

Producción de Butilglicol

INTRODUCCIÓN

El butilglicol, $C_4H_9OCH_2CH_2OH$, es un solvente muy utilizado en la industria textil, de pinturas, de cueros, en desengrasantes y tensoactivos. Actualmente en Colombia no se produce y se debe importar a pesar de que es una materia prima importante en las industrias mencionadas. Las empresas distribuidoras del butilglicol en Colombia son, La Shell en Bogotá y Dequímicos en Cali.

Por ello, debido a su alta demanda se planteó la posibilidad de crear una planta de butilglicol acá en Colombia y lo que se pretende con este trabajo es presentar un bosquejo general de lo que sería la planta de butilglicol, es decir, donde se podrían adquirir las materias primas, a que condiciones, donde se ubicaría la planta, cual sería el diagrama de flujo.

OBJETIVOS

GENERAL

Aprender a plantear un proceso para la producción de una sustancia determinada mediante el seguimiento ordenado de los pasos generales que se dan para el diseño de procesos químicos.

ESPECIFICOS

Hacer la debida revisión bibliográfica con el fin de recolectar información suficiente para iniciar un planteamiento del problema.

Asociar el producto con su mercado nacional y mundial.

Seleccionar entre los diferentes procesos posibles, el que mejor se adecue a las condiciones requeridas.

Proponer un diagrama de flujo del proceso con sus correspondientes especificaciones.

1. INFORMACIÓN GENERAL

Butil cellosolve

Líquido incoloro también conocido como. O-Butiletilenglicol, Butilglicol, Etilenglicol-monobutiléter, eter monobutílico del etilenglicol o 2- Butoxietanol. usualmente utilizado como solvente en las industrias textil, pinturas, tintas, cueros, etc.

Revisión bibliográfica de los diferentes procesos

De la poca información que se logró recolectar acerca del proceso de obtención de butilglicol, podemos concluir que la única ruta comercialmente importante para la producción de glicol éteres es la de "óxido-alcohol"; que consta de la adición de una mol de un óxido alquílico (óxido de etileno) a una mol de alcohol (butanol). Las reacciones son altamente exotérmicas y se considera que la apertura del anillo del óxido ocurre por un mecanismo iónico con un ataque nucleofílico sobre uno de los átomos de carbono del epóxido. Ambos catalizadores, ácido o básico aceleran la reacción y elevan la temperatura.

Ya que el óxido de etileno es una materia prima tan inestable, costosa y de difícil manejo, se ha optado por un proceso en el que se elabore allí mismo el epóxido, como el propuesto en la patente N° 403590 de EEUU en Octubre 25 de 1999; que utiliza dos catalizadores, uno para la epoxidación y otro para la alcoxilación y donde además se ha mejorado la conversión y selectividad con el uso de los mismos.

La idea de producir por otro método el óxido de etileno no fue tomada en cuenta ya que esto implicaría el diseño de una planta más, aumentando los costos, el mantenimiento, la operación de la planta y no se tendría la misma selectividad que se tiene en el proceso anterior.

1.1 FUENTES DE LAS MATERIAS PRIMAS

Los reactivos necesarios para la producción de butilglicol son: Etileno, butanol y peróxido de hidrógeno.

Etileno.

A nivel nacional actualmente se encuentra en ejecución el proyecto de construcción de un complejo petroquímico, el cual es patrocinado por la Compañía Promotora de Olefinas y Aromáticos conjunta con diversas empresas (Dow Química, Enka de Colombia, Occidental, Chemical, Mitsui, Marubeni y Nissho Iwai). El complejo se encuentra localizado en la zona industrial de Mamonal en Cartagena sobre la costa Caribe colombiana. La construcción de estas instalaciones se inició en 1998, y se estima que la producción de la planta será:

Etileno	450000-500000	Tm anuales
Propileno	150000-300000	Tm anuales
Benceno	80000-100000	Tm anuales
Oxido de Etileno	20000-30000	Tm anuales
Xileno	100000-150000	Tm anuales
HDPE y LLDPE	220000-250000	Tm anuales
LDPE	100000-150000	Tm anuales

El proyecto suplirá el déficit de oferta de olefinas cuyo crecimiento anual es de 8.4% y los excedentes se exportarán a otros países.

A nivel Iberoamericano, existen tres plantas de producción de etileno en España, Dow Chemical Ibérica (Tarragona), Repsol-YPF (ciudad real) y Repsol-YPF (Tarragona) con capacidad de producción de etileno de 475000, 250000 y 5250000 Tm anuales respectivamente. Y una refinería en Chile PETROX S.A.

(Páginas Web: Centro de Información y Documentación Empresarial sobre Iberoamérica "CIDEIBER" y Corporación invertir en Colombia "COINVERTIR").

Butanol.

A nivel nacional la producción y comercialización de butanol se ve restringida ya que es utilizado en la fabricación de narcóticos. Actualmente el instituto de biotecnología de la Universidad Nacional de Colombia se encuentra realizando investigaciones para la producción de butanol por vía enzimática Para uso industrial es necesario entonces importar el butanol de otros países.

En EEUU se puede adquirir butanol de la Dow Chemical Company (Danbury, Connecticut).

De México se puede importar butanol de Químicos Delta (ciudad de México).

Peróxido de Hidrógeno

En Colombia existe una planta productora de peróxido de hidrógeno, EKa Chemicals, ubicada en Yumbo, Valle del Cauca. Esta compañía además posee otra planta productora de peroxido en Chile.

1.2 OFERTA Y DEMANDA DEL BUTILGLICOL

En el país no existen plantas de producción de butilglicol y este es importado principalmente por Shell de Colombia (Bogotá) y Dequímicos (Cali) para suplir la demanda nacional. El precio por tonelada de butilglicol para la distribución en Colombia reportado por la compañía Shell es de \$ 950 dolares. La venta de butilglicol no es estrictamente industrial si no que puede ser adquirido en pequeñas cantidades en los almacenes químicos de cada ciudad. El precio comercial por litro es de \$ 6400 pesos aproximadamente. Internacionalmente el mayor productor, consumidor y exportador de etilenglicoleteres es EEUU. En este país en 1999 se consumió el 45% de las 7040000 Tm de la serie de etilenenglicoleteres consumidos en Norte América, Brasil, Europa Occidental y Japón.

