionados en cada momento según la siguiente expresión:

$$P \cdot V^n = \text{constante}$$

Si el proceso de compresión fuera isotérmico, el índice politrópico “n” sería igual a la unidad y el trabajo W necesario para comprimir isotérmicamente con un volumen específico inicial, V_0 , desde una presión inicial, P_0 , a una presión final, P_1 , se calcularía como:

$$W = P_0 \cdot V_0 \cdot \ln\left(\frac{P_1}{P_0}\right)$$

Mientras que si la compresión fuera isoentrópica (adiabática y reversible), la ecuación tomaría la siguiente forma:

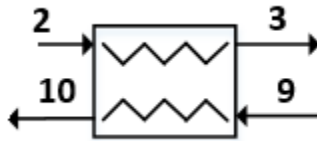
$$W = [\gamma/(\gamma - 1)]P_0 \cdot V_0 \cdot \left[(P_1/P_0)^{(\gamma-1)/\gamma} - 1 \right]$$

Donde γ es el coeficiente adiabático, obtenido como el cociente entre los calores específicos a presión (C_p) y a volumen (C_v) constante.

Como no es posible comprimir un gas sin evitar el efecto de sobrecalentamiento, se propone la siguiente alternativa, que permite operar en estas condiciones. Se trata de comprimir al gas en una etapa, con una etapa de enfriamiento posterior. De esta manera, se contrarrestan los efectos de sobrecalentamiento, y la corriente que abandona el sistema de compresión - enfriamiento tiene la misma temperatura que a la entrada. Para diseñar este sistema se utilizó el simulador de procesos Unisim Design™. En la *Sección 6.5*, se detallan sus condiciones operativas.

6.5.2.1.4 - Intercambiador de calor I

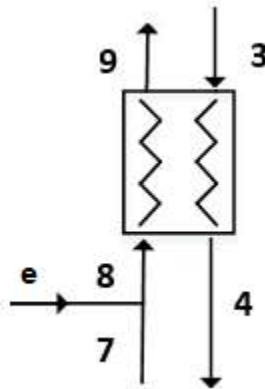
En este equipo la corriente de salida del compresor se enfría desde el estado “2” hasta el estado “3” intercambiando calor con la corriente que ingresa, que se calienta desde el estado “9” hasta el estado “10”, de manera isobárica.



La temperatura de la corriente “3” tendrá impacto sobre la temperatura en la salida de la turbina y también en el caudal que es necesario desviar a la misma.

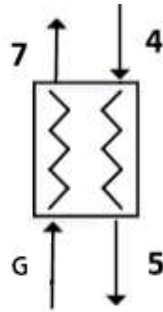
6.5.2.1.5 - Intercambiador de calor II

En este equipo la corriente que no se derivó a la turbina, la fracción “1-z”, se enfría desde el estado “3” hasta el estado “4” intercambiando calor con la corriente que ingresa, que se calienta desde el estado “8” hasta el estado “9”, de manera isobárica.



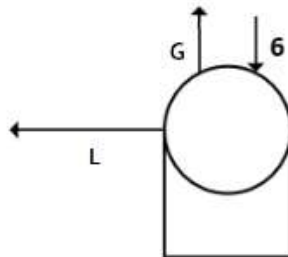
6.5.2.1.6 - Intercambiador de calor III

En este equipo la corriente caliente se enfría desde el estado "4" hasta el estado "5" intercambiando calor con la corriente que ingresa, que se calienta desde el estado "G" hasta el estado "7", de manera isobárica. La temperatura de "5" corresponde a la entrada de la válvula J-T, por ende definir su valor es muy importante para el ciclo.



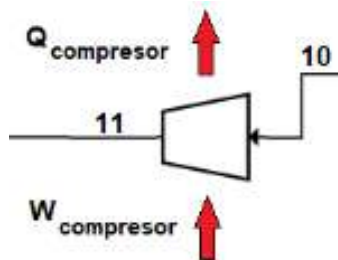
6.5.2.1.7 - Tanque receptor

La función del tanque es separar las fases de la corriente "6": una parte saldrá del sistema en estado líquido y la otra se recircula en estado gaseoso. Esta corriente, a su vez, permitirá el intercambio de calor en el intercambiador III.



6.5.2.1.8 - Compresor II

Su función es elevar la presión de la corriente "10" para igualarla a la de la presión de entrada, a fin de evitar el retroceso de la corriente.



De igual manera que para el compresor I, se diseña una etapa de compresión seguida de enfriamiento para poder tener una temperatura constante a la salida.

6.5.2.2 - Balances de masa

Siguiendo la nomenclatura de la *Figura 6.7* se plantean los balances de masa, como sigue:

$$m_{\text{entrada}} + m_{11} = m_1 = m_2 = m_3$$

$$m_4 = m_3 * (1 - z) = m_5 = m_6$$

$$m_e = m_3 * z$$

$$m_G = m_6 * (1 - x) = m_7$$

$$m_L = m_6 * x$$

$$m_7 + m_e = m_8 = m_9 = m_{10} = m_{11}$$

6.5.2.3 - Presiones

Para establecer las presiones, se considera que la presión en “e” es igual a la presión en “7” esto para evitar el retroceso de la corriente y, además, se considera que la corriente resultante posee la misma presión.

Para resolver el sistema es necesario definir P_{entrada} , P_2 y P_6 , el resto de las presiones dependen de estos tres valores.

$$P_1 = P_{\text{entrada}} = P_{11}$$

$$P_2 = P_3 = P_4 = P_5$$

$$P_6 = P_7 = P_8 = P_9 = P_{10} = P_G = P_L = P_e$$

Las caídas de presión en el sistema se desprecian.

6.5.2.4 - Balances de energía

Para resolver el sistema se deben definir las siguientes temperaturas: T_{entrada} , T_3 , T_4 , T_5 , y T_{10} . Con ellas es posible determinar las entalpías correspondientes. Luego, para obtener el resto de las temperaturas del sistema se deben resolver los siguientes balances:

Intercambiadores

$$- m_2 * (h_3 - h_2) = m_9 * (h_{10} - h_9)$$

$$- m_4 * (h_4 - h_3) = m_9 * (h_9 - h_8)$$

$$- m_4 * (h_5 - h_4) = m_G * (h_7 - h_G)$$

Nodos

$$m_{\text{entrada}} * h_{\text{entrada}} + m_{11} * h_{11} = m_1 * h_1$$

$$m_e * h_e + m_7 * h_7 = m_8 * h_8$$

Turbina

$$s_e = s_3$$

Valvula J-T

$$h_6 = h_5$$

h_G y h_L son la entalpía del gas y del líquido, respectivamente, para las condiciones de saturación de "6". En relación con el balance de masa, para obtener la fracción de líquido a la salida de la válvula se plantea la siguiente ecuación:

$$x = \frac{h_G - h_6}{h_G - h_L}$$

Compresor I y II

Ambos compresores se consideran isotérmicos, de la manera que se indicó anteriormente. Por lo tanto:

$$T_1 = T_2$$
$$T_{10} = T_{11}$$

6.5.2.5 - Resolución del ciclo

Para la resolución del ciclo se deben definir las siguientes variables: m_{entrada} , z , P_{entrada} , P_2 , P_6 , T_{entrada} , T_3 , T_4 , T_5 , y T_{10} . El objetivo es resolver el ciclo con la menor recirculación posible, esto con el fin de reducir el tamaño de los equipos y la potencia del compresor. Para lograr esto, la fracción líquida debe ser lo más alta posible y la fracción desviada a la turbina lo más baja posible.

6.5.2.5.1 - Relación entre las variables

La presión, la temperatura y el flujo másico en la entrada del ciclo están definidas por la salida del sistema PSA, estos valores corresponden a 1500 kPa, 303 K y 74,24 kg/h respectivamente. No obstante, para el resto de las variables la elección de un valor es compleja, dado que un valor ventajoso para un equipo puede ser perjudicial para otro. A continuación, se detallan las variables de mayor conflicto:

- Como se ha explicado en la sección 6.5.2.1.1- “*válvula de Joule-Thompson*”, se busca operar con la mayor presión de saturación posible en “6”. Esto, con el fin de aumentar la fracción líquida obtenida. No obstante, aumentar la presión en “6” implica su aumento en “e”, lo cual provoca que la temperatura de salida sea menor y, en consecuencia, se requiera desviar mayor flujo por la turbina.
- Una mayor fracción líquida puede obtenerse al reducir la temperatura en “5”, sin embargo, esto aumenta la energía que debe intercambiar “G” en el intercambiador III. Además, si la fracción de gas que vuelve por “G” es muy pequeña, no podría satisfacer el requerimiento energético del intercambiador.
- Una menor temperatura en “3” permite reducir la temperatura en “e”, lo cual es ventajoso para el intercambio de calor en los intercambiadores I y II. Sin embargo, la reducción de la temperatura en “3” aumenta la fracción de hidrógeno que debe desviarse a la turbina.

6.5.2.5.2 - Criterios de selección

Son múltiples las posibles soluciones al ciclo. Aun bajo valores fijos de “z” y “x”, se puede resolver el ciclo con diferentes temperaturas intermedias. Por ende, es necesario fijar ciertos criterios para abordar a una única solución:

- Se prioriza obtener la menor relación entre m_1 y m_{entrada} .

$$\frac{m_1}{m_{\text{entrada}}} = \frac{1}{(1-z)^*x}$$

- Se establece una fuerza impulsora mínima en los intercambiadores de 5 °C.
- Si es posible, se busca que la temperatura en “5” sea igual a “4” con el fin de eliminar la necesidad del intercambiador de calor III.

6.5.2.5.3 - Procedimiento empleado para la resolución

Para resolver el ciclo se siguen los siguientes pasos:

- 1) Se escogen las condiciones de operación de la válvula: presión y temperatura de entrada, y presión de salida.
- 2) Se iguala la temperatura “5” a la “4”.
- 3) Inicialmente se iguala la temperatura “10” a la de entrada, luego se escoge una temperatura en “3” y se ajusta “z” hasta que la temperatura en “9” sea inferior a la de “3” y la “8” inferior a “4”.
- 4) Se modifica la temperatura en “10” para que sea inferior a la temperatura en “2”.
- 5) Se repiten los pasos 3) y 4) hasta obtener el menor “z” posible.
- 6) Se repiten los pasos del 1) al 5) para obtener la menor relación m_1/m_{entrada} .

6.5.2.5.4 - Resultados

El sistema se resolvió utilizando el programa Engineering Equation Solver™, el mismo no cuenta con una herramienta de optimización, por ende, se debió resolver de forma manual. Por este motivo no fue posible realizar muchas iteraciones a fin de abordar a valores óptimos exactos. Los resultados se exhiben en la *Tabla 6.6*.

Tabla 6.6 - Valores de temperatura, presión y flujo másico para cada corriente del ciclo.

Corriente	Entrada	1	2	3	4	5	6	7
Temperatura (K)	303	280,9	280,9	205	40	40	20,96	20,96
Presión (kPa)	1500	1500	7000	7000	7000	7000	120	120
Flujo másico (kg/h)	74,24	355,2	355,2	355,2	212,4	212,4	212,4	138,1
Corriente	8	9	10	11	e	G	L	
Temperatura (K)	33,95	199,9	275	275	47,23	20,96	20,96	
Presión (kPa)	120	120	120	1500	120	120	120	
Flujo másico (kg/h)	280,9	280,9	280,9	280,9	142,8	138,1	74,24	

Finalmente, en el *Anexo E*, se muestra el diagrama definitivo para la subplanta de licuación, incluyendo todas las corrientes involucradas en el sistema, junto con sus valores de flujo másico, presión y temperatura. Se aclara que en este diagrama, los nombres de las corrientes no coinciden con los presentados en esta sección para la resolución del ciclo. Se fijaron de esta forma para que la explicación sea más sencilla y coincida con los diagramas presentados de bibliografía.

6.6 - Dimensionamiento y selección de los equipos

6.6.1 - Sistema PSA

Dada la complejidad asociada al diseño de sistemas de este tipo y a la etapa de diseño en la que se encuentra este proyecto, se optó por no diseñar al sistema PSA a utilizar. En la actualidad, diversas empresas producen estos equipos debido al creciente interés a nivel mundial en la industria para obtener hidrógeno de alta pureza. Los principales productores de este tipo de sistemas son las empresas UOPTM, LindeTM, Air LiquideTM, y XebecTM.

En el proceso, el gas de ingreso a la subplanta de licuación tiene las siguientes condiciones, que se resumen en la *Tabla 6.7*.

Tabla 6.7 - Propiedades de la corriente de ingreso a la subplanta.

Caudal de entrada [kg/h] (Nm³/h)	94,67 (1235,7)
Temperatura [°C]	-19,2
Presión [kPa]	111,9
Composiciones molares (%)	
Hidrógeno	99,65
Etanol	0,33
Acetato de etilo	0,018
Acetaldehído	0,003

Se considera que la corriente se encuentra impurificada únicamente con etanol, con fines prácticos, dado que es la impureza que mayor concentración tiene.

La empresa XebecTM ofrece catálogos⁷¹ con diversos sistemas PSA capaces de adaptarse a distintos procesos productivos, en función del caudal de gas a procesar. Se selecciona entonces un sistema que sea adecuado para los requerimientos del proceso. En la *Tabla 6.8* se resumen sus características, y en la *Figura 6.17* se muestra su configuración.

⁷¹ Ref. N° 7

Tabla 6.8 - Sistema PSA seleccionado.

Modelo	<i>H-3200</i>
Caudal de operación [Nm³/h]	<i>1000 - 3000</i>
Presión máxima de operación [bar]	<i>18</i>
Temperatura de la alimentación [°C]	<i>10 - 60 (20 - 45 preferentemente)</i>
Potencia consumida [kW]	<i>0,2 - 0,5</i>



Figura 6.17 - Configuración del sistema PSA seleccionado.

Este sistema consiste de nueve adsorbedores, y permite alcanzar, según indica el catálogo, purezas de hasta 99,9999 % v/v. La recuperación típica informada se encuentra entre el 80 - 90 % y depende, principalmente, de la composición de la alimentación y las impurezas. Cuenta con una vida útil mayor a los 15 años.

Como indica el catálogo, la presión máxima de operación se encuentra a 18 bares y la temperatura de entrada, que es igual a la de operación, entre los 10 y los 60 °C, preferentemente entre los 20 y los 45 °C. Esto es debido a que en este rango de temperaturas, se alcanza la mayor eficiencia de adsorción. En la *Sección 6.5.1*, se detallaron las condiciones de operación seleccionadas.

6.6.2 - Compresores

6.6.2.1 - Compresor 1

Como se mencionó en la sección 6.5.1 - “Purificación de la corriente de hidrógeno”, previo a la entrada del sistema PSA, es necesario instalar un compresor para poder acondicionar esta corriente. Se resumen las características requeridas en la *Tabla 6.9*:

Tabla 6.9 - Condiciones operativas del compresor 1.

Presión de entrada (bar)	1,11
Presión de salida (bar)	15
Caudal de operación (m³/h)	1051
Potencia requerida (kW)	116,4

Se seleccionó de catálogo⁷² un compresor de la marca Adicomp™. En la *Tabla 6.10* se resumen sus características.

Tabla 6.10 - Características del compresor seleccionado.

Modelo	BVG
Máximo caudal de operación (m³/h)	3000
Máxima presión de descarga (bar)	20
Potencia máxima (kW)	200

6.6.2.2 - Compresor 2

Este compresor es el elemento fundamental en la planta de licuefacción. Debe tener características particulares para trabajar con hidrógeno. Primero, la lubricación del compresor debe ser sin aceite para la contaminación del gas y así no dañar la turbina posteriormente. También se deben instalar detectores de fugas de hidrógeno debido a que, en contacto con el aire, el hidrógeno es altamente explosivo. Además, debe ser capaz de elevar la presión hasta, al menos, 70 bares. En la *Tabla 6.11*, se presentan las características principales requeridas para el compresor en el proceso de licuefacción.

⁷²Ref. Nº 8

Tabla 6.11 - Condiciones operativas del compresor 2.

Presión de entrada (bar)	15
Presión de salida (bar)	70
Caudal de operación (m³/h)	4702
Potencia requerida (kW)	281,4

Se seleccionó de catálogo⁷³ un compresor de la marca Atlas Copco™. Se trata de un compresor de tipo pistón, libres de aceite, capaces de operar con distintos gases de procesos, entre ellos el hidrógeno. A continuación, en la *Tabla 6.12* se resumen sus características.

Tabla 6.12 - Características del compresor seleccionado.

Modelo	HNX2
Máximo caudal de operación (m³/h)	7875
Máxima presión de descarga (bar)	80
Potencia máxima (kW)	315

6.6.2.3 - Compresor 3

Como se detalló anteriormente en la *Sección 6.5.2*, también es necesaria la instalación de otro compresor dentro del ciclo para poder presurizar a la corriente de retorno, de manera de poder mezclarse con la corriente de ingreso al ciclo. Este compresor debe tener las mismas características constructivas, debido a que la corriente a comprimir tiene condiciones similares a las presentadas en el apartado anterior. En la *Tabla 6.13* se resumen sus condiciones.

Tabla 6.13 - Condiciones operativas del compresor 3.