El mercado del butilglicol se encuentra vinculado con las industrias Textileras, de pinturas, de tintas, de desengrasantes, de cueros y químicas en general.

1.3 UBICACIÓN DE LA PLANTA

Para establecer la correcta ubicación de la planta se deben tener en cuenta dos tipos de factores: primarios y específicos. Los factores primarios se centran en las características generales que ha de reunir el lugar de implantación. Los factores específicos determinan la ubicación exacta de la planta.

FACTORES PRIMARIOS

Mercado y disponibilidad de la materia prima:

En Cartagena se contara con una refinería para la producción de etileno lo que posibilita su obtención y hace mas llamativa la construcción de la planta

en esta misma localidad. Con respecto al butanol que sería necesario importarlo de México o EEUU por vía marítima, este lugar cuenta con costas en el océano Atlántico. El peróxido de hidrógeno se puede adquirir en Yumbo, Valle del Cauca, que aunque no cuenta con costas, presenta cercanías al océano Pacífico.

Mercado del producto:

A pesar de que el objetivo principal es la distribución del producto en el mercado nacional para abastecer la creciente demanda, también es posible que sea necesario y/o ventajoso un comercio con el exterior, lo que hace imprescindible que la planta se encuentre situada cercana a un puerto de mar.

Las regiones industrializadas del país donde se da un mayor comercio de productos químicos y que cuentan con zonas costeras son el Valle del Cauca, Cartagena (Bolívar), Barranquilla (Atlántico) y además poseen excelentes vías de comunicación, son las que proporcionan las condiciones más adecuadas para la comercialización de producto.

La mejor opción para la ubicación de la planta sería la ciudad de Cartagena, debido a que se contaría con una fácil consecución del etileno, adquirido allí mismo, el butanol, podría ser recibido desde Norte o Centro América en los puertos por el mar Caribe sin necesidad de cruzar el canal de Panamá. El peróxido de Hidrógeno se podría transportar desde Yumbo hasta Cartagena en carro tanques fácilmente ya que existen buenas vías.

Suministro de combustible

Esta zona posee un buen suministro de energía. El combustible elegido, por su bajo coste y disponibilidad, será el gas natural.

2. INFORMACIÓN ESPECIFICA

2.1 MÉTODO DE SÍNTESIS

El proceso de obtención del Butil cellosolve, consta de dos (2) pasos principales:

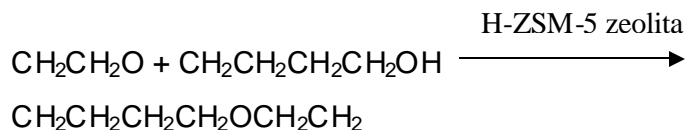
Epoxidación: Es la reacción para obtener óxido de etileno (oxirano) a partir de una oleofina (etileno), y un agente oxidante como el peróxido de hidrogeno (**H₂O₂**), o una mezcla de H₂ y O₂ en presencia de un catalizador como el silicato de Vanadio o titanio, que debe contener entre 0.01-20% en peso de metales nobles, como el platino.



Alcoxilacion: La ruta óxido-alcohol es la única vía comercialmente importante para la obtención de Glicol mono-éteres.

La reacción se da entre el óxido de etileno y butanol (anhidro), en presencia de un catalizador sólido básico o ácido, como el **H-B-Beta Zeolita** y **H-ZSM-5 Zeolita**.

Los epóxidos sufren ataque **SN₂** (sustitución nucleofílica bimolecular), por nucleófilos, por el butóxido (alcóxido) que debe encontrarse en exceso.



Este proceso puede ocurrir en una o varias etapas.

Si se cuenta con un proceso multietapas se deben tener en cuenta la oxidación de la oleofina y la alcoxilación siguiente.

Mientras que en los procesos de una (1) sola etapa se introducen la oleofina, el peróxido de hidrógeno (H_2O_2), el catalizador epoxídico y alcoxídico y el butanol, de tal manera que posterior a la formación del óxido de etileno se produzcan simultáneamente el butil glicol y demás monoglicol éteres.

2.2 CONDICIONES DE REACCIÓN

Peróxido de hidrógeno:

El peróxido de Hidrógeno en presencia de los derivados de los metales de transición (Mo, V, W, TI, etc), es capaz de atacar los dobles enlaces olefínicos, formando epóxidos y glicoles. La cantidad de glicol obtenido es función de la cantidad de agua introducida con el peróxido; y como consecuencia para obtener una buena selectividad es necesario usar un peróxido muy concentrado (70%), sin embargo, también es posible aumentarla utilizando solventes como alcoholes que remuevan el agua conjuntamente con un a zeolita sintética con silicato de titanio como catalizador; de esta manera la reacción se vuelve muy selectiva aún cuando se trabaja peróxido al 10 %.

La conversión obtenida de peróxido es del 99% con una selectividad hacia el epóxido del 85% (Patente No. 4833260 de 1989 Estados Unidos, Patente No. 4476327 de 1984 Estados Unidos)

Catalizador:

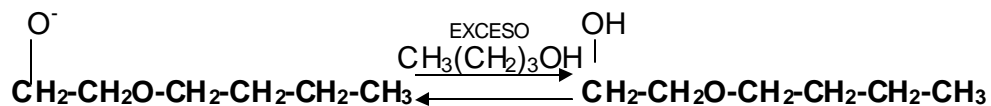
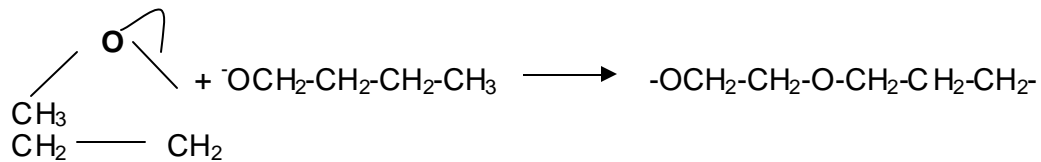
En la reacción de epoxidación el catalizador es el silicato de titanio con una estructura zeolítica asignada por difracción de rayos X, de fórmula general: $xTiO_2 (1-x) SiO_2$ donde se prefiere una composición "x" entre 0.01 – 0.025.

El catalizador para la alcoxilación puede ser una zeolita ácida como la H-ZSM-5 zeolita o H-B-Beta zeolita que se prepara con ácido bórico o hidróxido de tetraetilamonio.

La reacción de epoxidación se puede llevar a cabo entre -30 y 100 °C y entre 1 y 100 atm; dependiendo de si la reacción se puede dar en una o dos fases y en un reactor Batch o empacado.

Para poder que las reacciones se den simultáneamente el reactor se debe operar a condiciones apropiadas, es decir, primero se debe conseguir una condiciones de temperatura y presión (-30 °C y presurización con olefina) para que se active el catalizador epoxidico (silicato de titanio o vanadio) y se de selectividad a la reacción de epoxidación. Después de un tiempo aproximado de reacción (30 minutos según Patente No. 4833260 de 1989 Estados Unidos) las condiciones deben cambiarse (aumentar la temperatura a 0 °C) para activar el catalizador alcoxídico y proseguir con la reacción entre el oxirano que se acaba de formar y el butanol al interior de la zeolita ácida.

2.3 MECANISMO DE REACCIÓN DEL ÓXIDO DE ETILENO Y BUTANOL

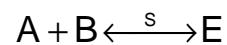


2.4 CINÉTICA

Epoxidación

A continuación se plantea la cinética para la epoxidación del etileno con el peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador de silicato de vanadio o titanio.

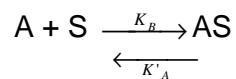
Etileno + peróxido de hidrógeno $\xrightarrow{\text{Silicato de titanio}}$ oxido de etileno.



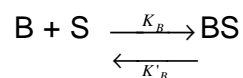
✓ Etapa de adsorción:

Tendremos en cuenta la adsorción de cada reactivo en el catalizador.

Etileno:



Peróxido de hidrógeno



La velocidad de adsorción de A:

$$r_A = k_A \cdot C_A (C_m - C') - k'_A \cdot C'_A$$

$$r_A = k_A \cdot \left(C_A \cdot (C'_m - C') - \frac{1}{K_A \cdot C_A} \right)$$

Donde:

C_a y C'_a , es la concentración del etileno en el catalizador y en la mezcla reaccionante, respectivamente.

$C'_m - C'$, es la concentración de centros activos de catalizador desocupados.

k_a y k'_a son las constantes de adsorción y desorción del óxido de etileno en el catalizador.

K_a , es la constante de equilibrio del etileno.

$$r_A = k_A * \left(C_A + C'_V - \frac{1}{K_A C_A} \right) \quad (1)$$

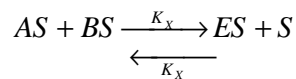
La velocidad de adsorción da B:

Si procedemos a plantear la velocidad del peróxido hidrógeno, nos damos cuenta que llegaremos a la misma expresión.

$$r_B = k_B \left(B * C'_V - \frac{1}{K_B C'_B} \right) \quad (2)$$

✓ **Reacción superficial:**

Se supone que la reacción se efectúa entre los reactivos absorbidos por el catalizador sólido.



La velocidad para a reacción superficial, resulta:

- La velocidad de reacción directa deberá ser proporcional a la concentración de los pares de centros adyacentes ocupados por A y B.

$$r = k_x * \frac{C'_A + C'_B}{C'_m} \quad (3)$$

- La velocidad de reacción inversa será proporcional a los pares de centros formados por molécula del óxido del etileno (E) absorbidas y los centros vacíos adyacentes.

$$r' = k'_x C'_E * \frac{C'_V}{C'_m} \quad (4)$$

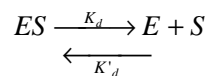
Combinando las expresiones (3) y (4), obtenemos la velocidad neta de la reacción superficial.

$$r_x = \frac{1}{C'_m} * (k_x * C'_A * C'_B - k'_x * C'_E * C'_V)$$

$$r_x = \frac{k_x}{C'_m} * \left(C'_A * C'_B - \frac{1}{K_x} * C'_E * C'_V \right) \quad (5)$$

Donde: $K_x = \frac{k_x}{k'_x}$

✓ **Desorción:**



La velocidad de desorción del óxido del etileno (E), quedaría:

$$r_E = k'_d * C'_E - k_d * C_E * C'_V$$

$$r_E = -k_d + \left(C_E * C'_V - \frac{1}{K_d * C'_V} \right) \quad (6)$$

Cinética supuesta:

Se supone que la reacción superficial es la etapa controlante.