Presión de entrada (bar)	1.2
Presión de salida (bar)	15
Caudal de operación (m³/h)	3355
Potencia requerida (kW)	250,3

Se seleccionó de catálogo⁷⁴ un compresor de la marca KwangShin™. En la *Tabla 6.14* se resumen sus características.

Tabla 6.14 - Características del compresor seleccionado.

⁷³ Ref. N° 9

⁷⁴ Ref. N° 10

Modelo	KSL
Máximo caudal de operación (m³/h)	5000
Máxima presión de descarga (bar)	20
Potencia máxima (kW)	340

6.6.3 - Turbina de expansión

Para poder alcanzar las bajas temperaturas a las cuales el hidrógeno se licua, se necesitan turbinas de expansión criogénicas, que puedan trabajar con este compuesto. Al igual que en el compresor, en la turbina tampoco se pueden producir fugas, por lo que se requieren detectores de hidrógeno por seguridad.

La potencia generada por la turbina se obtiene como el producto entre el caudal que la atraviesa, por el trabajo realizado, de la siguiente manera:

$$Pot = m \cdot W = m \cdot (h_{final} - h_{inicial})$$

En la *Tabla 6.15* se resumen los valores requeridos.

Tabla 6.15 - Condiciones operativas de la turbina del ciclo de licuefacción.

Presión de entrada (kPa)	7000
Presión de salida (kPa)	120
Entalpía entrada (kJ/kg)	2632
Entalpía salida (kJ/kg)	738,6
Caudal másico de la corriente (kg/h)	142,8
Potencia generada (kW)	75,1

La empresa Atlas Copco™ ofrece catálogos⁷⁵ con distintos tipos de turbinas de expansión utilizadas en la industria del oil & gas. En particular, ofrecen una turbina con freno hidráulico, especialmente utilizada en aplicaciones criogénicas de baja potencia, como es el caso de este proceso. Típicamente, se utiliza para trabajar con dióxido de carbono e hidrógeno, y tienen una potencia generada estimada de 250 kW. Por lo tanto, se considera que se puede adaptar al proceso.

⁷⁵ Ref. N° 11

6.6.4 - Intercambiadores de calor

Los intercambiadores de calor son una parte fundamental de cualquier sistema criogénico. Deben ser compactos para reducir el riesgo de entrada de calor desde el ambiente, los motores o los compresores. Para el sistema, deben mantenerse al vacío y también deben estar aislados. En cuanto al material de construcción, debe ser un material capaz de soportar las condiciones de diseño y funcionamiento y el entorno exterior durante toda la vida esperada, a un costo inicial mínimo y con un costo de reparación y mantenimiento bajo. Debido a las bajas temperaturas de funcionamiento que se encuentran en las aplicaciones criogénicas, los materiales se vuelven frágiles, por lo que es necesario utilizar materiales adecuados. El material más común utilizado para estos intercambiadores es el aluminio debido a su alta conductividad térmica y resistencia a bajas temperaturas. En la industria de la licuefacción de hidrógeno suelen utilizarse intercambiadores de placas y aletas (Plate-Fin Heat Exchangers - PFHE) debido a su gran área de transferencia de calor por unidad de volumen, a bajos costos de capital. Normalmente, se encuentran diseñados para presiones de hasta 13 MPa⁷⁶. En la *Figura 6.18* se muestra una configuración típica de este tipo de intercambiadores.

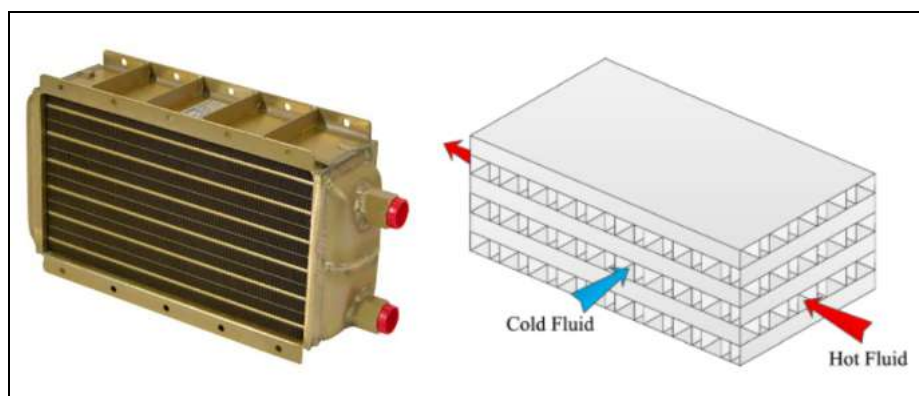


Figura 6.18 - Configuración típica de un intercambiador de tipo placas y aletas.

Para dimensionar los intercambiadores, se utilizó la siguiente ecuación de diseño:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ML}$$

Siendo:

Q : Calor a intercambiar (kW)

U : Coeficiente global de transferencia de calor ($W/m^2\text{°C}$)

A : Área de intercambio de calor (m^2)

ΔT_{ML} : Diferencia de temperatura media logarítmica entre la entrada y la salida del equipo (°C)

⁷⁶ Ref. N° 12

El calor a intercambiar, Q, se calculó de la siguiente manera:

$$Q = m_c \cdot cp_c \cdot (T_{c,out} - T_{c,in}) = m_f \cdot cp_f \cdot (T_{f,out} - T_{f,in})$$

donde el Cp se obtuvo⁷⁷ para la temperatura promedio entre la entrada y la salida, para cada corriente.

El coeficiente global, U, se estimó a partir de los coeficientes locales de transferencia de calor de las corrientes frías y calientes, de la siguiente manera:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{\frac{1}{h_{fría}} + \frac{1}{h_{caliente}}}$$

No es sencillo estimar los coeficientes locales para el hidrógeno en todo su rango de temperatura, por lo que se tomó como base un estudio consultado⁷⁸. En este estudio se llegó a una correlación para estimar el coeficiente de transferencia de calor para un amplio rango de temperaturas de trabajo, en un intercambiador de calor de tipo placas y aletas de aluminio, configuración similar a la requerida en este proceso. El rango obtenido para el coeficiente convectivo h fue de 2000 a 8000 W/m²K. La única limitación es que, en el experimento realizado, las velocidades de flujo variaron entre 5 y 25 kg/h, mientras que en el proceso de licuefacción propuesto, las velocidades de flujo alcanzan velocidades de hasta 280 kg/h.

Si bien el flujo másico a utilizar en el proceso es superior al que se usó en los experimentos, se decide seleccionar un coeficiente convectivo dentro del rango provisto. Si aumenta la velocidad de flujo, se necesitaría un equipo proporcionalmente más grande, ya que admite mayor cantidad de fluido. Este aumento podría realizarse de manera tal que la velocidad lineal del fluido dentro del equipo sea la misma que la que se utilizó en los experimentos, o dentro del rango, y como el coeficiente es proporcional a esta velocidad, se supone que es el mismo.

Esta estimación permite dimensionar, a grandes rasgos, los equipos de transferencia de calor necesarios.

Se decide, entonces, tomar un coeficiente convectivo h de **4000 W/m²K** para ambas corrientes. El coeficiente global U resulta entonces de **2000 W/m²K**.

En la *Tabla 6.16* se resumen las características de diseño obtenidas para cada intercambiador.

Tabla 6.16 - Características de diseño para los intercambiadores del ciclo de licuefacción.

Intercambiador	Calor a intercambiar (kW)	ΔT _{ml} (K)	Coficiente global U (W/m ² K)	Área de intercambio (m ²)
1	104,85	5,49	2000	9,55
2	116,82	5,56	2000	10,62

⁷⁷ Ref. N° 6

⁷⁸ Ref. N° 13

6.6.5 - Sistema de refrigeración

Análogamente a como se hizo para el sistema PSA, se decide no diseñar al sistema de refrigeración requerido para enfriar a las corrientes de proceso luego de las etapas de compresión. En cambio, se opta por seleccionar, de catálogos, sistemas de este tipo.

Como la temperatura mínima a alcanzar es de 2 °C, aproximadamente, no hay limitaciones en cuanto el tipo de fluido refrigerante a usar, debido a que todos los utilizados industrialmente operan cómodamente por debajo de esta temperatura.

La empresa FB Refrigeración™ ofrece catálogos⁷⁹ de distintos equipos de este tipo para una gran variedad de aplicaciones industriales, en función de la capacidad de enfriamiento, expresada en toneladas de refrigeración.

A continuación, en la *Tabla 6.17*, se resumen las distintas corrientes a ser enfriadas, junto con la cantidad de calor a remover de cada una.

Tabla 6.17 - Resumen de las corrientes a ser enfriadas de la subplanta.

Corriente según diagrama tecnológico	Calor a remover (kW)
4.2	99,4
4.5	246,3
4.17	345,7
Total	691,4

El total de calor a remover equivale a la capacidad de refrigeración necesaria del circuito de refrigeración. Sumando los requerimientos de todas las corrientes, el calor total es de 691 kW, que corresponden a 196 toneladas de refrigeración (TR), aproximadamente.

En el catálogo figuran varias alternativas posibles. Se decide seleccionar una central compresora de amoníaco, con capacidad de hasta 200 TR en baja tensión, y hasta 360 TR en media tensión. Estas centrales se encuentran diseñadas para temperaturas de -10 °C y +35 °C, para el evaporador y condensador, respectivamente.

⁷⁹ Ref. N° 14

6.6.6 - Tanque receptor

Normalmente se requieren dos tipos de almacenamiento de hidrógeno líquido. Uno es el almacenamiento final para algún tipo de aplicación, el cual se analiza en la siguiente sección, y el otro es el almacenamiento al final del ciclo donde parte del hidrógeno gaseoso se licua y otra parte retorna al ciclo. Este estanque es igual al diseñado para el almacenamiento, salvo por contar con una vía de retorno para el hidrógeno gaseoso. A efectos prácticos, se diseña un tanque adicional con las mismas características que el tanque de almacenamiento.

6.6.7 - Tanque de almacenamiento

Para diseñar los tanques de almacenamiento del hidrógeno líquido, se toman como base 3000 kg_{LH₂}, siendo este el promedio de la cantidad que se suele transportar por ruta mediante camiones⁸⁰.

El tiempo de residencia para el hidrógeno líquido se obtiene mediante la siguiente ecuación:

$$t_{res,LH_2} = m_{LH_2} / W_{LH_2}$$

Para esta cantidad de producto a almacenar, se obtiene un tiempo de residencia de 31,6 hr = 1,32 días.

El principal problema que se presenta al almacenar este compuesto es el fenómeno de “boil-off”, en el que el hidrógeno líquido se vaporiza parcialmente durante su almacenamiento. Este fenómeno implica que la presión dentro del recipiente aumente, por lo que se debe contar con un riguroso sistema de control. En la construcción de los tanques se coloca una válvula de retorno para que el gas que se vaporiza vuelva al ciclo. Habitualmente, el llenado de los tanques se debe hacer hasta un 85 % del volumen total del tanque para tener en cuenta la expansión térmica debido a la ebullición y garantizar una presión constante⁸¹. Estos tanques son, generalmente, de forma esférica, debido a que esta configuración minimiza la relación área de transferencia/volumen, y haciendo que el almacenamiento del hidrógeno sea más eficiente. Consisten en dos esferas concéntricas, y el espacio entre ellas sirve como una capa de aislamiento para minimizar la transferencia de calor desde el exterior, debido a la baja temperatura de almacenamiento de este compuesto. Normalmente, para tanques de este tamaño, se realiza una presión de vacío de aproximadamente 1 o 2 Pa⁸². En este espacio, también se suelen colocar aislantes térmicos, tales como perlita, aerogeles, o esferas de vidrio. La esfera interna se construye de un material específico para soportar las bajas temperaturas y condiciones de operación, mientras que la esfera exterior se puede construir de materiales económicos como el acero al carbono. En la *Figura 6.19* se muestra un esquema de un tanque de almacenamiento de hidrógeno convencional.

⁸⁰ Ref. N° 15

⁸¹ Ref. N° 16

⁸² Ref. N° 12

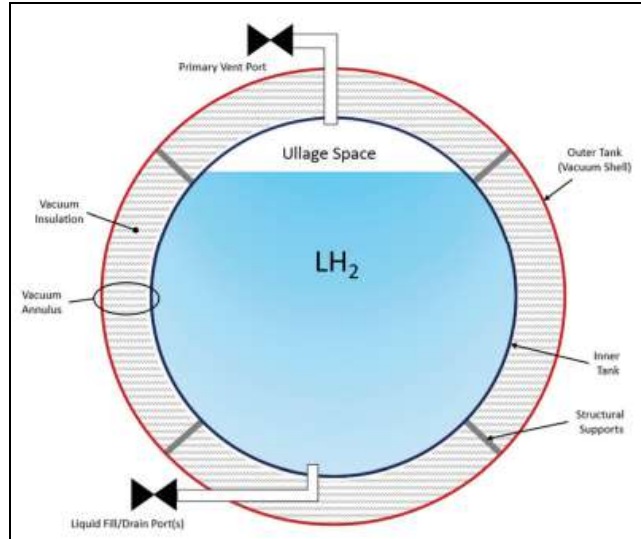


Figura 6.19 - Configuración típica para un tanque de almacenamiento de hidrógeno.

El volumen del tanque se define como:

$$V_t = m_{H_2} (1 + V_i) / \rho_{LH_2}$$

Siendo

V_i : Exceso de volumen para garantizar presión constante (15 %)

ρ_{LH_2} : Densidad del hidrógeno líquido, 70,8 kg/m³.

El volumen del tanque, resulta entonces: **$V_t = 48.73 \text{ m}^3$** .

El radio del tanque se puede despejar a partir de la siguiente ecuación, para un tanque esférico:

$$V_t = \frac{4}{3} \pi r^3$$

Luego, el espesor de pared requerido para el cilindro interno, t_w , se puede determinar en base a la tensión máxima permitida, σ_y , y un factor de seguridad, que ronda entre el 20 y el 30 %⁸³. La siguiente ecuación representa el espesor de pared para un tanque esférico:

$$t_w = P \cdot r \cdot F_s / \sigma_y$$

⁸³ Ref. N° 12

Donde:

- P: Presión del tanque de almacenamiento (MPa)
- t_w : espesor de pared requerido (m)
- σ_y : tensión máxima permitida (MPa)
- F_s : factor de seguridad

La presión de operación se suele fijar entre 120 y 140 kPa.

A partir del espesor de la pared y la densidad del material utilizado para construir el estanque, se puede calcular la masa del estanque:

$$m_t = \rho_m \frac{4}{3} \pi \left[(r + t_w)^3 - r^3 \right]$$

Como la temperatura de almacenamiento es extremadamente baja (-255 °C), los equipos que están en contacto directo con el hidrógeno líquido (cañerías, tanques, válvulas, etc.) deben estar diseñados y fabricados de forma tal que puedan soportar esta temperatura. Además, la formación de hielo alrededor de las cañerías y válvulas se debe minimizar, ya que puede contribuir a posibles roturas. Una ventaja del hidrógeno en estas condiciones es que no es corrosivo, por lo que no es necesario contar con materiales preparados para la corrosión. Entonces, las consideraciones principales para la selección de los materiales para el manejo de este compuesto son la fragilización, la permeabilidad y la capacidad de soportar bajas temperaturas. En un estudio de la NASA⁸⁴, la aleación de aluminio 2219 se considera como el material del estanque que cumple todos los requisitos de manera óptima, en comparación con otros materiales investigados. Las propiedades de este material ofrecen, a una temperatura criogénica de 20 K, una densidad de 2825 kg/m³ y una tensión limitada de $\sigma_y = 172,4$ MPa para las condiciones de diseño del proceso.

Finalmente, con el material seleccionado, se resumen los parámetros de diseño para un tanque de almacenamiento de hidrógeno líquido, en la *Tabla 6.18*:

Tabla 6.18 - Parámetros de diseño para el tanque de almacenamiento.

Volumen del tanque (m ³)	48,73
Radio interno del tanque (m)	2,27
Espesor de pared mínimo (m)	0,0023
Material de construcción	Aleación de aluminio 2219
Masa del estanque (kg)	526,5
Presión de almacenamiento (kPa)	120

⁸⁴ Ref. N° 17

Bibliografía Capítulo 6

1. Burke, A. Garnier, M. (2005) "Hydrogen Storage Options: Technologies and comparisons for light duty vehicle applications", Paper UCD-ITS-RR-05-01, Institute of Transportation Studies, University of California.
2. Basile, A., Gallucci, F. (2008). "Synthesis, characterization, and applications of palladium membranes". Membrane science and technology, 13, 255-323.
3. Adhikari, S. Fernando, S. (2006). "Hydrogen membrane separation techniques". Industrial & Engineering Chemistry Research, 45(3), 875-881.
4. Vermaak L, Neomagus H, Bessarabov D. (2021) "Hydrogen Separation and Purification from Various Gas Mixtures by Means of Electrochemical Membrane Technology in the Temperature Range 100-160 °C".
5. Allevi, C., Collodi, G., (2017) "Hydrogen production in IGCC systems". Woodhead Publishing. 419-433
6. McCarty, R. D. (1981). "Selected Properties of Hydrogen (Engineering Design Data)", U.S Department of Commerce - National Bureau of Standards.
7. Catálogo de sistemas PSA, de la marca Xebec™. Disponible en:
<https://xebecinc.com/wp-content/uploads/2021/06/Xebec-Hydrogen-Brochure.pdf>
8. Catálogo de compresores, de la marca Adicomp™. Disponible en:
<https://www.directindustry.com/prod/adicomp-srl/product-62761-1586390.html>
9. Catálogo de compresores, de la marca Atlas Copco™. Disponible en:
https://www.atlascopco.com/content/dam/atlas-copco/compressor-technique/gas-and-process/documents/hx_hn_compressors_brochure_2015_0318_lr.pdf
10. Catálogo de compresores, de la marca KwangShin™. Disponible en:
<http://www.kwangshin.com/pdf/Catalogue-Reciprocating.pdf>
11. Catálogo de turbinas de expansión, de la marca Atlas Copco™. Disponible en:
<https://www.atlascopco.com/content/dam/atlas-copco/compressor-technique/gas-and-process/documents/driving-expander-technology.pdf>
12. Saif ZS. Al Ghafri. (2022) "Hydrogen liquefaction: a review of the fundamental physics, engineering practice and future opportunities". Royal Society of Chemistry. Energy Environ. Sci.