Despejar C'_A , C'_B y C'_E de las ecuaciones 1, 2 y b6, respectivamente e igualar las velocidades a cero, entonces, queda:

$$C'_A = K_A * C_A * C'_V \quad (7)$$

$$C'_B = k_B * C_B * C'_V \quad (8)$$

$$C'_E = K_E * C_E * C'_V \quad (9)$$

Como la etapa controlante es la ecuación (5), reemplazo las 3 ecuaciones anteriores:

$$K_X = \frac{k_X}{C'_m} * \left(K_A + K_B * C_A * C_B * C'_V - \frac{K_E}{K_X * C_E * C'_V} \right) \quad (10)$$

Expresaremos la concentración de centros vacíos C'_V en función de la concentración total centros, tenemos:

$$C'_m = C'_V + C'_A + C'_B + C'_E$$

$$C'_V = \frac{C'_m}{1 + K_A * C_A + K_B * C_B + K_E * C_E} \quad (11)$$

Reemplazamos la ecuación (11) en la ecuación (10):

$$r_X = K_X * C'_m * \frac{K_A * K_B * C_A * C_B - (K_E / K_X) * C_E}{1 + K_A * C_A + K_B * C_B + K_E * C_E} \quad (12)$$

Si sabemos, según la reacción que la constante de equilibrio es:

$$K_{eq} = \frac{C_E}{C_A * C_B} \quad (13)$$

Reemplazando las ecuaciones (7), (8) y (9) en la constante de equilibrio (13), queda:

$$K_{eq} = \frac{K_A * K_B}{K_E} \left(\frac{C'_V * C'_E}{C'_A * C'_B} \right) \quad (14)$$

$$K_{eq} = \frac{K_A * K_B}{K_E} K_X \quad (15)$$

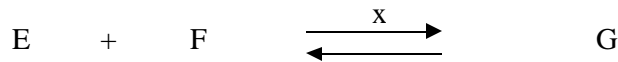
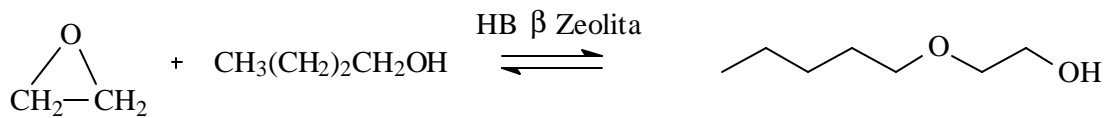
Reemplazo la ecuación (15) en la ecuación (12), la velocidad de reacción superficial.

$$r_X = K_X * C'_m * K_A * K_B * \frac{C_A * C_B - (1/K) * C'_E}{(1 + K_A * C_A + K_B * C_B * K_E * C'_E)^2}$$

Alcoxilación

Cinética planteada para la alcoxilación de butanol con óxido de etileno a butilglicol, en presencia de un catalizador ácido como la zeolita HB-beta zeolita o H-ZSM-5 zeolita.

La reacción general es:



E: oxido de etileno.

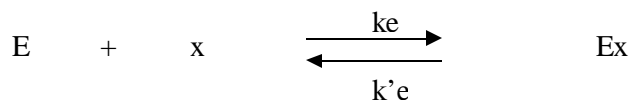
F: butanol.

x: catalizador

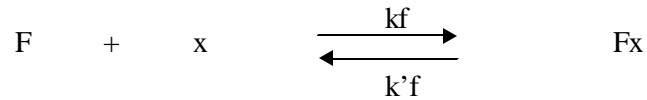
G: butilgliol.

Etapa de Adsorción

Adsorción del Oxido de etileno:



Adsorción del butanol:



La velocidad neta de adsorción de E, estará dada por:

$$r_e = k_e C_e (C'_m - C') - k'_e C'e = k_e (C_e (C'_m - C') - 1/K_e C'e) \quad (1)$$

donde:

C'e: concentración del oxido de etileno en el catalizador.

Ce: concentración total de oxido de etileno en la mezcla reaccionante.

ke y k'e : constantes de adsorción y desorción del oxido de etileno en el catalizador.

C'm -C' representa la concentración de centros activos de catalizador desocupados, C'v; y está expresada como la concentración de centros desocupados por unidad de masa de catalizador.

Entonces, "re" queda expresada por:

$$r_e = k_e (C_e C'v - 1/K_e C'e) \quad (2)$$

De igual manera, la velocidad de adsorción de F será:

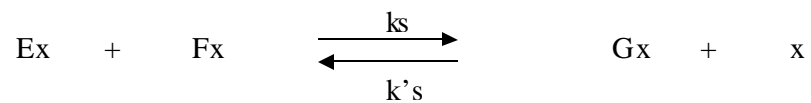
$$r_f = k_f C_f C'v - k'_f C'f \quad (3)$$

$$r_f = k_f (C_f C'v - 1/K_f C'f) \quad (4)$$

En ambas reacciones, K_e y K_f son las constantes de equilibrio de adsorción de cada reactante.

Reacción superficial

Supondremos que nuestro mecanismo consta de una reacción entre E y F adsorbidos, con lo que la reacción puede expresarse como:



Aquí, únicamente reaccionan aquellas moléculas de E que están adsorbidas en centros inmediatamente adyacentes a las moléculas adsorbidas de F. Por tanto, la velocidad de reacción directa deberá ser proporcional a la concentración de los pares de centros adyacentes ocupados por E y F. Esta concentración será igual a C'_e , multiplicada por la fracción de centros adyacentes ocupados por moléculas de F. Esta fracción es proporcional a la fracción de la superficie total ocupada por moléculas de F.

Si C'_m se define como la concentración molal de centros totales, entonces la fracción de moléculas de F en la superficie de catalizador estará dada por: C'_f/C'_m , y la velocidad de reacción propuesta de acuerdo al mecanismo será:

$$r = k_s \cdot C'_e \cdot C'_f / C'_m \quad (6)$$

La velocidad inverso será proporcional a los pares de centros formados por moléculas de G adsorbidas y los centros vacíos adyacentes.