13. Olson, D. (1994). "Heat Transfer in an Aluminum Heat Exchanger Using Normal Hydrogen Gas: Final Report" U.S. Department of Commerce. Chemical Engineering Division.
14. Catálogo de sistemas de refrigeración, de la marca FB Refrigeración. Disponible en: https://www.fb-refrigeracion.com/fb_docs/Catalogo-FBIND-FB-Industrial%20BCT-162-v3.pdf
15. Aziz, M. (2021). "Liquid Hydrogen: A Review on Liquefaction, Storage, Transportation, and Safety".
16. Preuster, P.; Alekseev, A. (2017) "Hydrogen Storage Technologies for Future Energy Systems".
17. C. Winnefeld, T. Kadyk, (2018) "Modelling and Designing Cryogenic Hydrogen Tanks for Future Aircraft Applications"



CAPÍTULO VII

ANÁLISIS DE RENTABILIDAD

7.1 - Objetivos

- Realizar una estimación de los costos de inversión y producción.
- Definir un cronograma de ejecución del proyecto.
- Efectuar un análisis de rentabilidad del proyecto.

7.2 - Introducción

Alcanzado este punto del proyecto, en donde las condiciones de operación y las diferentes etapas han sido definidas, y donde también se han diseñado los equipos pertinentes para lograr la producción deseada, resta un último paso -pero no por ello menos importante- para culminar con esta etapa del desarrollo del proyecto. En este último capítulo se realiza el análisis económico.

El análisis económico del proyecto busca ampliar el estudio de mercado realizado en el *Capítulo 1*, ahora con datos más precisos acerca de los productos y cantidades destinados a la venta. Se analiza la inversión necesaria para la construcción y puesta en marcha del proyecto así como los costos de operación, para finalmente analizar su rentabilidad. Esta información es de suma utilidad para decidir si vale la pena pasar a una siguiente etapa en el diseño de la planta productiva.

7.3 - Costos de inversión (CapEx)

La cantidad de dinero necesaria para la construcción de una planta y la puesta en operación del proyecto, ya sea de bienes industriales o servicios, es conocida como "inversión" de la empresa o CapEx (Capital Expenditure). Esta inversión se puede integrar por capital propio, créditos de organismos financieros nacionales y/o internacionales, y de proveedores.

La inversión total requerida para realizar y operar el proyecto se compone de dos partes:

- **INVERSIÓN FIJA TOTAL (IFT)** es la cantidad de dinero necesaria para construir totalmente una planta de proceso, incluyendo sus servicios auxiliares, y ubicarla en situación de poder comenzar a producir. Se trata de la suma del valor de todos los activos de la planta. Los activos fijos pueden ser tangibles o intangibles. Los primeros se integran con la maquinaria (que incluye el monto de su montaje), terreno, edificios, instalaciones auxiliares; y los segundos son las patentes, conocimientos técnicos, gastos de organización.

→ **INVERSIÓN EN CAPITAL DE TRABAJO (IW)** o también llamado "capital de giro", comprende las disponibilidades de capital necesario para que una vez que la planta se encuentre instalada y puesta en régimen normal de operación, pueda operar a los niveles previstos en los estudios técnico-económicos. Es el capital adicional con el que se debe contar para que comience a funcionar el proyecto, esto es financiar la producción antes de percibir ingresos por ventas. El monto de este capital varía dentro de límites muy amplios, dependiendo de la modalidad del mercado al cual va dirigida la producción, de las características del proceso y las condiciones establecidas por la procedencia y disponibilidades de las materias primas.

El cálculo de la inversión total (IT) se realiza mediante la siguiente ecuación:

$$I_T = I_{FT} + I_W$$

La Inversión Fija Total se divide, a su vez, en componentes directos e indirectos. A continuación, en la *Tabla 7.1*, se presentan los componentes tenidos en cuenta para la estimación de la I_{FT} .

Tabla 7.1 - Componentes directos e indirectos de la inversión fija total.

Componentes directos	Componentes indirectos
Gastos de estudio e investigaciones previas del proyecto	Ingeniería y supervisión
Equipos principales	Gastos de construcción
Instalación de equipos	Honorarios al contratista
Cañerías	Contingencias
Instrumentación y control	
Construcción	
Terreno y mejoras	
Gastos de puesta en marcha	

7.3.1 - Estimación de la inversión fija

La estimación de la inversión fija de un proyecto puede variar desde una aproximación rápida hasta un cálculo detallado preparado con exactitud a partir de un completo diagrama de flujo, con sus especificaciones, dependiendo de cuánto es lo que se sabe acerca del producto y de cuánto tiempo y esfuerzo se dispone para realizar dicha estimación. A continuación se presenta el método utilizado.

7.3.1.1 - Método de los factores (Chilton)

Este es un método mediante el cual puede extrapolarse la inversión fija de un sistema completo a partir del precio de los equipos principales del proceso con instalación. Fue desarrollado por Chilton en 1949, y permite determinar una estimación de la inversión fija mediante la selección cuidadosa de los factores dentro del rango dado. El punto de partida en este método es la estimación de la inversión de los equipos principales de proceso, se lo denomina I_E . La Inversión Fija, luego, puede obtenerse mediante la siguiente ecuación.

$$I_F = I_E \cdot (1 + \sum f_i) \cdot (1 + \sum f_{li})$$

Siendo:

I_F : Inversión Fija del proyecto (sin contar el terreno).

I_E : valor del equipo principal instalado.

f_i : factores de multiplicación para la estimación de los componentes de la inversión directa.

f_{li} : factores de multiplicación para la estimación de los componentes de la inversión indirecta.

Los factores de multiplicación mencionados se resumen en la *Tabla 7.2*.

Tabla 7.2 - Método para estimar I_F por factores.

Valor del equipo instalado de proceso	I_E
Factores experimentales como fracción del I_E	
<i>Tuberías de Proceso</i>	f_1
- Proceso de sólidos	0.07 - 0.10
- Proceso mixto	0.10 - 0.30
- Proceso de fluidos	0.30 - 0.60
<i>Instrumentación</i>	f_2
- Control poco automatizado	0.02 - 0.05
- Control parcialmente automatizado	0.05 - 0.10
- Control complejo, centralizado	0.10 - 0.15
<i>Edificios de fabricación</i>	f_3
- Construcción abierta	0.05 - 0.20
- Construcción semiabierta	0.20 - 0.60
- Construcción cerrada	0.60 - 1.00
<i>Plantas de servicios</i>	f_4
- Escasa adición a las existentes	0.00 - 0.05
- Adición considerable a las existentes	0.05 - 0.25
- Plantas de servicios totalmente nuevas	0.25 - 1.00
<i>Conexiones entre unidades</i>	f_5
- Entre las unidades de servicios	0.00 - 0.05
- Entre unidades de proceso separadas	0.05 - 0.15
- Entre unidades de proceso dispersas	0.15 - 0.25
Inversión Directa	$I_E \cdot (1 + \sum f_i)$
Factores experimentales como fracción de la Inversión Directa	
<i>Ingeniería y construcción</i>	f_{i1}
- Ingeniería inmediata	0.20 - 0.35
- Ingeniería compleja	0.35 - 0.50
<i>Factores de tamaño</i>	f_{i2}
- Unidad comercial grande	0.00 - 0.05
- Unidad comercial pequeña	0.05 - 0.15
- Unidad experimental	0.15 - 0.35
<i>Contingencias</i>	f_{i3}
- De la compañía	0.10 - 0.20
- Variaciones imprevistas	0.20 - 0.30
- Procesos exploratorios	0.30 - 0.50
Factor de Inversión Indirecta	$f_i = \sum f_{ij} + 1$
Inversión Fija	$I_F = I_E \cdot (1 + \sum f_i) \cdot f_i$

La AACE International (Asociación Americana de Ingeniería de Costos), ha desarrollado una práctica recomendada (RP 18R-97)⁸⁵ que permite definir los rangos esperados en la precisión de los costos y relacionar dichos rangos con el Nivel de Madurez en la Definición de los Entregables del Proyecto. Esto último, es un indicativo del nivel de avance de la ingeniería del proyecto. En la *Tabla 7.3* se muestra esta clasificación.

Tabla 7.3 - Nivel de Madurez en la Definición de los Entregables de un Proyecto y precisión esperada.

	Características primarias	Características secundarias		
Clase de estimación	Avance de ingeniería	Uso de la estimación	Metodología	Precisión esperada
V	0 - 2 %		Factores de capacidad; modelos paramétricos; criterio; analogía	Desde: -20 a -50% Hasta: +30 a +100%
IV	1 - 15 %	Estudio de factibilidad	Factores de equipos o modelos paramétricos	Desde: -15 a -30% Hasta: +20 a +50%
III	10 - 40 %	Autorización de presupuesto o control	Costos unitarios semi detallados	Desde: -10 a -20% Hasta: +10 a +30%
II	30 - 75 %	Control detallado o oferta	Costo unitario con mínima estimación de parámetros	Desde: -5 a -15% Hasta: +5 a +20%
I	65 - 100 %	Oferta para licitación / compra de equipos	Costo unitario detallado	Desde: -3 a -10% Hasta: +3 a +15%

El proyecto de prefactibilidad de producción de acetaldehído se encuentra, actualmente, entre las clases III y IV de la *Tabla 7.3*. Por lo tanto, el nivel de precisión esperado varía desde el -30 % hasta el +50 %, tomando el extremo de los intervalos. Se considera aceptable, entonces, estimar a la inversión fija mediante el método de factores.

A continuación, en la *Tabla 7.4*, se resumen los valores seleccionados para cada factor.

Tabla 7.4 - Factores para la estimación de la inversión fija.

Factores para la inversión directa		Factores para la inversión indirecta	
Tuberías de proceso (f_1)	0,45	Ingeniería y construcción (fl_1)	0,275
Instrumentación (f_2)	0,075	Factores de tamaño (fl_2)	0,025
Edificios de fabricación (f_3)	0,8	Contingencias (fl_3)	0,3
Plantas de servicios (f_4)	0,15		
Conexiones entre unidades (f_5)	0,1		

⁸⁵ Ref. N° 1

7.3.1.2 - Costo de los equipos

Para calcular el costo de los equipos involucrados, se puede contar con datos extraídos de bibliografía, o también con presupuestos informados por fabricantes de equipos que se ajusten a las condiciones requeridas del proceso. En el caso ideal, sería conveniente contar con presupuestos lo más aproximados posibles para cada tipo de equipo. Sin embargo, no es lo más habitual, sino que se cuenta con estimaciones tabuladas de diferentes equipos utilizados en la industria, junto con factores de corrección para poder llevarlos a las condiciones necesarias en el proceso. También puede darse el caso de que se cuente con precios desactualizados, o informados para otra capacidad de diseño, por lo que existen distintos métodos de corrección para poder solucionar estos problemas. A continuación se resumen brevemente estos métodos.

Índice de costos

Un problema que se da normalmente es que la información sobre el precio de los equipos o de plantas similares corresponde a períodos anteriores y se deben hacer modificaciones debido al cambio de las condiciones económicas a través del tiempo. Esta actualización puede realizarse mediante el uso de los índices de costos. Este índice es un número adimensional que muestra la relación entre el precio de un bien en un tiempo "t" y el precio del mismo bien en un tiempo "t base". Si se conoce el precio pasado en una fecha determinada, el precio presente se puede calcular por la siguiente ecuación:

$$\text{Precio presente} = \text{precio original} \cdot \frac{\text{índice a tiempo presente}}{\text{índice a tiempo del precio original}}$$

Los índices de costos se pueden usar en una estimación general, pero ningún índice toma en cuenta todos los factores, tales como avances tecnológicos específicos o condiciones locales. Los índices más comunes permiten una estimación aproximadamente correcta si el período de tiempo involucrado es menor de 10 años. Muchos tipos de índices se publican regularmente. Algunos de ellos se pueden utilizar para la estimación de los valores de adquisición de los equipos; otros se aplican a la mano de obra u otros campos específicos como construcción o materiales.

Si los índices de costos son confiables, indican el grado de desarrollo de un país. En la mayoría de los países desarrollados, algunos índices se actualizan en forma permanente, diaria o al menos por semana. Sin embargo, en otros países, la actualización es mensual, anual o no se realiza nunca. En situaciones extremas, más aún, sin datos estadísticos, la inversión y particularmente las grandes inversiones, se convierten en muy difíciles y de alto riesgo. Si no existen índices de costos, se recomienda considerar los valores e índices del país del cual serán importados los equipos.

Factor costo - capacidad (x)

La inversión fija no crece en la misma proporción que lo hace el tamaño. Por este motivo, cuando se dispone de datos para un proyecto similar, pero de diferente capacidad del deseado, pueden aproximarse los precios de plantas o equipos mediante la siguiente ecuación:

$$I_A = I_B \cdot \left(\frac{Q_A}{Q_B}\right)^x$$

Donde:

- I_A = Inversión deseada para la capacidad Q_A
- I_B = Inversión conocida para la capacidad Q_B
- x = factor costo - capacidad

En estudios donde se han analizado 200 diferentes plantas de procesos químicos y 75 diferentes tipos de equipos, se determinó que el valor promedio para el factor costo-capacidad es de 0,67-0,68 (Remer, 1990). Entonces, en ausencia del factor costo-capacidad para el equipo que es necesario cambiar la capacidad, se recomienda usar el factor 0,67. Esto significa que, para duplicar o triplicar la capacidad, el precio aumenta un 60 % o un 110 % respectivamente. Es importante observar que este método de estimación determina solamente el precio de adquisición del equipo, al cual se le deberá adicionar el gasto de su instalación (mano de obra, materiales, gastos de construcción) que elevarán el valor hallado.

Costos de importación

El precio de los equipos a ser importados es dado en términos FOB (Free On Board), el cual abarca tres conceptos: costo de la mercancía en el país de origen, transporte de los bienes y derechos de exportación. Bajo el término FOB, el comprador es responsable de la mercancía desde que sobrepasa la borda del buque en el puerto de embarque.

Otro término frecuente es el CIF, el cual abarca tres conceptos: costo de las mercancías en el país de origen, costo del seguro y costo del flete hasta el puerto de destino. Luego de dejar la carga, las responsabilidades pasan del vendedor al comprador, el cual debe hacerse cargo de los costos de importación y el flete hasta el punto de destino (la planta). El costo del envío internacional depende del origen de la carga, las dimensiones del equipo en cuestión, del costo del mismo y del tipo de contenedor que se utilice.

Finalmente si al CIF se le suma el seguro y el traslado hasta el punto de destino, se obtiene el término CIP, el cual hace responsable al vendedor hasta la entrega de la mercancía en planta.

Estos términos (FOB, CIF y CIP) son útiles en el comercio internacional. Sin embargo, para equipos nacionales solo se contempla el costo de compra, seguro y transporte hasta la planta.

Para estimar el precio de los equipos principales se utilizó el software “CapCost”, desarrollado por varios autores⁸⁶ en el libro “Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes”. Por otro lado, para aquellos equipos que no fueron tenidos en cuenta en la estimación, se considera un 10 % adicional respecto al total del valor de compra de los equipos principales. Luego, con fines prácticos, y dada la falta de información con respecto a los costos de envío e impuestos, se decide afectar al valor de compra de los equipos por un factor de 1,2 para contemplar estos costos. Finalmente, se adiciona un 20 % al precio final para incluir el costo de la instalación en planta.

En la *Tabla 7.5* se resumen los costos de los equipos más importantes en la planta, informados cómo FOB.

Tabla 7.5 - Costo de los equipos principales del proceso (FOB)

Equipo	Precio (USD)
Subplanta de reacción	
Reactores	107.800
Catalizador* ¹	843.740
Subplanta de separación	
Separador flash (T-301)	49.600
Absorbedor (T-302)	66.000
Torre de destilación acetaldehído (T-303)	87.400
Torre de destilación etanol (T-304)	146.000
Torre de destilación acetato de etilo (T-305)	103.000
Subplanta de licuación de H₂	
Sistema PSA	548.000
Compresor 1	860.000
Compresor 2	620.000
Compresor 3	550.000
Intercambiador I	35.320
Intercambiador II	17.450
Turbina de expansión	86.900
Válvula J-T	2.000
Tanque receptor	96.500
Sistema de refrigeración	690.000

⁸⁶ Ref. N° 2

— Equipos auxiliares —	
Intercambiadores de calor²	
Intercambiador 1	14.100
Intercambiador 2	77.300
Intercambiador 3	73.500
Intercambiador 4	11.200
Intercambiador 5	43.300
Intercambiador 6	10.600
Intercambiador 7	5.470
Intercambiador 8	17.700
Intercambiador 9	4.960
Intercambiador 10	9.040
Intercambiador 11	4.450
Intercambiador 12	4.450
Intercambiador 13	6.570
Intercambiador 14	10.200
Calderas	
Caldera de vapor	100.000
Equipo	Precio (USD)
Caldera de fluido térmico	204.000
Refrigeración	
Torre de enfriamiento de agua	144.000
Compresor	604.000
Condensador	87.800
Válvulas de expansión térmica	4.240
Impulsión de fluidos	
Soplador (S1)	24.650
Soplador (S2)	11.800
Bomba (B1)	10.200
Bomba (B2)	9.880
Bomba (B3)	14.200
Bomba (B4)	7.850
Tanques de almacenamiento³	
Acetaldehído	164.000
Acetato de etilo	94.400
Hidrógeno	96.500

Fluido térmico	121.900
Fluidos auxiliares^{*4}	
Fluido térmico	36.330
Amoníaco	1.320
Agua	62
Electricidad	
Centro de transformación de tensión	18.300
Total	6.957.980

^{*1} El precio del catalizador se obtuvo consultando directamente a los proveedores, para el diámetro de partícula requerido en el proceso, a través de la página de Alibaba. Este precio resultó de 188,9 USD/kg. Como se cuenta con el valor CIF, no se afecta a este costo por el 20 % considerado para contemplar los costos de envío, ni tampoco el 10 % por los equipos adicionales. Sólo se tiene en cuenta la instalación.

^{*2} Para todos los intercambiadores de calor, incluyendo al reactor, se seleccionó como material de construcción el acero al carbono. Este es el material más económico y es adecuado para fluidos que no provoquen corrosión. Ninguno de los fluidos que pasan por estos equipos presentan esta característica.

^{*3} El volumen de los tanques de almacenamiento de producto se obtuvo fijando un tiempo de residencia promedio para el fluido a almacenar. Se tomó un $t_{res}=15$ días. Para el hidrógeno, se detalló su cálculo en el capítulo referido al estudio de la subplanta de licuación.

^{*4} Para estimar los volúmenes requeridos de fluidos auxiliares se calculó el volumen que ocupan en cada equipo y en las tuberías (40 metros), considerando una velocidad de 1 m/s en intercambiadores y tuberías. Se adiciona un 25 % al total para contemplar el tanque de almacenamiento.

Para el sistema de vapor se consideró el agua necesaria para inundarlo.

Para los sistemas con agua, se consideró que la misma se renueva cada año.

7.3.1.3 - Costo del terreno

A fines de estimar el costo del terreno es necesario contar, por un lado, con el precio de m² de superficie para la localidad en donde se desea instalar la planta y, por otro lado, con una estimación de la superficie necesaria para instalar los equipos involucrados en el proceso.

Cabe destacar que el proceso de producción de acetaldehído ha sido diseñado considerando el emplazamiento de la planta productiva aledaña a la planta de producción de la materia prima, el bioetanol; esto se ve justificado con la disminución de costos, tanto de transporte como en la fase de acondicionamiento de materia prima.

La planta de producción de bioetanol está prevista a ser instalada sobre un terreno ubicado en la Ruta Provincial 307 de la provincia de Tucumán, cercana a la localidad de Acherai (*Figura 7.1*), y dicho terreno posee una superficie de 12 Ha. Se estima que ese área es suficientemente extensa como para albergar ambas plantas productivas por lo que, para el trabajo actual, se considera que el terreno ya está adquirido y por ello se informa un costo de terreno nulo.



Figura 7.1- Ubicación del lote elegido para la instalación de las plantas productivas.

7.3.1.4 - Estimación de la Inversión en Capital de Trabajo (I_W)

Existen variados métodos para estimar el capital de trabajo, entre los cuales se pueden mencionar:

- Tomar el 10 % de la inversión fija total (estimación aproximada para industrias químicas y alimenticias que se tiene en cuenta en ausencia de otros datos);
- Calcular los requerimientos de capital para operar la planta durante un determinado período de tiempo, en función de las condiciones de comercialización y en base a los costos de producción sin depreciación.

En este caso, debido a la ausencia de datos, **se decide estimar a la I_W como el 10 % de la I_{FT} .**

7.3.1.5 - Inversión Total (I_T)

Una vez obtenido el costo total de los equipos en planta e instalados, se estima la Inversión Fija mediante el método de los factores, como se mencionó con anterioridad. Para ello se utiliza la siguiente ecuación:

$$I_F = I_E \cdot (1 + \Sigma f_i) \cdot (1 + \Sigma l_i)$$

donde

- I_E : valor de los equipos principales instalados
- f_i : factores para la Inversión Directa (ver *Tabla 7.4*)
- fl_i : factores para la Inversión Indirecta (ver *Tabla 7.4*)

A partir de la suma directa entre la I_F y el costo de terreno se obtiene la Inversión Fija Total (IFT). En este caso, por lo detallado en la *Sección 7.3.1*:

$$IFT = I_F$$

Finalmente se calculó la Inversión Total (IT) como:

$$IT = IFT + I_W$$

Donde I_W representa el capital de trabajo.

En la *Tabla 7.6* se presentan los valores obtenidos en esta estimación.

Tabla 7.6 - Estimación de la Inversión.

Componente	Monto (USD)
Costo de equipos en planta	9.083.288
Costo de equipos instalados	10.899.946
Inversión Fija	46.311.144
Inversión en Capital de Trabajo	4.631.114
Inversión Fija Total	50.942.258

7.4 - Costos de producción (OpEx)

Los costos de producción son los gastos involucrados en mantener un proyecto en operación o una pieza de un equipo en producción. Para un determinado período de tiempo, pueden dividirse en dos grandes categorías: los costos variables, que son proporcionales a la producción, y los costos fijos, que son independientes de la producción. A continuación, en la *Tabla 7.7*, se resumen los costos de producción tenidos en cuenta en el análisis.

Tabla 7.7 - Costos de producción.

Costos variables	Costos fijos
Costo de materia prima	Costos de inversión:
Costo de mano de obra directa	Costo de depreciación
Costo de supervisión	Costo de impuestos
	Costo de seguros
	Costo de financiación
Costo de servicios	Costo de ventas y distribución
Costo de mantenimiento	Costo de dirección y administración
Costo de suministros	Costo de investigación y desarrollo
Costo de laboratorio	
Costo de regalías y patentes	

La estimación de costos operativos permite, conjuntamente con otras variables económicas, determinar la rentabilidad de un proyecto. De esta forma, el cálculo de costos contribuye a realizar inversiones que sean rentables y a seleccionar entre varias alternativas aquella que tenga el mayor retorno sobre la inversión.

Asimismo, la estimación permite determinar la estructura de costos y así evaluar los costos que tienen mayor influencia en la rentabilidad y poder diseñar alguna estrategia de reducción de costos o, simplemente, ajustar la estimación para esos componentes del costo de producción que son más relevantes.

7.4.1 - Costos variables

7.4.1.1 - Costo de materia prima

Este costo se obtiene mediante el producto de la cantidad de materia prima utilizada por su precio de venta. A pesar de que la planta de producción de acetaldehído es una adición a la existente planta de producción de bioetanol (materia prima del proceso), se considera al precio de este bien como el precio de venta. Esto es, a fines de poder estimar el valor agregado de destinar una parte de la producción a la generación de otro producto con valor comercial.

El precio de venta del bioetanol en Argentina está regulado por el Estado y, actualmente, es de 0,69 USD/Lt⁸⁷ (0,87 USD/kg). Por otro lado, de los balances de masa del proceso se tiene que la cantidad de materia prima para obtener la producción deseada, en base nominal, es de 1614 kg/año.

Luego, mediante la siguiente ecuación, se obtiene el costo de materia prima:

$$C_{MP} = W_{MP} \cdot P_{VentaMP}$$

7.4.1.2 - Costo de mano de obra directa

Este costo incluye los sueldos de los operarios involucrados directamente en el proceso. Para estimar el costo de mano de obra se utiliza el método de Wessel (*Figura 7.2*).

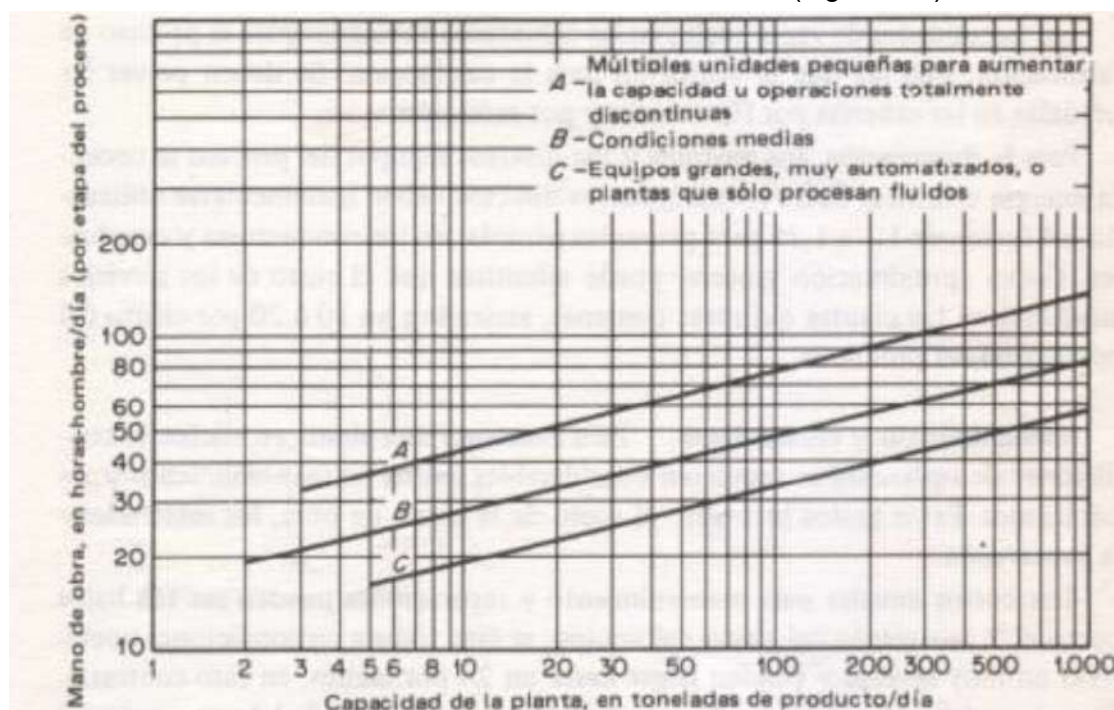


Figura 7.2 -Gráfico de Wessel.

⁸⁷ Valor actualizado el 16/01/2023

La capacidad de la planta, definida en base nominal, es de 1,37 ton/h, que equivalen a 32,877 ton/día. Se selecciona la curva paramétrica "C", dado que se trata de una planta que sólo procesa fluidos. Se lee en el eje de ordenadas el valor de mano de obra. Este resulta de 26 horas-hombre/día.etapa.

Para obtener la cantidad de horas hombre necesarias, se debe contar con la cantidad de etapas totales que se tienen en el proceso. A continuación, en la *Tabla 7.8*, se resumen estas etapas.

Tabla 7.8 - Etapas del proceso.

Operaciones	Etapas
Reacción	1 ⁸⁸
Separación flash + absorción	1
Destilación (3 equipos)	1
Calderas	1
Sistema de refrigeración	1
Licuaación de hidrógeno	1
Total	6

El número de horas hombre por día es de 156. Considerando turnos de 8 horas diarias, se requieren 20 operarios por día. A este valor hay que adicionar los días no laborables, tales como feriados, vacaciones y francos. Para considerar estos factores se adiciona un cuarto turno. Finalmente se estima 208 horas hombre por día y 26 operarios por día.

Además, es necesario contar con una estimación acerca del precio de la hora hombre. La Federación de Sindicatos de Trabajadores de Industrias Químicas y Petroquímicas de la R.A. (F.E.S.T.I.Q.yP.R.A) se encarga de establecer convenios colectivos para los trabajadores en la industria. Se considera para la estimación operarios de categoría "A": aquellos que efectúan tareas en planta y/o secciones productivas, en procesos de fabricación o parte de él, que requieren conocimientos del proceso y experiencias necesarias adquiridas a través del trabajo realizado. Para esta categoría, el precio base de la hora hombre es de 472,65 \$/hh, más un 1 % anual por antigüedad.

Al precio de la hora hombre, se le deben adicionar las cargas sociales. Para Argentina, estas cargas se componen de la siguiente manera⁸⁹ : jubilación (16 %), PAMI (2 %), Obra Social (6 %), Fondo Nacional de Empleo (1,5 %), Seguro de Vida Obligatorio (0,3 %) más un porcentaje a definir según cotice la ART. A falta de datos, se considera este último componente como un 10 %.

Luego, tomando 10 años de antigüedad y, además considerando un adicional del 35 % por las cargas sociales, el precio de la hora hombre resulta de **700 \$/hh (3,79 USD/hh)**.

⁸⁸ En la planta se requiere operar dos reactores en simultáneo, en uno ocurre la reacción y en el otro la reactivación.

⁸⁹ Ref. N° 3

7.4.1.3 - Costo de supervisión

Este costo comprende los salarios del personal responsable de la supervisión directa de las distintas operaciones. Habitualmente, se lo obtiene como un porcentaje que ronda el 10 al 25 % respecto del costo de mano de obra directa. Para obtener este costo, se considera el valor medio del intervalo (17,5 %).

7.4.1.4 - Costo de servicios

Energía eléctrica

Para estimar este costo se necesita contar con el consumo total en kWh de la planta y su precio según la empresa distribuidora. Los equipos principales considerados para el análisis son los presentados en los *Capítulos 5 y 6*. En la *Tabla 7.9*, se resumen estos equipos con sus respectivos valores de potencia.

Tabla 7.9 - Equipos considerados para el consumo energético.

Equipo	Potencia (kW)
Compresores de la subplanta de licuación de H ₂	648,1
Compresor del sistema de refrigeración	233,8
Forzador 1	22,5
Forzador 2	1,5
Ventiladores de la torre de enfriamiento*	42,3
Bomba B1	1,55
Bomba B2	0,25
Bomba B3	15,2
Bomba B4	6,5
Total	971,7

* Para los ventiladores de la torre de enfriamiento se consideró para el consumo total a la potencia consumida, 12,3 kW, y a la potencia requerida en el motor, 30 kW.

El ente regulador de este servicio es la Empresa de Distribución Eléctrica de Tucumán S.A. (E.D.E.T.S.A.). Según sus categorías de consumo, la planta entra dentro de la Tarifa 4 (grandes demandas). El costo total de electricidad se compone de un cargo fijo sin derecho a consumo más el costo del servicio en función de los kWh consumidos. Para esta tarifa, la energía se factura en tres bandas horarias durante el día:

- Horas pico (o punta): Horas durante las cuales el sistema está muy solicitado y, por ende, más caro. En general de 18 a 23 hs.
- Horas valle (o nocturnas): Horas durante las cuales el sistema está menos solicitado y, por ende, más barato. En general de 23 a 06 hs.
- Horas resto: El resto de las horas que no corresponden a ninguna de las otras dos categorías, con costo intermedio.

A su vez, estos precios se encuentran segmentados en baja y media tensión. El primero corresponde a un consumo de hasta 160 kW, mientras que para el segundo a partir de los 160 kW hasta los 15.000 kW. Por lo tanto, se toma el precio indicado para media tensión⁹⁰. Dado el uso de media tensión, en la lista de costos de equipos se adiciona un centro de transformación, que permite reducir la tensión para alimentar a los equipos de baja tensión.

A continuación se resumen los costos mencionados:

- Cargo fijo: 12.062,35 \$/mes
- Período horas de punta: 12,777 \$/kWh
- Período horas de resto: 12,771 \$/kWh
- Período horas de valle: 12,764 \$/kWh
- Promedio ponderado: 12,770 \$/kWh

Para obtener el costo anual de electricidad se parte del consumo eléctrico total de los equipos principales (*Tabla 7.9*). Este valor se afecta por 1,3 para contemplar el resto de los equipos de la planta que no entraron dentro de la categoría de “equipos críticos” y los edificios administrativos. El consumo se toma sobre unidades de horas, por ende, se lo multiplica por las horas diarias (24 horas) y los días de operación anuales (240 días/año). Finalmente, el costo anual variable se obtiene al multiplicar el consumo anual por el promedio ponderado del precio de la electricidad. A este valor se le adiciona el costo fijo para los meses de operación para así obtener el costo total anual:

$$\text{Consumo anual (kWh/año)} = \text{Consumo de equipos (kW)} * 24 \text{ (h/d)} * 240 \text{ (d/año)} * 1,3$$

$$\text{Costo variable anual (\$/año)} = \text{Consumo anual (kWh/año)} * \text{precio ponderado (\$/kWh)}$$

$$\text{Costo fijo anual (\$/año)} = \text{Costo fijo mensual (\$/mes)} * 8 \text{ (mes/año)}$$

$$\text{Costo anual total (\$/año)} = \text{Costo variable anual (\$/año)} + \text{Costo fijo anual (\$/año)}$$

⁹⁰ Ref. N° 4

Combustible

Para la estimación de este costo se tiene en cuenta la cantidad de combustible requerida para operar las calderas de la planta, presentadas en el *Capítulo 5*. La potencia total consumida resulta de 2800 kW, aproximadamente, y se consideró una eficiencia del 85 % para ambas calderas.