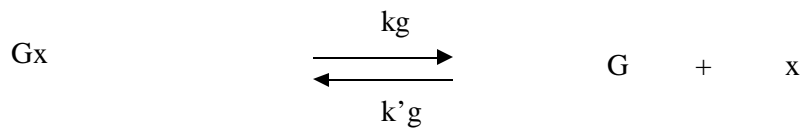
$$r' = k'_s \cdot C'_g \cdot C'_v / C'_m \quad (7)$$

Combinando estas 2 expresiones, obtenemos la velocidad neta de la reacción:

$$r_s = 1/C'm*(k_s*C'e*C'f - k's*C'g*C'v)$$

$$r_s = k_s/C'm*(C'e*C'f - 1/K_s*C'g*C'v) \quad (8) \quad K_s = k_s/k's$$

Desorción



Equivalente a la adsorción, la velocidad de desorción será:

$$r_g = k'g*C'g - k_g*Cg*C'v = -k_g*(Cg*C'v - 1/Kg*C'v) \quad (9)$$

Cinética propuesta

Para la cinética, asumiremos que la reacción superficial es la etapa controlante. Entonces $C'e$, $C'f$ y $C'g$, corresponden al equilibrio para las etapas de adsorción y desorción. Despejando de las ecuaciones 2, 4 y 9 estas concentraciones, haciendo cada una de las velocidades cero, tenemos:

$$C'e = K_e * C_e * C'v \quad (10)$$

$$C'f = K_f * C_f * C'v \quad (11)$$

$$C'g = K_g * C_g * C'v \quad (12)$$

Sustituyendo estos resultados para la ecuación de la reacción superficial (8), tenemos:

$$r_s = k_s / C'_m * (K_e * K_f * C_e * C_f * C'_v{}^2 - K_g / K_s * C_g * C'_v{}^2) \quad (13)$$

La concentración de centros vacíos C'_v se puede expresar en función de la concentración total centros, tenemos:

$$C'_m = C'_v + C'_e + C'_f + C'_g$$

$$C'_v = \frac{C'_m}{1 + K_e * C_e + K_f * C_f + K_g * C_g} \quad (14)$$

Combinando las ecuaciones 13 y 14 tenemos:

$$r = k_s * C'_m * \frac{K_e * K_f * C_e * C_f - (K_g / K_s) * C_g}{1 + K_e * C_e + K_f * C_f + K_g * C_g} \quad (15)$$

Si la constante de equilibrio para la reacción total, se designa como K ,

$$K = \left(\frac{C_g}{C_e * C_f} \right)_{eq} \quad (16)$$

Despejando de las ecuaciones 10, 11 y 12, tenemos:

$$K = \frac{K_e * K_f}{K_g} \left(\frac{C'_v * C'_g}{C'_e * C'_f} \right)_{eq} \quad (17)$$

Si miramos bien, la parte izquierda de la ecuación es K_s , la constante de equilibrio de la reacción superficial. Entonces,

$$K = \frac{K_e * K_f}{K_g} K_s \quad (18)$$

Sustituyendo esta ecuación en la ecuación 15, tenemos la velocidad de reacción en función de las concentraciones de los fluidos:

$$r = k_s * C'_m * K_e * K_f * \frac{C_e * C_f - (1/K) * C_g}{(1 + K_e * C_e + K_f * C_f + K_g * C_g)^2} \quad (19)$$

Para llegar a esta expresión supusimos que la reacción superficial era la etapa controlante. Que la reacción de superficie, involucra una molécula adsorbida de E y otra de F.

Los conceptos de adsorción, desorción y cinética utilizados se basan en la teoría de **Lamguir-Hinshelwood**, tratada en el libro “ Ingeniería de la Cinética Química”, Smith.

2.5 PROPIEDADES TERMODINÁMICAS

Propiedades del Etileno

Líquido

Propiedad	Valor	Temperatura (K)
$C_{p,liquid}$ (J/mol*K)	67.24	170 (T= 15 a 170)
S°_{liquid} (J/mol*K)	117.8	
$\Delta_f H^{\circ}_{liquido}$ (KJ/mol)	43.98	
$\Delta_f G^{\circ}_{liquid}$ (kJ/mol)	78.5798 calculado*	

$$C_p^{\circ} = A + B*T + C*T^2 + D*T^3 + ET^4 \text{ (J/mol*k)}$$

A	3.44364
B	1.0842
C	-7.13595e-3
D	1.65631e-5

Cambio de fase

Propiedad	Valor	Unidades
T _{boil}	169	K
T _{fus}	103.7	K
T _{triple}	104	K
P _{triple}	0.0012	Bar
T _c	282.5	K
P _c	50.6	Bar
V _c	0.1311	l/mol
ρ _c	7.63	mol/l

Propiedad	Valor	Temperatura (K)
Δ _{vap} H (kJ/mol)	13.544	169.40
Δ _{vap} S (J/mol*K)	79.95	169.40

Parámetros de la ecuación de Antoine:

$$\log_{10}(P) = A - \frac{B}{(T+C)}$$

P = presión de vapor (bar)

T = temperatura (K)

Temperatura (K)	A	B	C
149.37 - 188.57	3.87261	584.146	-18.307

Gas

Propiedad	Valor
$\Delta_f H^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	52.47
$\Delta_f G^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	68.2867
$S^\circ_{\text{gas},1}$ (J/mol*K)	219.32

$$C_p^\circ = A + B \cdot t + C \cdot t^2 + D \cdot t^3 + E/t^2$$

$$H^\circ - H^\circ_{298.15} = A \cdot t + B \cdot t^2/2 + C \cdot t^3/3 + D \cdot t^4/4 - E/t + F - \Delta_f H^\circ_{f,298}$$

$$S^\circ = A \cdot \ln(t) + B \cdot t + C \cdot t^2/2 + D \cdot t^3/3 - E/(2 \cdot t^2) + G$$

C_p = capacidad calorífica (J/mol*K)

H° = entalpía estandar (kJ/mol)

$\Delta_f H^\circ_{298.15}$ = entalpia de formación a 298.15 K (kJ/mol)

S° = entropía estandar (J/mol*K)

t = temperatura (K) / 1000.

Temperatura (K)	298. - 1200.	1200. - 6000.
A	-6.387880	106.5104
B	184.4019	13.73260
C	-112.9718	-2.628481
D	28.49593	0.174595
E	0.315540	-26.14469
F	48.17332	-35.36237
G	163.1568	275.0424
$\Delta_f H^\circ_{f,298}$ (kJ/mol)	52.46694	52.46694

La reacción de oxidación del etileno se da en fase líquida, por tanto es necesario conocer las propiedades termodinámicas de los participantes de esta reacción. Para el etileno no fue posible encontrar el $\Delta_f H^\circ_{\text{liquido}}$ pero sí para el estado gaseoso, a partir del cual se puede llegar al del líquido.