A la hora de seleccionar el combustible a utilizar es necesario analizar tanto sus propiedades energéticas como su disponibilidad y accesibilidad. Los compuestos más utilizados en la industria son el diésel, el gas licuado de petróleo, el gas natural, la biomasa y los biocombustibles, entre otros. El gas natural es uno de los combustibles más utilizados, sobre todo en países productores de este recurso, ya que se cuenta con numerosas redes de distribución, como es el caso de Argentina. Tucumán se encuentra dentro de la región del NOA y está abastecida de este servicio mediante el ente regulador GASNOR S.A. Debido a su disponibilidad se selecciona al gas natural como primera alternativa para el combustible a utilizar en la planta.

Teniendo en cuenta que la planta base, de producción de bioetanol, provee la materia prima para producir el compuesto de interés y sabiendo que este biocombustible puede utilizarse como material de combustión en calderas, se lo selecciona como segunda alternativa.

Es necesario contar, para cada combustible a analizar, con su calor de combustión, que es la energía que entrega en el proceso. Se resumen estos valores en la *Tabla 7.10*.

Tabla 7.10 - Calores de combustión.

Combustible	Calor de combustión (MJ/m ³)
Gas natural	36,7
Etanol	47,0

Luego, con los calores de combustión, la capacidad de las calderas y su eficiencia, se calcula el caudal de combustible necesario para cada alternativa. En la *Tabla 7.11* se resumen estos valores, junto con el precio de cada uno.

Tabla 7.11 - Requerimientos de combustible.

Combustible	Caudal volumétrico (m ³ /h)
Gas natural	323,3
Etanol	252,3

Por último, se analiza el costo de cada una de las alternativas propuestas. Para ello se obtuvieron los precios de cada combustible.

El precio del gas natural, provisto por la empresa GASNOR S.A., se encuentra categorizado según consumo⁹¹. Para consumos entre los 1000 a 10000 m³/día, corresponde el servicio G. Como el caudal a utilizar de este combustible cae dentro de este rango se lo selecciona como adecuado para obtener su precio. El costo total está formado por un cargo fijo más el cargo por consumo, más un cargo adicional por reserva fija. A continuación se resumen estos costos:

- Cargo fijo: 20.929,4 \$/mes
- Cargo por m³ de GN: 0,367 \$/m³
- Cargo por reserva mensual (m³/día): 12,74 \$/m³

Para el etanol, se tomó el precio de venta de la planta de bioetanol. A continuación, se resumen los costos obtenidos en la *Tabla 7.12*.

Tabla 7.12 - Costos para las distintas alternativas.

Combustible	Costo (USD/año)
Gas natural	124.670
Etanol	2.051.880

Se puede notar que si bien los requerimientos de etanol son menores que para el gas natural, el costo de utilizar este último es mucho menor al de usar etanol y, por lo tanto, se lo selecciona como combustible.

El costo de combustible se obtiene de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \text{Costo variable anual}(\$/\text{año}) &= \text{consumo anual (m}^3/\text{año)} * \text{precio m}^3 (\$/\text{m}^3) + \\ &+ \text{cargo por reserva}(\$/\text{m}^3) * \text{consumo por día (m}^3/\text{día)} * 240 \text{ días/año} \end{aligned}$$

$$\text{Costo fijo anual} (\$/\text{año}) = \text{costo fijo mensual}(\$/\text{mes}) * 8(\text{mes/año})$$

$$\text{Costo anual total} (\$/\text{año}) = \text{Costo variable anual}(\$/\text{año}) + \text{Costo fijo anual} (\$/\text{año})$$

⁹¹Ref. N° 5

Agua de red

Este costo tiene en cuenta el consumo de agua de red utilizado en el proceso, sin considerar la correspondiente a los sistemas cerrados, que fue incluida en los costos fijos. Para estimar el consumo, se tiene en cuenta el agua de reposición en la torre de enfriamiento. Por año, este equipo requiere una cantidad total de 980.000 m³, aproximadamente. Dado que la torre pierde agua en el proceso, producto de la evaporación, es necesario suministrar un adicional para contrarrestar estas pérdidas, llamado agua de reposición. Por lo general, esta cantidad de agua a reponer se suele estimar como un 10 % del total. Por lo tanto, se selecciona este valor para obtener el costo anual de este servicio.

La empresa a cargo de la distribución de este servicio es la Sociedad de Aguas de Tucumán (S.A.T.). Para la categoría No Residencial, el precio del agua de red es de 32,47 \$/m³⁹².

En la *Tabla 7.13* se resumen los costos de los servicios requeridos en el proceso. Todos los costos variables se obtuvieron para el 100 % de la capacidad de producción, en base nominal.

Tabla 7.13 - Costo de servicios.

Servicio	Costo (USD/año)
Energía eléctrica	490.908
Combustible	124.670
Agua de red	16.625

7.4.1.5 - Costo de mantenimiento

Este rubro incluye los costos de materiales y mano de obra empleados en planes de mantenimiento preventivos y en reparaciones debidas a roturas o desperfectos en el funcionamiento. Se estima como un porcentaje de la inversión fija, por lo general de entre el 2 y el 3 %. Se toma el valor medio del intervalo (**2,5 % de la I_F**), por ausencia de datos.

7.4.1.6 - Costo de suministros

Incluye los materiales usados por la planta industrial excluyendo los ítems que ya fueron considerados en los rubros correspondientes a materia prima, materiales de reparación o embalaje. **Se estima este costo como el 20 % del costo de mano de obra directa.**

⁹² Ref. N° 6

7.4.1.7 - Costo de laboratorio

Incluye el gasto de los ensayos de laboratorio para el control de las operaciones y el control de la calidad de los productos. Dada la ausencia de datos para el cálculo, este costo se puede estimar como un porcentaje del costo de la mano de obra directa del 2 - 20 %. Se fija el valor medio del intervalo (**11 % de la MO directa**).

7.4.1.8 - Costo de regalías y patentes

Este rubro abarca cualquier licencia de producción que deba pagarse sobre la base del porcentaje de operación de la planta. Se considera que como son procesos conocidos en la industria no es necesario tener en cuenta este costo.

7.4.1.9 - Conclusiones respecto a los Costos Variables

A continuación, en la *Tabla 7.14*, se resumen los costos variables anuales, y en la *Figura 7.3* se muestra su distribución.

Tabla 7.14 - Costos variables.

Componente	Costo (USD/año)
Materia prima	8.609.858
Mano de obra directa	189.196
Supervisión	33.109
Servicios	622.151
Mantenimiento	1.157.779
Suministros	37.839
Laboratorio	18.919
Costo variable total	10.668.851

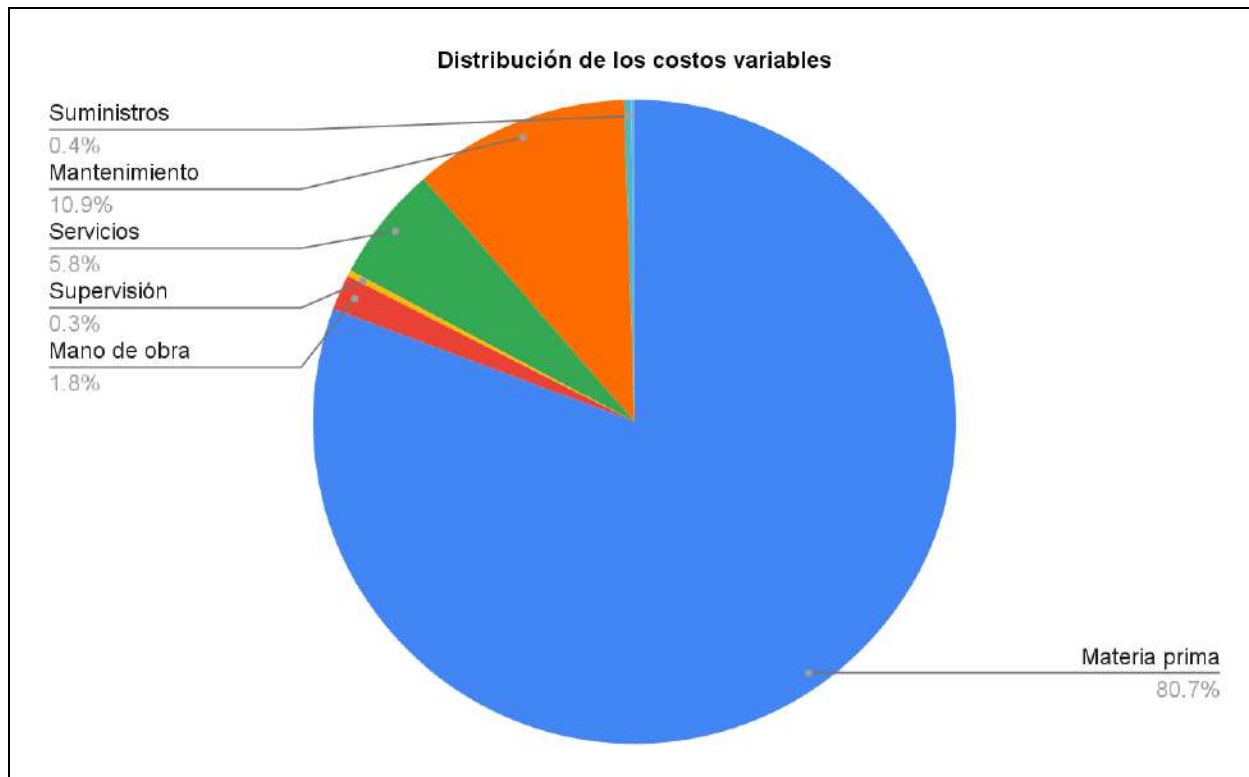


Figura 7.3 - Distribución de los costos variables.

Puede notarse que el componente de mayor peso en la estructura de costos es el de la materia prima (80,7 %). Este resultado es frecuente en la industria química.

7.4.2 - Costos fijos

7.4.2.1 - Costo de inversión

Este costo se conforma por cuatro componentes principales: depreciación, impuestos, seguros y financiación. A continuación se detalla cada uno de ellos.

Depreciación

La depreciación es la pérdida de valor que sufre un determinado activo como consecuencia del paso del tiempo, sea por el desgaste por su uso o por su obsolescencia. Considerar la depreciación de un bien en la contabilidad, supone acercarse o ajustarse a su valor real en cada momento. Si no se tuviera en cuenta la depreciación, no se cumplirían las normas contables y se tendría una imagen errónea de la empresa. Esto podría afectar a las decisiones que se tomen puesto que no se basan en datos fiables. En contabilidad financiera, la depreciación es un costo indirecto. Los principales objetivos para cargar un costo de depreciación pueden resumirse como:

- 1) recuperación del capital invertido en bienes de producción;
- 2) determinar con seguridad costos indirectos de producción para registro de costos;
- 3) incluir el costo de depreciación en gastos de operación con propósito de impuestos.

Comúnmente son cuatro los métodos de depreciación que se utilizan: Línea Recta, Porcentaje Fijo, Fondo de Amortización y Suma de Dígitos Anuales. Todos los métodos se basan estrictamente sobre el tiempo. Cada método de depreciación posee características únicas que lo hacen atractivo de acuerdo a las diferentes filosofías de administración. Sin embargo, con fines impositivos se podrá usar el permitido por la ley. En Argentina el método utilizado es el de la línea recta, por lo que se selecciona este método para estimar el costo de depreciación interna.

El valor depreciado anual puede ser calculado con la siguiente fórmula:

$$\text{Valor depreciado anual} = D = e \cdot (I_F - L)$$

Donde:

- e: factor de depreciación anual.
- $(I_F - L)$: Inversión Fija depreciable.
- I_F : Inversión Fija.
- L: valor residual al final de la vida útil del proyecto.

El valor residual es el valor que tiene un bien o un proyecto al final de su vida útil, una vez deducidos los gastos por depreciación. Desde otro punto de vista, el valor residual es el importe que la empresa espera obtener al vender el bien cuando finalice su vida útil. Estimar este valor no es sencillo, ya que se debe contar con información detallada acerca del bien o del proyecto, según sea el caso. Como una primera estimación, se puede considerar al valor residual como un **10 % de la Inversión Fija**.

Para el método de la línea recta, el factor de depreciación anual se obtiene de la siguiente manera:

$$e = \frac{1}{n}$$

Siendo n la vida útil del proyecto en años. Este factor se mantiene constante durante toda la vida útil, por lo que el costo de depreciación también es constante. Este valor se define en **20 años**, siendo este un valor adecuado para plantas de este tipo, teniendo en cuenta la vida útil de los equipos involucrados en el proceso.

Impuestos

A este rubro le corresponden los impuestos fijos a la propiedad. Puede variar de acuerdo con las leyes vigentes y depende del lugar donde está ubicada la planta industrial, ya que las que están situadas en ciudades pagan más impuestos que las correspondientes a regiones menos pobladas. No se incluyen aquí los impuestos sobre la ganancia. En ausencia de datos, se estima entre el 1 al 2 % de la Inversión Fija.

Seguros

Los seguros dependen del tipo de proceso e incluyen seguros sobre la propiedad (incendio, robo parcial o total) para el personal y para las mercaderías (pérdidas parciales, totales), entre otros. Normalmente el monto anual de este rubro se estima entre el 0,5 al 1 % de la Inversión Fija.

Financiación

Este componente tiene en cuenta el pago de intereses por capital prestado. Dado que se considera que el proyecto se afronta con capital propio, no se consideran costos de financiación.

7.4.2.2 - Costo de venta y distribución

Este componente del costo de producción incluye los salarios y gastos generales de oficinas de ventas, los salarios, comisiones y gastos de viaje para empleados del departamento ventas, los gastos de embarque y transporte, los gastos extras asociados con las ventas, los servicios técnicos de venta y la participación en ferias, entre otros. Este costo se calcula como un porcentaje (del 1 al 5 %) de los ingresos por ventas anuales.

7.4.2.3 - Costo de dirección y administración

Este costo incluye todos los gastos de la administración de la empresa, como por ejemplo los salarios del personal administrativo y los gastos generales, tanto de insumos como de servicios. Además, contempla los gastos de dirección de la empresa, como por ejemplo el salario de la conducción superior, el pago a servicios de asesoramiento legal, contable y de auditoría.

Se puede estimar este costo como un porcentaje del 20-40 % del costo de mano de obra directa. Se toma el valor medio del intervalo.

7.4.2.4 - Costo de investigación y desarrollo

Este costo corresponde a los gastos involucrados en las actividades de investigación y desarrollo orientadas a la innovación de los productos y de los procesos. Incluyen los salarios del personal directamente relacionado con este tipo de tareas, los gastos fijos y de operación de toda la maquinaria y equipos utilizados, el costo de materiales y suministros, gastos generales directos y costos varios. En esta etapa del proyecto no se cuenta con información acerca de este rubro, por lo que se estima su costo como un porcentaje (0 - 5 %) de los ingresos por venta anuales.

7.4.2.5 - Conclusiones respecto a los Costos Fijos

A continuación, en la *Tabla 7.15*, se resumen los costos fijos anuales, y en la *Figura 7.4* se muestra su distribución.

Tabla 7.15 - Costos fijos.

Componente	Costo (USD/año)
Inversión	3.241.780
Venta y distribución	510.391
Administración y dirección	56.759
Investigación y desarrollo	425.326
Costo fijo total	4.234.257

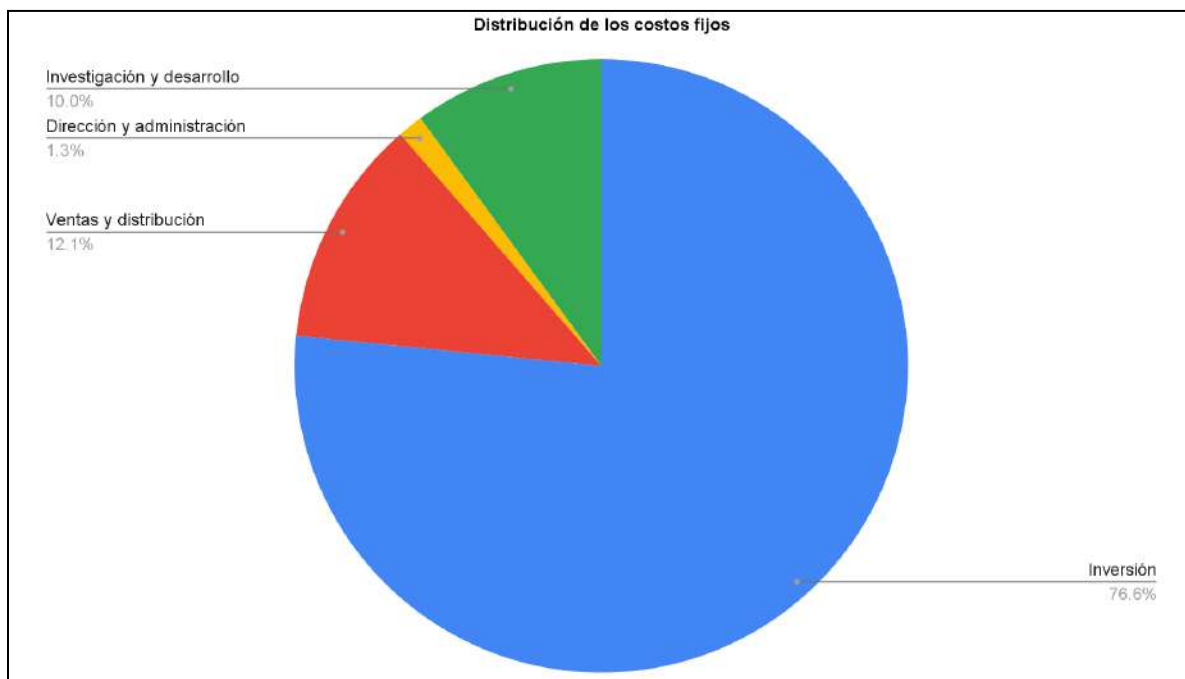


Figura 7.4 - Distribución de los Costos Fijos

El componente mayoritario en la estructura de costos corresponde al rubro de inversión (76,6 %), seguido por ventas y distribución (12,1 %) e investigación y desarrollo (10,0 %).