Para calcular el $\Delta_f H^\circ_{\text{liquido}}$, se lleva el $\Delta_f H^\circ_{\text{gas}}$ a 169 K, que es la temperatura normal de ebullición, para la cual se conoce la entalpia de vaporización; restando del $\Delta_f H_{\text{gas}}$ a 169 K el ΔH_v a 169 K obtenemos el $\Delta_f H_{\text{liquido}}$ a 169 K, que al sumarle el C_p de líquido por el ΔT , se obtiene $\Delta_f H^\circ_{\text{liquido}}$ para la realización de los calculos.

C_p gas entre 178K y 293 K se obtiene promediando los C_p s a estas temperaturas.

$$C_p \text{ gas} = 38.75 \text{ (J/mol}\cdot\text{K)}$$

$$\Delta_f H_{\text{gas}} \text{ a } 169 \text{ K} = 47.4421 \text{ (KJ/mol)}$$

$$\Delta_f H_{\text{liquido}} \text{ a } 169 \text{ K} = 33.898 \text{ (KJ/mol)}$$

$$C_p \text{ liquido} = 78.169 \text{ (J/mol}\cdot\text{K)}, C_p \text{ promedio entre } 169 \text{ K y } 298 \text{ K}$$

$$\Delta_f H^\circ_{\text{liquido}} = 43.98 \text{ (KJ/mol)}$$

Propiedades del óxido de etileno

Líquido

Propiedad	Valor	Temperatura (K)
$\Delta_f H^\circ_{\text{liquid}}$ (kJ/mol)	-95.7	
S°_{liquid} (J/mol*K)	149.45	
$C_{p,\text{liquid}}$ (J/mol*K)	86.90	285

$$C_p^\circ = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3 \text{ (J/mol}\cdot\text{k)}$$

A	7.41259
B	7.42687e-1
C	-2.7132e-3
D	3.90092e-6

Cambio de fase

Propiedad	Valor	Unidad
T _{boil}	285	K
T _{fus}	160.55	K
T _{triple}	160.65	K
T _c	468.9	K
P _c	72.33	bar
ρ _c	7.13	mol/l
ΔH _{vap} ^o	25.51	kJ/mol

Propiedad	Valor	Temperatura (K)
ΔH _{vap} (kJ/mol)	25.527	283.66 (P = 101.325 kPa)
ΔS _{vap} (J/mol*K)	89.99	283.66

Parámetros de la ecuación de Antoine:

$$\log_{10}(P) = A - (B/(T+C))$$

P = presión de vapor (bar)

T = temperatura (K)

Temperatura (K)	A	B	C
182.59 - 283.59	4.38590	1115.100	-29.015
273.4 - 304.9	5.84696	2022.830	62.656

Gas

Propiedad	Valor
$\Delta H_{f, \text{gas}}^{\circ}$ (kJ/mol)	-52.64
$\Delta G_{f, \text{gas}}^{\circ}$ (kJ/mol)	-13.1046
$S_{\text{gas},1}^{\circ}$ (J/mol*K)	bar 243.00

$$C_p^{\circ} = A + B*t + C*t^2 + D*t^3 + E/t^2$$

$$H^{\circ} - H_{298.15}^{\circ} = A*t + B*t^2/2 + C*t^3/3 + D*t^4/4 - E/t + F - ?_f H_{f,298}^{\circ}$$

$$S^{\circ} = A*\ln(t) + B*t + C*t^2/2 + D*t^3/3 - E/(2*t^2) + G$$

C_p = capacidad calorífica (J/mol*K)

H° = entalpía estandar (kJ/mol)

$?_f H_{298.15}^{\circ}$ = entalpia de formación a 298.15 K (kJ/mol)

S° = entropía estandar (J/mol*K)

t = temperatura (K) / 1000.

Temperatura (K)	298. - 1200.	1200. - 6000.
A	-23.25802	131.3483
B	275.6997	13.80594
C	-188.9729	-2.645062
D	51.03350	0.175820
E	0.386930	-30.03639
F	-55.09156	-158.3795
G	142.7777	313.4276
$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	-52.63514	-52.63514

Propiedades del 1-butanol

Líquido

Propiedad	Valor
$\Delta H_{f, \text{liquid}}^{\circ}$ (kJ/mol)	-328
$\Delta G_{f, \text{liquid}}^{\circ}$ (kJ/mol)	-162.615
$S^{\circ}_{\text{liquid}}$ (J/mol*K)	225.73
$C^{\circ}_{p, \text{liquid}}$ (J/mol*K)	176.86

$$C_p^\circ = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3 \quad (\text{J/mol} \cdot \text{K})$$

A	-5.10376e-1
B	1.44697
C	-3.83339e-3
D	4.28849e-6

Cambio de fase

Propiedad	Valor	Unidad
T_{boil}	390.6	K
T_{fus}	188	K
T_{triple}	184.54	K
T_c	562	K
P_c	45.	bar
ρ_c	0.274	l/mol
$\Delta H_{\text{vap}}^\circ$	3.65	mol/l

Propiedad	Valor	Temperatura (K)
ΔH_{vap} (kJ/mol)	43.29	390.9
ΔS_{vap} (J/mol*K)	52.42	390.9

$$\Delta H_{\text{vap}}^\circ = A \exp(-\alpha T_r)(1 - T_r)^\beta$$

$\Delta H_{\text{vap}}^\circ$ = entalpía de vaporización(kJ/mol)

T_r = temperatura reducida (T / T_c)

Temperatura (K)	298. - 410.
A (kJ/mol)	62.53
α	-0.6584
β	0.696
T_c (K)	562.9

Parámetros de la ecuación de Antoine:

$$\log_{10}(P)=A-(B/(T+C))$$

P = presión de vapor (bar)

T = temperatura (K)

Temperatura (K)	A	B	C
295.7 - 390.9	4.54607	1351.555	-93.34
391. - 479.	4.39031	1254.502	-105.246
419.34 - 562.98	4.42921	1305.001	-94.676
362.36 - 398.84	4.50393	1313.878	-98.789

Gas

Propiedad	Valor
$\Delta_f H^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	-275.28
$\Delta_f G^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	-150.892
$S^\circ_{\text{gas},1}$ (J/mol*K)	361.98
$C_{p,\text{vapor}}$ (J/mol*K)	110.0709

$$C_p^\circ = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3 + E \cdot T^4 \text{ (J/mol}\cdot\text{k)}$$

A	-2.06995
B	4.29749e-1
C	-1.69148e-4
D	-7.3744e-8
E	6.14903e-11

Propiedades del butilglicol

Líquido

Propiedad	Valor
$\Delta_f H^\circ_{\text{liquid}}$ (Kj/mol)	-508.21 calculado
$\Delta_f G^\circ_{\text{liquid}}$ (Kj/mol) = $\Delta_f G^\circ_{\text{gas}} - (\Delta_{\text{vap}} H^\circ - \Delta_{\text{vap}} S^\circ \cdot T^\circ)$	-264.838 calculado
$C_{p,\text{liquid}}^\circ$ (J/mol*K)	234.042

Cambio de fase

Propiedad	Valor	Unidad
T_{boil}	444.2	K
T_{fus}	202.75	K
T_c	633.9	K
P_c	32.70	bar
ρ_c	2.36	mol/l
$\Delta_{\text{vap}} H^\circ$	56.59	kJ/mol
$\Delta_{\text{vap}} S^\circ$	110.7896*	J/mol*K

Propiedad	Valor	Temperatura (K)
$\Delta_{\text{vap}}H$ (kJ/mol)	43.475	444.2
$\Delta_{\text{vap}}S$ (J/mol*K) Veteres Modificaciones de la ecuación de Kistiakowsky	105.114 calculado	444.2

Parámetros de la ecuación de Antoine:

$$\log_{10}(P) = A - (B/(T+C))$$

P = presión de vapor (bar)

T = temperatura (K)

Temperatura (K)	A	B	C
365.7 - 443.3	4.25626	1511.414	-88.815

Gas

Propiedad	Valor Por contribución de grupos (Joback)
$\Delta_f H^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	-451.62
$?_f G^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	-241.28

Propiedades del peróxido de hidrógeno

Líquido

Propiedad	Valor
$\Delta_f H^\circ_{\text{liquid}}$ (kJ/mol)	-187.9035
S°_{liquid} (J/mol*K)	109.69416
$\Delta_f G^\circ_{\text{liquid}}$ (kJ/mol)	-120.4961
$C_p^\circ_{\text{liquid}}$ (J/mol*K)	89.17884

Cambio de fase

Propiedad	Valor	Unidad
T_{boil}	424.35	K
T_{fus}	272.26	K
T_c	728	K
P_c	220.00	bar
$\Delta_{\text{vap}} H^\circ$	44.087	(kJ/mol)

Gas

Propiedad	Valor
$\Delta_f H^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	-136.1
$\Delta_f G^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	-105.549
$S^\circ_{\text{gas},1}$ (J/mol*K)	bar 232.95

$$C_p^\circ = A + B*t + C*t^2 + D*t^3 + E/t^2$$

$$H^\circ - H^\circ_{298.15} = A*t + B*t^2/2 + C*t^3/3 + D*t^4/4 - E/t + F - ?_f H^\circ_{f,298}$$

$$S^\circ = A*\ln(t) + B*t + C*t^2/2 + D*t^3/3 - E/(2*t^2) + G$$

C_p = capacidad calorífica (J/mol*K)

H° = entalpía estandar (kJ/mol)

$\Delta_f H^\circ_{298.15}$ = entalpia de formación a 298.15 K (kJ/mol)

S° = entropía estandar (J/mol*K)

t = temperatura (K) / 1000.

Temperatura (K)	298. - 1500.
A	34.25667
B	55.18445
C	-35.15443
D	9.087440
E	-0.422157
F	-149.9098
G	257.0604
$\Delta H^\circ_{f,298}$ (kJ/mol)	-136.1064

Propiedades del agua

Líquida

Propiedad	Valor
$\Delta_f H^\circ_{\text{liquid}}$ (kJ/mol)	-285.83
S°_{liquid} (J/mol*K)	69.95
$\Delta_f G^\circ_{\text{liquid}}$ (kJ/mol)	-237.337

$$C_p^\circ = A + B*t + C*t^2 + D*t^3 + E/t^2$$

$$H^\circ - H^\circ_{298.15} = A*t + B*t^2/2 + C*t^3/3 + D*t^4/4 - E/t + F - \Delta_f H^\circ_{f,298}$$

$$S^\circ = A*\ln(t) + B*t + C*t^2/2 + D*t^3/3 - E/(2*t^2) + G$$

C_p = capacidad calorífica (J/mol*K)

H° = entalpía estandar (kJ/mol)

$\Delta_f H^\circ_{298.15}$ = entalpia de formación a 298.15 K (kJ/mol)

S° = entropía estandar (J/mol*K)

t = temperatura (K) / 1000.