El costo de producción total se obtiene como la suma de los costos variables y los costos fijos. En la *Figura 7.5* se muestra su distribución.

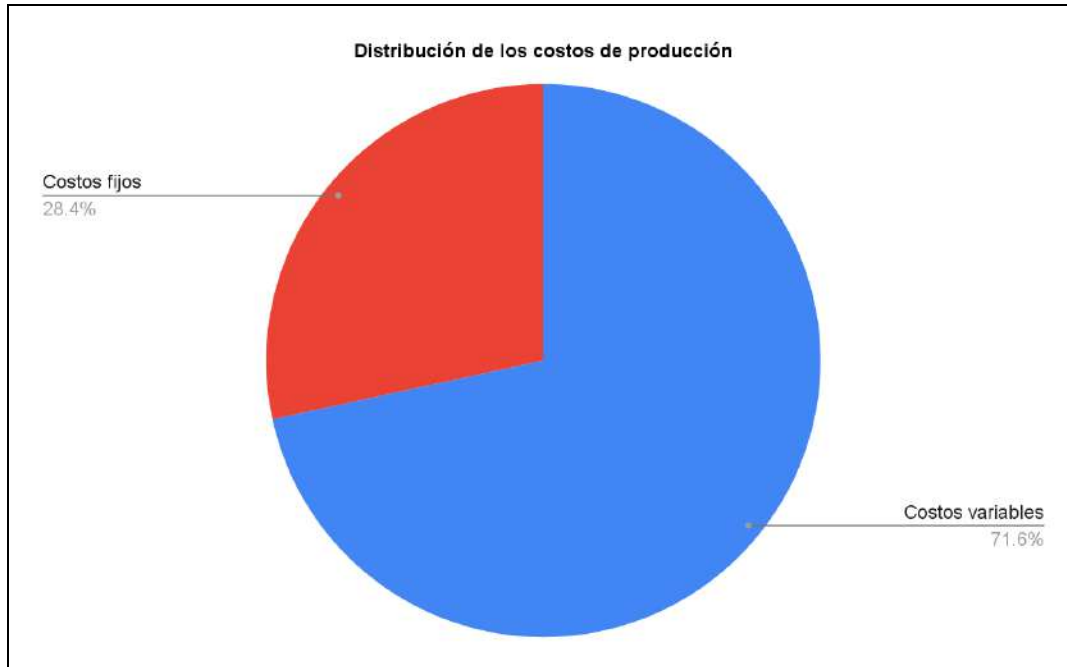


Figura 7.5 - Distribución de los costos totales de producción.

Los costos variables resultaron ser el componente mayoritario dentro de la estructura de costos totales (71,6 %). Luego, la capacidad de producción tendrá un gran impacto sobre los costos totales de producción.

Finalmente, afectando al costo de producción total por la producción de acetaldehído en base nominal, se obtiene el costo de producción unitario. En la *Tabla 7.16* se resumen los resultados obtenidos:

Tabla 7.16 - Resumen de costos.

Costo de producción total (USD/año)	14.903.111
Costo de producción unitario (USD/kg)	1,242

7.5 - Cronograma

En la *Figura 7.6* se presenta el cronograma propuesto para el proyecto. Se considera el período de planificación, construcción y puesta en marcha de dos años, hasta alcanzar los niveles de producción de diseño.

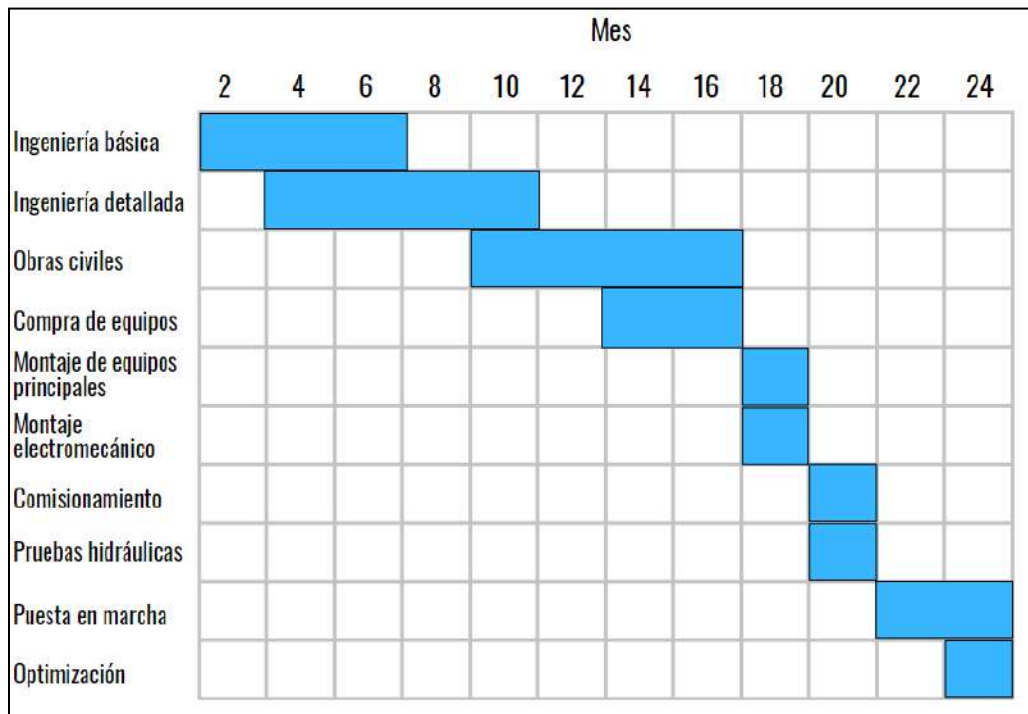


Figura 7.6 - Cronograma propuesto para el proceso.

7.6 - Justificación de la inversión

7.6.1 - Ingresos por ventas

Los ingresos por ventas, para cada año del proyecto, están ligados directamente al porcentaje de utilización de la planta. Como todo proyecto, no es posible operar al 100 % de la capacidad instalada al comienzo del mismo, sino que se comienza con un determinado porcentaje y luego se aumenta la capacidad año a año hasta alcanzar el 100 %. Se decide comenzar en el primer año del proyecto con un 75 % de la capacidad instalada, y aumentar un 15 % anual. De esta manera, se alcanza el 100 % de utilización para el tercer año del proyecto. Con esto fijado, se pueden calcular los ingresos por venta para cada año, afectando a la producción por el porcentaje de utilización para ese año.

Como se mencionó con anterioridad, tanto el acetaldehído como los productos secundarios de la reacción se comercializan. En la *Tabla 7.17*, se resumen los precios de venta considerados para cada uno de estos productos, junto con su producción anual (para la capacidad nominal).

Tabla 7.17 - Producción y precio de venta para los productos del proceso.

Producto	Producción (ton/año)	Precio de venta (USD/kg)
Acetaldehído	8.575,7	1,749
Acetato de etilo	849,0	1,504
Hidrógeno	369,6	2,0

7.6.2 - Cuadro de fuentes y usos del proyecto

La rentabilidad es un parámetro que permite medir la factibilidad de un proyecto. Para estimarla, primero es necesario conocer los flujos de caja del proyecto. El flujo de caja se define como la diferencia entre los ingresos por ventas y los costos operativos, (sin los costos de depreciación), después del pago de impuestos. Se obtiene de la siguiente manera:

$$FC = V - C - t \cdot [(V - C - e \cdot (I_F - L))]$$

Donde:

- FC: flujo de caja,
- V: ingresos por ventas,
- C: costos de producción,
- t: tasa impositiva,
- e: factor de depreciación legal
- $(I_F - L)$: inversión fija depreciable.

Para obtener el flujo de caja por año de una manera más sencilla, se integran los datos necesarios en un cuadro, denominado Cuadro de Fuentes y Usos. Dicho cuadro muestra cuál es el origen o fuente de los fondos y cuál es su destino final, es decir, su uso. Las fuentes se obtienen como la suma de los ingresos por ventas más el capital propio, siendo este último el capital necesario para afrontar la inversión inicial del proyecto. Los usos, en cambio, se definen como los costos de producción más el activo fijo y el activo de trabajo, es decir el capital destinado a la inversión. La diferencia entre las fuentes y los usos da como resultado el Beneficio Neto Antes de Impuestos (BNAI). Descontando a este valor los impuestos, se obtiene el Flujo de Caja.

Como se mencionó en la *Sección 7.4.2.1*, el método legal para el cálculo de depreciación en Argentina es el de la línea recta, que coincide con el seleccionado para la depreciación interna. En cuanto a la tasa impositiva, se tomó un valor del **35 %**.

En la *Tabla 7.18* se muestra el cuadro de fuentes y usos del proyecto, junto con los valores del flujo de caja para cada año.

Tabla 7.18 - Cuadro de fuentes y usos. Valores expresados en USD.

Año	1	2	3-20
Utilización (%)	70	85	100
Fuentes (a)			
Capital propio	50.942.258		
Ventas netas anuales	11.909.139	14.461.098	17.013.057
Total (a)	62.851.398	14.461.098	17.013.057
Usos (b)			
Activo fijo	46.311.144		
Activo de trabajo	4.631.114		
Costo de producción	11.702.455	13.302.782	14.903.110
Total (b)	62.644.713	13.302.782	14.903.110
BNAI = (a)-(b)			
BNAI = (a)-(b)	206.685	1.158.316	2.109.946
Impuestos	72.340	405.411	738.481
Beneficio Neto	134.345	752.905	1.371.465
Depreciación	2.084.001	2.084.001	2.084.001
Flujo de caja			
Flujo de caja	2.218.347	2.836.907	3.455.467

7.6.3 - Rentabilidad

Para evaluar la rentabilidad, se utilizaron dos métodos dinámicos y uno estático. La diferencia radica en que los métodos dinámicos tienen en cuenta el valor temporal del dinero, mientras que los estáticos no. El método estático seleccionado es el *Tiempo de Repago*, mientras que los dinámicos son el *Valor Presente* y la *Tasa Interna de Retorno*.

Previo a la resolución de estos métodos, es necesario establecer un estándar que permita comparar los valores obtenidos, para luego extraer conclusiones. Este estándar se define como Tasa de Rentabilidad Mínima Aceptable (TRMA). Para seleccionarla, es necesario introducir el concepto de riesgo de una inversión. Las inversiones de capital se realizan con la expectativa de obtener una rentabilidad anual, pero siempre existe la posibilidad de que se produzcan pérdidas. Este hecho es lo que se denomina el riesgo que acompaña a toda inversión. En general, cuanto mayor es el riesgo, mayor es la TRMA esperada y menor el tiempo previsto para la recuperación de la inversión. En la *Tabla 7.19* se resumen los valores usualmente considerados, en función del tipo de proyecto y el riesgo asociado.

*Tabla 7.19 - TRMA según el tipo de proyecto.*⁹³

Tipo de proyecto	Grado de riesgo	TRMA (%)
Proyectos cortos, modificación de plantas existentes	Bajo	10-15
Equipos específicos Proyectos de mediano plazo Instrumentación automática	Medio	15-25
Nuevas instalaciones para un nuevo producto	Alto	>25

Dadas las características del proceso, se considera que el grado de riesgo es medio, por lo que **se selecciona una TRMA del 20 %**, tomando el valor medio del intervalo.

A continuación se resumen los métodos mencionados para la evaluación de la rentabilidad.

⁹³ Ref. N° 7

7.6.3.1 - Valor Presente (VP)

Este método se basa en el valor presente del dinero, que explica que una unidad monetaria recibida a futuro vale menos que la recibida en el presente, dado que si el dinero estuviese disponible en la actualidad, el mismo podría ser invertido para ganar un rendimiento a lo largo del tiempo. El método supone igualdad de oportunidades para la reinversión de los flujos de caja a una tasa de interés asignada previamente (TRMA)

Se obtiene de la siguiente manera:

$$VP = \sum_{j=1}^n \frac{FC_j}{(1+i)^j} - I_T$$

Donde:

- j: año del proyecto;
- i: TRMA;
- FC_j: flujo de caja en el año j;
- I_T: Inversión total

Si el valor presente resulta mayor que cero, se considera que el proyecto es rentable.

7.6.3.2 - Tasa Interna de Retorno (TIR)

La Tasa Interna de Retorno representa la tasa para la cual el Valor Presente es igual a cero. Sirve como indicador de la rentabilidad cuando se la compara con la Tasa de Rentabilidad Mínima Aceptable. La TIR se calcula de la siguiente manera:

$$0 = \sum_{j=1}^n \frac{FC_j}{(1+r)^j} - I_T$$

En donde “r” es la Tasa Interna de Retorno.

Si la TIR es mayor a la TRMA, el proyecto se acepta, mientras que si es menor o igual a 0, se rechaza.

7.6.3.3 - Tiempo de Repago (nR)

El tiempo de repago se define como el mínimo período de tiempo necesario para recuperar la inversión original en forma de los flujos de caja del proyecto. Este tiempo se obtiene graficando en el eje de abscisas al período de tiempo, en años, y en el eje de ordenadas al flujo de caja acumulado. Para obtener el flujo de caja acumulado, se parte de la inversión fija depreciable para el año 0, y luego, para cada año, se le suma el correspondiente flujo de caja. De esta manera, el tiempo de repago se lee directamente del gráfico como el año en el que el flujo de caja acumulado corta el eje de abscisas, es decir, se hace cero.

Si el tiempo de repago es menor a la mitad de la vida útil del proyecto, entonces se considera que es rentable, en caso contrario, se rechaza.

En la *Figura 7.7*, se muestra el gráfico para la determinación del Tiempo de Repago.

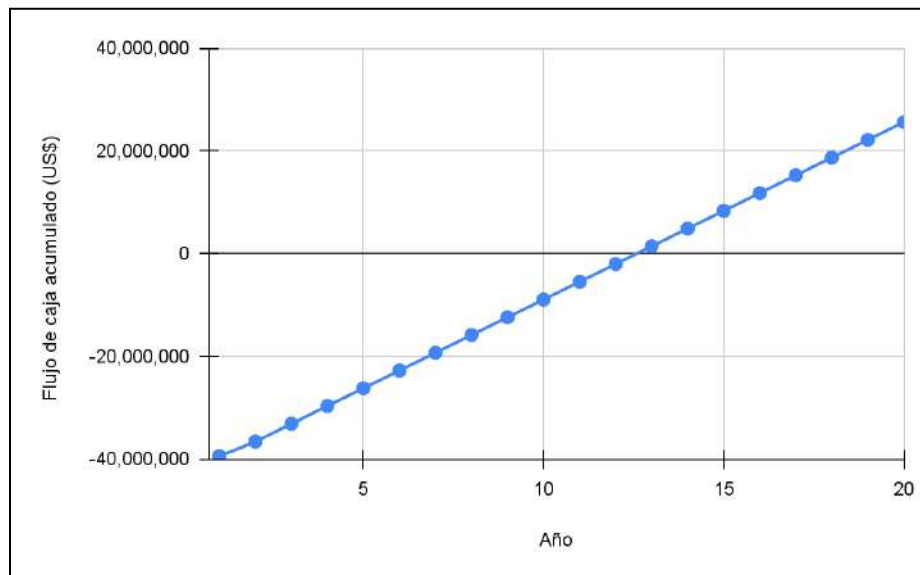


Figura 7.7 - Tiempo de repago.

En la *Tabla 7.20*, se resumen los resultados obtenidos para los tres métodos propuestos.

Tabla 7.20 - Indicadores de la rentabilidad del proyecto.

Valor presente (USD)	-35.334.480
Tasa Interna de Retorno (%)	3,7
Tiempo de repago (años)	12,6

Como denota la *Tabla 7.20*, tanto los métodos dinámicos como el estático indican que **el proyecto no es rentable**. Al comparar la TIR con la TRMA se observa, que al considerar el valor presente del dinero, el proyecto no resulta rentable (3,7 % frente a 20,0 %).

Por lo tanto, en estas condiciones, no es aconsejable continuar con el desarrollo del proyecto.

De manera meramente orientativa, se calculó a qué capacidad es necesario ampliar la producción para poder alcanzar la rentabilidad. Como se cuenta con el valor del equipamiento para la capacidad actual, se afectó este valor con un factor costo capacidad (0,67, recomendado para plantas químicas), y luego se calculó la inversión fija para los nuevos niveles de producción propuestos. En cuanto a los costos operativos, se modificaron de manera proporcional a la producción, los rubros de materia prima, mano de obra y servicios, junto con los ingresos por venta. Finalmente, para cada nivel de producción, se obtuvieron los parámetros que permiten establecer la rentabilidad del proyecto. En particular, se tuvieron en cuenta los métodos dinámicos, la TIR y el VP, ya que el tiempo de repago resulta en todos los casos menor a la mitad de la vida útil del proyecto. En las *Figuras 7.8 y 7.9* se muestran los resultados obtenidos.

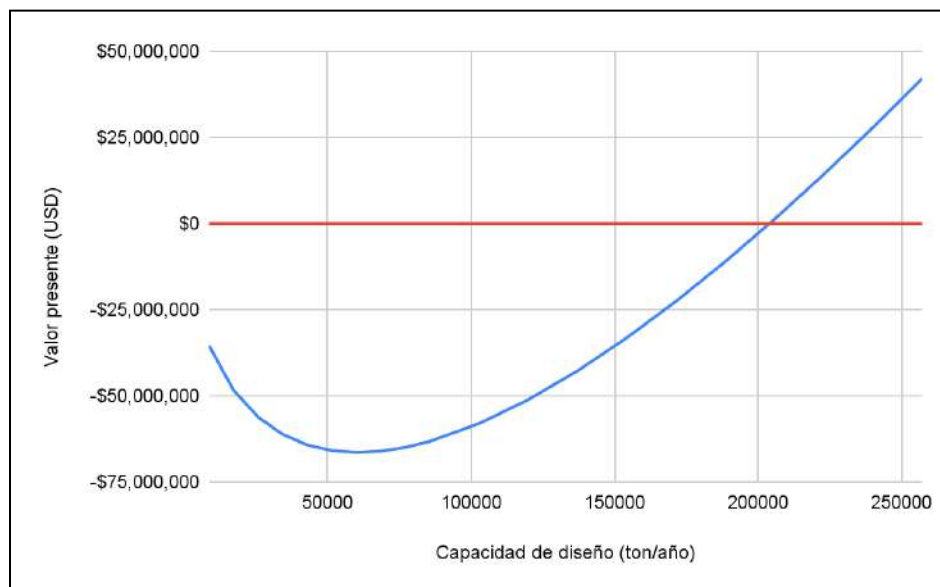


Figura 7.8. Variación del valor presente con la capacidad de diseño.

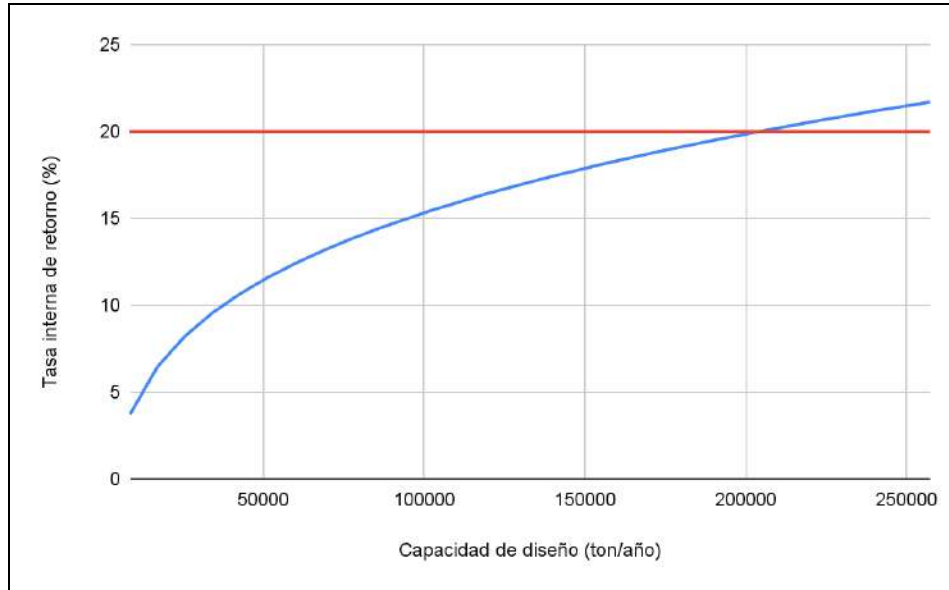


Figura 7.9. Variación de la tasa interna de retorno con la capacidad de diseño.

Del análisis de las figuras se desprende que la capacidad debería aumentar al menos 24 veces para poder alcanzar la rentabilidad. Si bien este análisis no es preciso, debido a las estimaciones realizadas, sirve como un parámetro de orientación, en caso de que se desee retomar el estudio del proyecto de todas formas.

7.6.4 - Alternativa propuesta

Como ilustra la *Figura 7.10*, la subplanta de licuación de hidrógeno tiene un gran peso en la inversión total. Sin embargo, el impacto del hidrógeno en los ingresos por venta es significativamente menor (*Figura 7.11*)

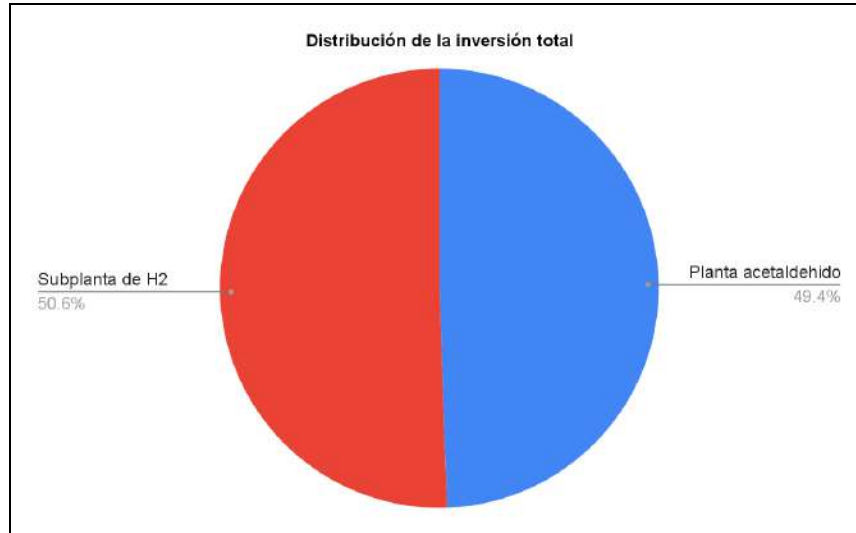


Figura 7.10 - Distribución de la inversión total.

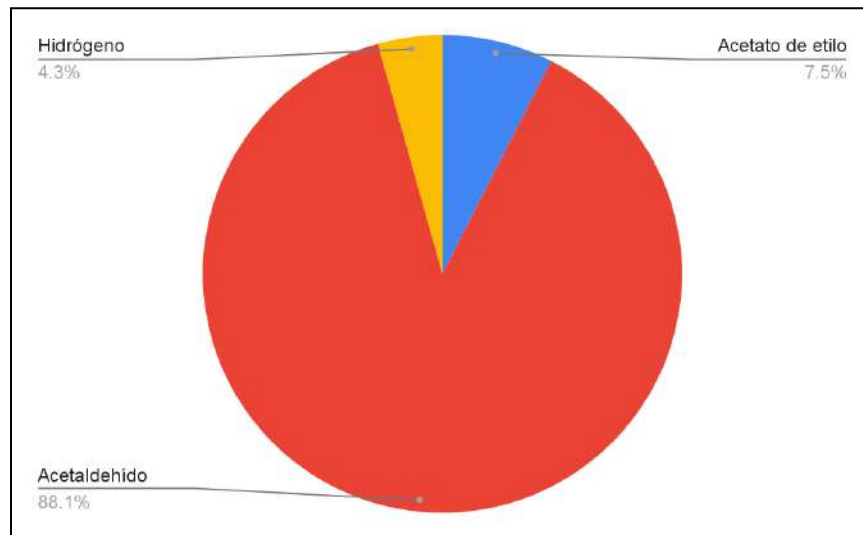


Figura 7.11 - Distribución de los ingresos por venta.

Como puede observarse, los ingresos por venta del hidrógeno representan sólo el 4,5 % de los ingresos totales, mientras que los costos de inversión asociados a su subplanta de licuación son de, aproximadamente, el 50 % del total.

En base a esto, se analiza la alternativa de no incorporar esta subplanta y, en cambio, utilizarlo como combustible en el proceso. Al no contemplar la planta para licuarlo, no es posible su venta, por lo tanto, no se considera el precio del hidrógeno para quemarlo, en otras palabras, el costo del combustible es nulo.

En la *Tabla 7.21* se puede observar la rentabilidad tras aplicar los cambios.

Tabla 7.21 - Indicadores de la rentabilidad del proyecto para la alternativa propuesta.

Valor presente (USD)	-7,707,773
Tasa Interna de Retorno (%)	13.25
Tiempo de repago (años)	6,3

Sin la incorporación de la planta de licuación de hidrógeno, se obtienen valores más altos de rentabilidad. No obstante, los valores aún no son lo suficientemente altos para que el proyecto sea rentable.

Para esta alternativa también se efectúa el análisis de capacidad de diseño y rentabilidad (*Figura 7.12*)

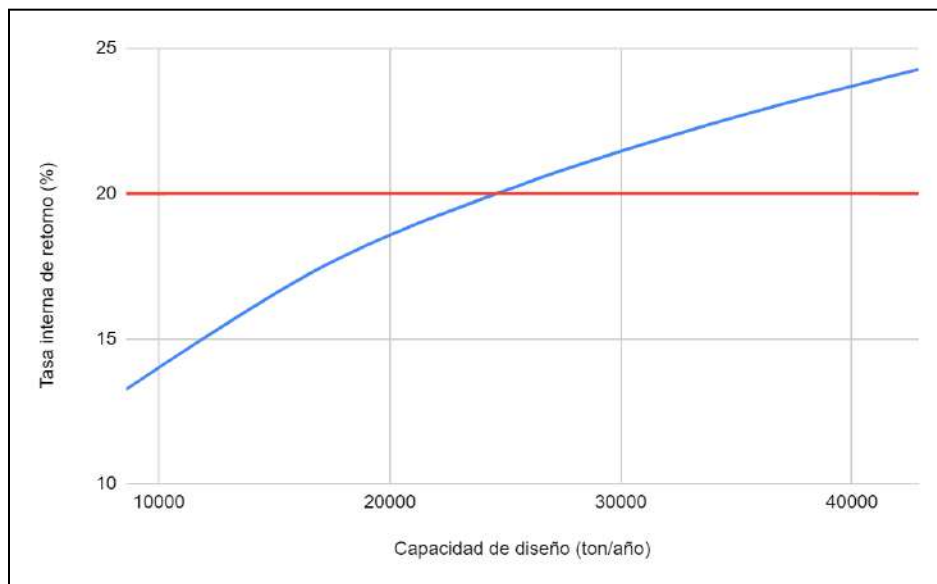


Figura 7.12. Variación de la tasa interna de retorno con la capacidad de diseño.

En base a la *Figura 7.12* se obtiene que la capacidad de diseño debería aumentar aproximadamente tres veces para que el proyecto sea rentable. Este valor es significativamente menor al obtenido para la planta original.

Finalmente, se concluye que el proyecto original no es rentable. Es posible obtener un mejor resultado si se prescinde de la planta de licuación de hidrógeno, no obstante, aun bajo esa alternativa es necesario aumentar la capacidad de diseño. Se requiere un estudio de mercado con mayor detalle, que permita descubrir si es posible comercializar una mayor cantidad de producto.

7.6.5 - Análisis de sensibilidad

El objetivo de este análisis es evaluar el impacto que tiene modificar distintas variables sobre la rentabilidad del proyecto. Si ante un pequeño cambio en el valor de la variable seleccionada se tiene un gran cambio en la rentabilidad, entonces es sensible a esa variable.

En particular, se seleccionan las variables consideradas como críticas al proceso, es decir las que se creen que tienen mayor incidencia sobre él:

- Variación en el precio de compra de la materia prima.
- Variación en el precio de venta de los productos.

Para hacer este análisis, se toma una variación de los precios mencionados del $\pm 20\%$ y se recalculan los indicadores de la rentabilidad tratados en la sección anterior, en particular, la TIR y el tiempo de repago. Con estos resultados, se obtienen los parámetros relativos, en función de la desviación que tiene cada valor con respecto al caso base, es decir, sin modificar el precio. En las Figuras 7.13 y 7.14, se muestran los resultados obtenidos.

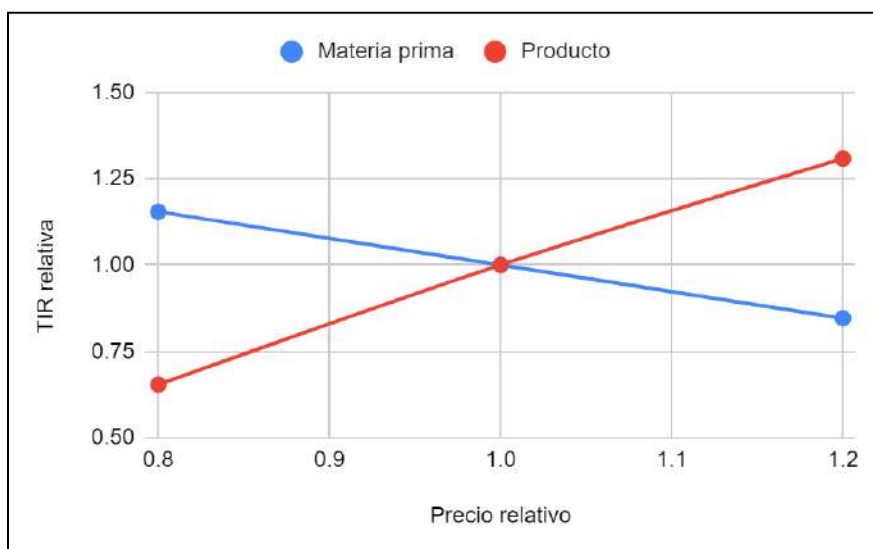


Figura 7.13 - Variación de la TIR ante la modificación en los precios de materia prima y producto.

Del análisis de la Figura 7.13 se desprende que la TIR es más sensible a la variación en el precio del acetaldehído, debido a la mayor pendiente que tiene la recta, con respecto a la variación en la materia prima. Ante un cambio del $\pm 20\%$ en el precio del acetaldehído, la TIR varía, respectivamente, un 30 y un 35%. En cambio, para la misma variación en el precio de la materia prima, la TIR varía, en ambos casos, un 15 % aproximadamente.

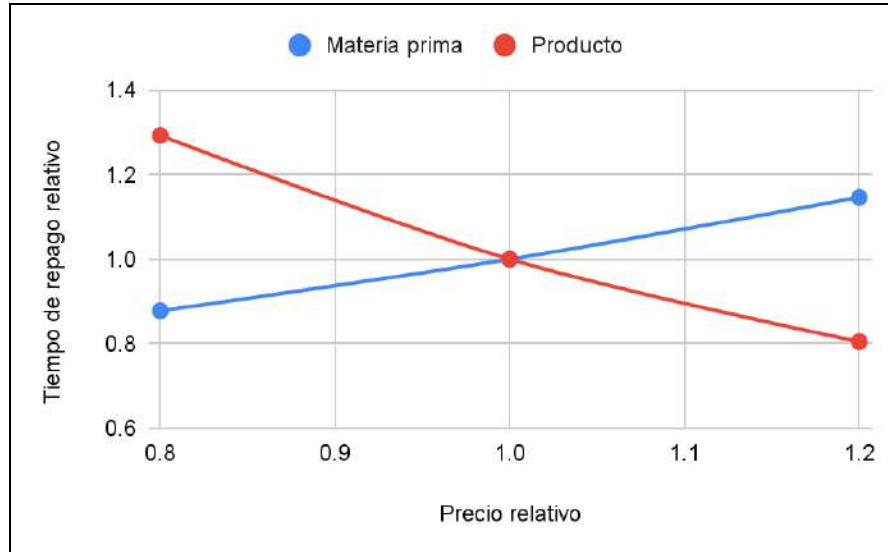


Figura 7.14 - Variación del tiempo de repago ante la modificación en los precios de materia prima y producto.

El mismo análisis puede realizarse para el tiempo de repago (*Figura 7.14*). Nuevamente, la pendiente de la recta se da para el caso de la variación en el precio del acetaldehído. Ante el mismo cambio en el precio de venta, el tiempo de repago varía un 20 y 30 %, mientras que para la materia prima, esta variación se da entre el 13 y el 14 %.

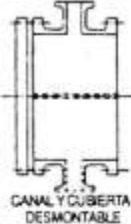
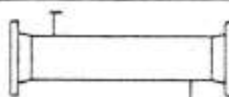




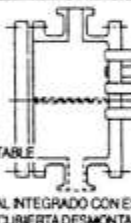
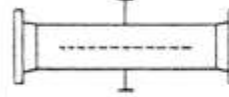

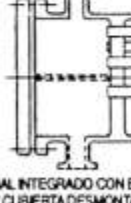
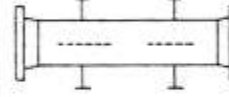


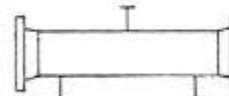

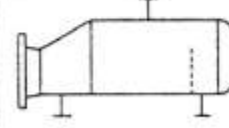

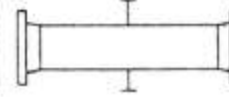


Se concluye entonces, que la rentabilidad es más sensible a variaciones en el precio de venta del acetaldehído. Por lo tanto, en etapas posteriores del diseño de este proyecto es necesario profundizar en el estudio de mercado de este compuesto, con el fin de tener una mayor precisión en su precio de venta y sus proyecciones a futuro, ya que la rentabilidad depende, en mayor medida, de esta variable.

Bibliografía Capítulo 7

1. AACE International Recommended Practice no. 18R-97 - Cost Estimate Classification System.
2. Turton, R. (2017). *Analysis, synthesis, and design of chemical processes* (5ta.ed.--.). Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall.
3. “Salario”. Disponible en:
<https://www.argentina.gob.ar/trabajo/buscastrabajo/conocetusderechos/salario> . Fecha de consulta: 07/02/2023
4. “Cómo leer la factura eléctrica”. Disponible en:
https://www.argentina.gob.ar/sites/default/files/como_leer_la_factura_electrica_-_ssayee.pdf . Fecha de consulta: 07/02/2023
5. “GASNOR. Tarifas vigentes”. Disponible en:
<https://www.gasnor.com/tarifas-vigentes/tarifario.pdf> . Fecha de consulta: 08/02/2023
6. Cuadro Tarifario de la SAT (Sociedad Aguas de Tucumán) vigente desde el 27/05/2022 - Resolución ERSEPT N° 323/2022 . Disponible en:
http://www.ersept.gob.ar/images/cuadro-tarifario/CT_SAT.pdf . Fecha de consulta: 08/02/2023
7. Happel, J. (1981) *Economía de procesos químicos*. Reverté

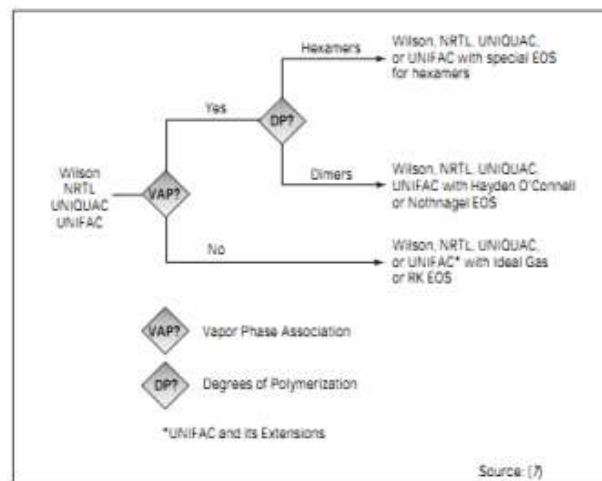
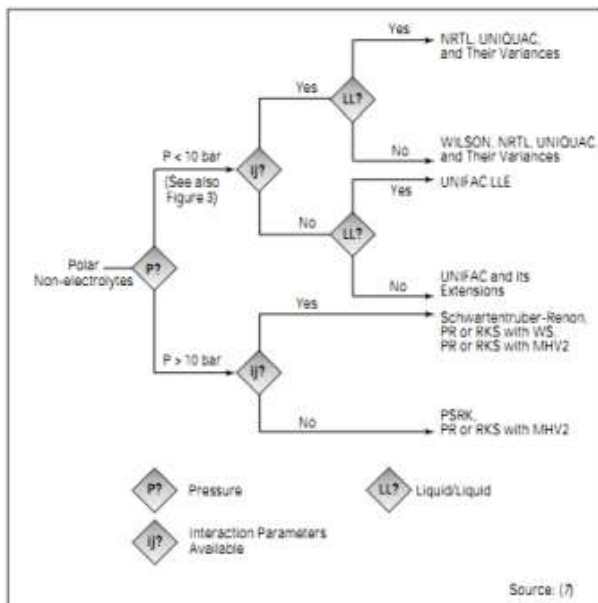
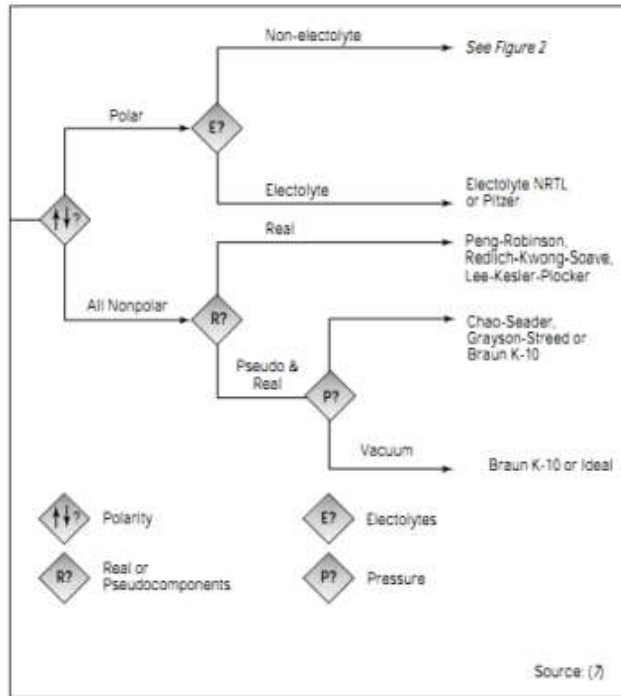
Anexo A

Configuraciones normalizadas de intercambiadores de calor (TEMA)

TIPOS DE CABEZAL ESTACIONARIO, EXTREMO FRONTAL		TIPOS DE CORAZAS		TIPOS DE CABEZALES, EXTREMO POSTERIOR	
A	 CANAL Y CUBIERTA DESMONTABLE	E	 CORAZA DE UN PASO	L	 DE ESPEJO FLUO COMO EL CABEZAL ESTACIONARIO "A"
B	 CASQUETE (CUBIERTA INTEGRADA)	F	 CORAZA DE DOS PASOS CON DEFLECTOR LONGITUDINAL	M	 DE ESPEJO FLUO COMO EL CABEZAL ESTACIONARIO "B"
C	 SOLO HAZ DE TUBOS DESMONTABLE CANAL INTEGRADO CON ESPEJO Y CUBIERTA DESMONTABLE	G	 DE FLUJO PARTIDO	N	 DE ESPEJO FLUO COMO EL CABEZAL ESTACIONARIO "C"
N	 CANAL INTEGRADO CON ESPEJO Y CUBIERTA DESMONTABLE	H	 DE FLUJO PARTIDO DOBLE	P	 CABEZAL FLOTANTE CON EMPAQUE EXTERIOR
D	 CIERRE ESPECIAL A ALTA PRESIÓN	J	 DE FLUJO DIVIDIDO	S	 CABEZAL FLOTANTE CON DISPOSITIVO DE APOYO
		K	 REHERVIDOR DE CALDERA	T	 CABEZAL FLOTANTE SIN CONTRABRIDA
		X	 FLUJO CRUZADO	U	 HAZ DE TUBO EN U
				W	 ESPEJO FLOTANTE SELLADO EXTERNAMENTE

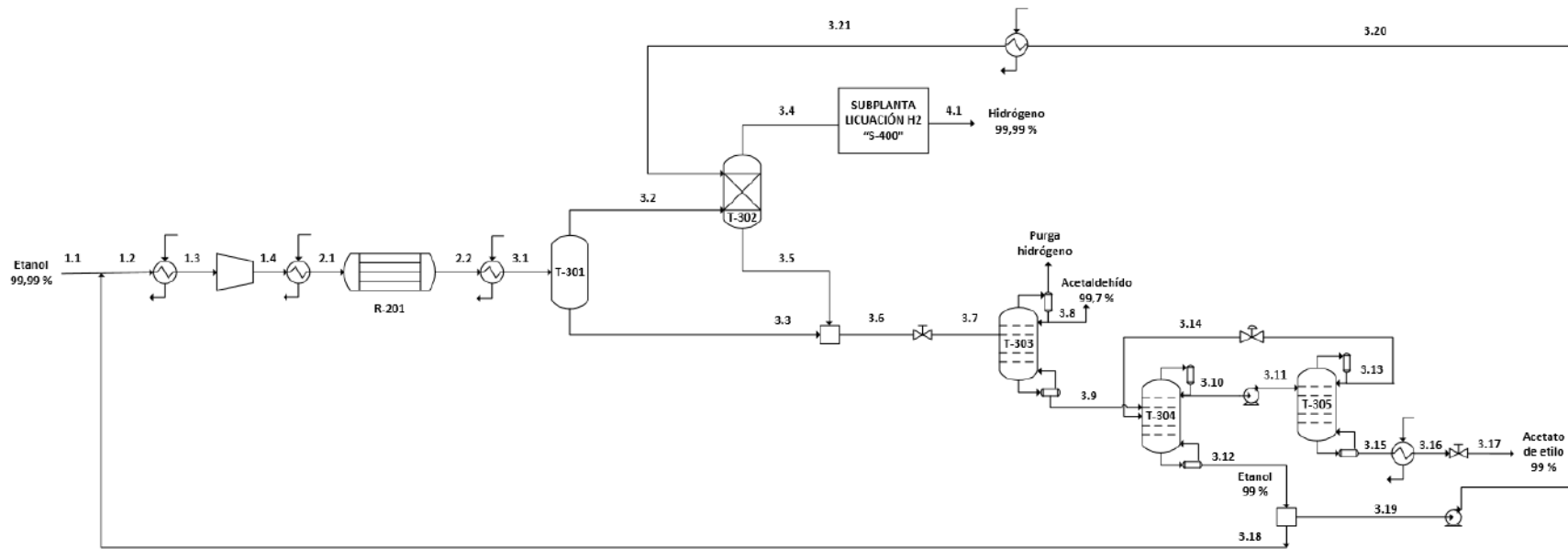
Anexo B

Recomendaciones de Carlson para la elección de un paquete termodinámico



Anexo C

Diagrama de flujo completo del sistema de separación de la planta



Anexo D

Resumen de condiciones operativas, caudales y composiciones de cada corriente de la subplanta de separación.

		Nombre de la corriente según diagrama tecnológico										
		2.2	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5	3.6	3.7	Purga H2	3.8	3.9
FLUJOS TOTALES	Flujo molar [kmol/h]	127,85	127,85	46,88	80,97	43,50	30,76	111,73	111,73	0,0022	39,08	72,65
	Flujo másico [kg/h]	3.993,00	3.993,00	245,02	3.747,98	95,50	1.416,49	5.164,46	5.164,46	0,0045	1.722,47	3.441,99
CONDICIONES OPERATIVAS	Temperatura [°C]	280,3	-20,0	-20,0	-20,0	-18,2	0,7	-13,7	-13,7	-13,7	20,4	76,8
	Presión [kPa]	111,90	111,90	111,90	111,90	111,90	111,90	111,90	101,32	111,90	101,32	101,32
	Fracción de vapor	1,000	0,367	1,000	0	1,000	0	0	0	1,000	0	0
FLUJOS POR COMPONENTES [Kg/h]	Etanol	1997,02	1997,02	4,195	1992,82	7,8	1250,68	3243,41	3243,41	0	3,44	3239,97
	Agua	0,399	0,399	0,001	0,398	0,001	0,24	0,64	0,64	0	0,015	0,63
	Hidrógeno	86,666	86,666	86,662	0,004	86,661	0,001	0,004	0	0,0045	0	0
	Acetaldehído	1717,979	1717,979	152,228	1565,752	0,291	151,937	1717,688	1717,688	0	1717,146	0,54
	Acetato de Etilo	190,934	190,934	1,934	189,001	0,741	13,624	202,625	202,625	0	1,716	200,91
TOTAL		3993,00	3993,00	245,02	3747,98	95,50	1416,49	5164,46	5164,46	0,0045	1722,47	3441,99

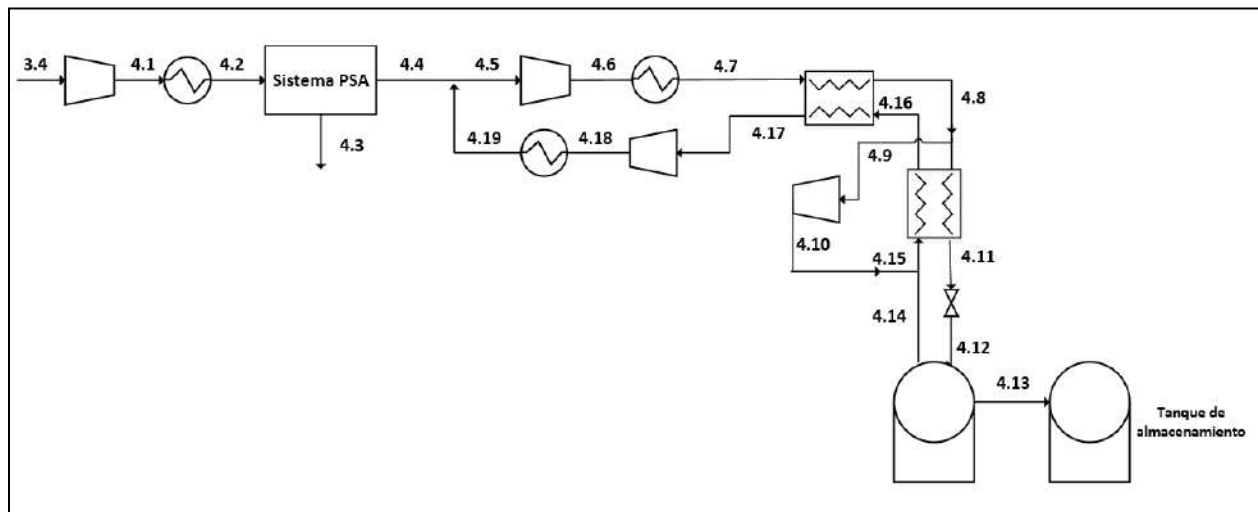
Anexo D (continuación)

Resumen de condiciones operativas, caudales y composiciones de cada corriente de la subplanta de separación.

		Nombre de la corriente según diagrama tecnológico											
		3.10	3.11	3.12	3.13	3.14	3.15	3.16	3.17	3.18	3.19	3.20	3.21
FLUJOS TOTALES	Flujo molar [kmol/h]	10,86	10,86	70,70	8,90	8,90	1,95	1,95	1,95	43,32	27,38	27,38	27,38
	Flujo másico [kg/h]	717,34	717,34	3.271,55	546,90	546,90	170,52	170,52	170,52	2.004,60	1.266,96	1.266,96	1.266,96
CONDICIONES OPERATIVAS	Temperatura [°C]	64,7	65,7	77,9	158,4	68,1	187,2	20,0	20,0	77,9	77,9	77,9	-20,0
	Presión [kPa]	101,32	1.500,00	101,32	1.500,00	101,32	1.500,00	1500	101,3	101,32	101,32	111,90	111,90
	Fracción de vapor	0	0	0	0	0,477	0	0	0	0	0	0	0
FLUJOS POR COMPONENTES [Kg/h]	Etanol	213,58	213,58	3238,83	211,41	211,41	1,67	1,67	1,67	1984,55	1254,28	1254,29	1254,29
	Agua	0,25	0,25	0,61	0,241	0,241	0	0	0	0,38	0,24	0,24	0,24
	Hidrógeno	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	Acetaldehído	44,40	44,40	0,000	43,874	43,874	0,026	0,026	0,026	0	0	0	0
	Acetato de Etilo	459,13	459,13	32,111	290,378	290,378	168,83	168,83	168,83	19,68	12,43	12,43	12,43
TOTAL		717,34	717,34	3271,55	546,90	549,90	170,52	170,52	170,52	2004,6	1266,96	1266,96	1266,96

Anexo E

Diagrama de flujo completo de la subplanta de licuación de hidrógeno



Anexo F

Resumen de condiciones operativas, caudales y composiciones de cada corriente de la subplanta de licuación.

		Nombre de la corriente según diagrama tecnológico									
		3.4	4.1	4.2	4.3	4.4	4.5	4.6	4.7	4.8	4.9
FLUJOS TOTALES	Flujo molar [kmol/h]	43,50	43,50	43,50	6,67	36,83	176,3	176,3	176,3	176,3	70,87
	Flujo másico [kg/h]	95,50	95,50	95,50	21,26	74,24	355,2	355,2	355,2	355,2	142,8
CONDICIONES OPERATIVAS	Temperatura [°C]	-19,2	313,4	30	30	30	7,4	194,6	7,9	-68	-68
	Presión [kPa]	111,9	1500	1500	101,3	1500	1500	7000	7000	7000	7000

		Nombre de la corriente según diagrama tecnológico (continuación)									
		4.10	4.11	4.12	4.13	4.14	4.15	4.16	4.17	4.18	4.19
FLUJOS TOTALES	Flujo molar [kmol/h]	70,87	105,5	105,5	36,83	68,5	139,4	139,4	139,4	139,4	139,4
	Flujo másico [kg/h]	142,8	212,4	212,4	74,24	138,1	280,9	280,9	280,9	280,9	280,9
CONDICIONES OPERATIVAS	Temperatura [°C]	-225,8	-233	-252	-252	-252	-239	-73,1	2	396,3	2
	Presión [kPa]	120	7000	120	120	120	120	120	120	1500	1500