Temperatura (K)	298. - 500.
A	-203.6060
B	1523.290
C	-3196.413
D	2474.455
E	3.855326
F	-256.5478
G	-488.7163
$\Delta H^\circ_{f,298}$ (kJ/mol)	-285.8304

Cambio de fase

Propiedad	Valor	Unidad
T_{boil}	373.17	K
T_{fus}	273.15	K
T_{triple}	0.00136	K
P_{triple}	0.0061	bar
T_c	647	K
P_c	220.6400	bar
ρ_c	17.874	mol/l

Parámetros de la ecuación de Antoine:

$$\log_{10}(P)=A-(B/(T+C))$$

P = presión de vapor (bar)

T = temperatura (K)

Temperatura (K)	A	B	C
273. - 303.	5.40221	1838.675	-31.737
304. - 333.	5.20389	1733.926	-39.485
334. - 363.	5.07680	1659.793	-45.854
344. - 373.	5.08354	1663.125	-45.622

Gas

Propiedad	Valor
$\Delta_f H^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	-241.83
$\Delta_f G^\circ_{\text{gas}}$ (kJ/mol)	-228.7416
$S^\circ_{\text{gas},1}$ (J/mol*K)	188.84

$$C_p^\circ = A + B*t + C*t^2 + D*t^3 + E/t^2$$

$$H^\circ - H^\circ_{298.15} = A*t + B*t^2/2 + C*t^3/3 + D*t^4/4 - E/t + F - ?_f H^\circ_{f,298}$$

$$S^\circ = A*\ln(t) + B*t + C*t^2/2 + D*t^3/3 - E/(2*t^2) + G$$

C_p = capacidad calorífica (J/mol*K)

H° = entalpía estandar (kJ/mol)

$\Delta_f H^\circ_{298.15}$ = entalpia de formación a 298.15 K (kJ/mol)

S° = entropía estandar (J/mol*K)

t = temperatura (K) / 1000.

Temperatura (K)	500. - 1700.	1700. 6000. -
A	30.09200	41.96426
B	6.832514	8.622053
C	6.793435	-1.499780
D	-2.534480	0.098119
E	0.082139	-11.15764
F	-250.8810	-272.1797
G	223.3967	219.7809
$\Delta H_{f,298}^{\circ}$ (kJ/mol)	-241.8264	-241.8264

Las propiedades para las sustancias trabajadas fueron tomadas de:

Lange. Manual de Química. John A. Dean. IV Tomo

webbook.nist.org

Las propiedades que no se encontraron en la bibliografía, fueron calculadas con el método propuesto por Joback, presentado en el libro “ The Properties of Gases and Liquids” Praunitz.

2.6 PROPIEDADES FISICO-QUÍMICAS

Butanol

Propiedad	Valor
Punto de fusión (°C)	-89
Punto de ebullición (°C)	117
Presión de vapor a 20 °C (hPa)	6.7
Densidad a 20 °C (gr/cc)	0.81
Límites de explosión (% vol)	
Inferior	11.3
Superior	1.4
Viscosidad (mPa.s)	2.95
Punto de ignición (°C)	340
Punto de inflamación (°C)	34

Peróxido de Hidrógeno

Propiedad	Valor
Punto de fusión (°C)	-26
Punto de ebullición (°C)	
Presión de vapor a 20 °C (hPa)	18
Densidad a 20 °C (gr/cc)	1.11
Límites de explosión (% vol)	
Inferior	
Superior	
Viscosidad (mPa.s)	
Punto de ignición (°C)	
Punto de inflamación (°C)	

Butilglicol

Propiedad	Valor
Punto de fusión (°C)	-70
Punto de ebullición (°C)	171
Presión de vapor a 20 °C (hPa)	0.8
Densidad a 20 °C (gr/cc)	0.9
Límites de explosión (% vol)	
Inferior	1.1
Superior	10.6
Viscosidad (mPa.s)	5.31
Punto de ignición (°C)	230
Punto de inflamación (°C)	63-64

2.7 SEGURIDAD INDUSTRIAL

Compuesto	Temperatura de ignición	LD50	Toxicidad
Etileno			
Butanol	340 °C	790 mg/Kg (oral)	
Peróxido de Hidrógeno		4060 mg/Kg (dermal)	
Óxido de etileno			
Butilglicol	230 °C	470 mg/Kg (oral)	
Agua			

2.8 ANÁLISIS TERMODINÁMICO

Para realizar el análisis termodinámico se determina el calor estándar de reacción y la energía libre de Gibbs estándar de reacción para cada reacción a partir de los calores estándar de formación y Gibbs estándar de formación para cada sustancia, presentado en las propiedades termodinámicas, según:

$$H_{rxn}^0 = \sum_i^n s_i H_{f,i}^0$$

$$G_{rxn}^0 = \sum_i^n s_i G_{f,i}^0$$

Luego se determina el calor de reacción a diferentes temperaturas, adicionando al calor de reacción estándar el cambio entálpico a la nueva temperatura:

$$H_{rxn}(T) = H_{rxn}^0 + \sum_i \int_{T_0}^T C_{p,i} dT$$

Obteniéndose la gráfica H_{rxn} vs T (gráfica 1)

Con los valores de H_{rxn} y G_{rxn}^0 se determina la constante de equilibrio estándar de la siguiente ecuación:

$$\ln [K] = \frac{-G}{RT}$$

Para corregirla a diferentes temperaturas es necesario el H_{rxn} a la temperatura deseada y una constante de equilibrio conocida para determinada temperatura.

$$\ln\left(\frac{K_2}{K_1}\right) = \frac{-H_{rxn, 2}}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$$

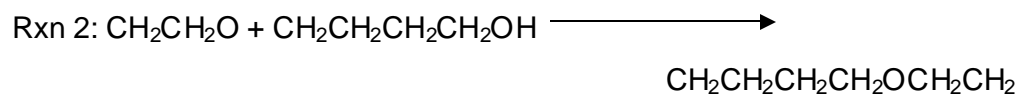
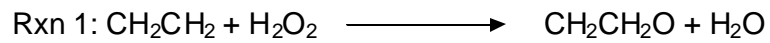
Obteniéndose la gráfica $\ln(K_i)$ vs T (gráfica 3)

Para determinar la energía libre de Gibbs a diferentes temperaturas es necesario conocer la constante de equilibrio para despejarla de:

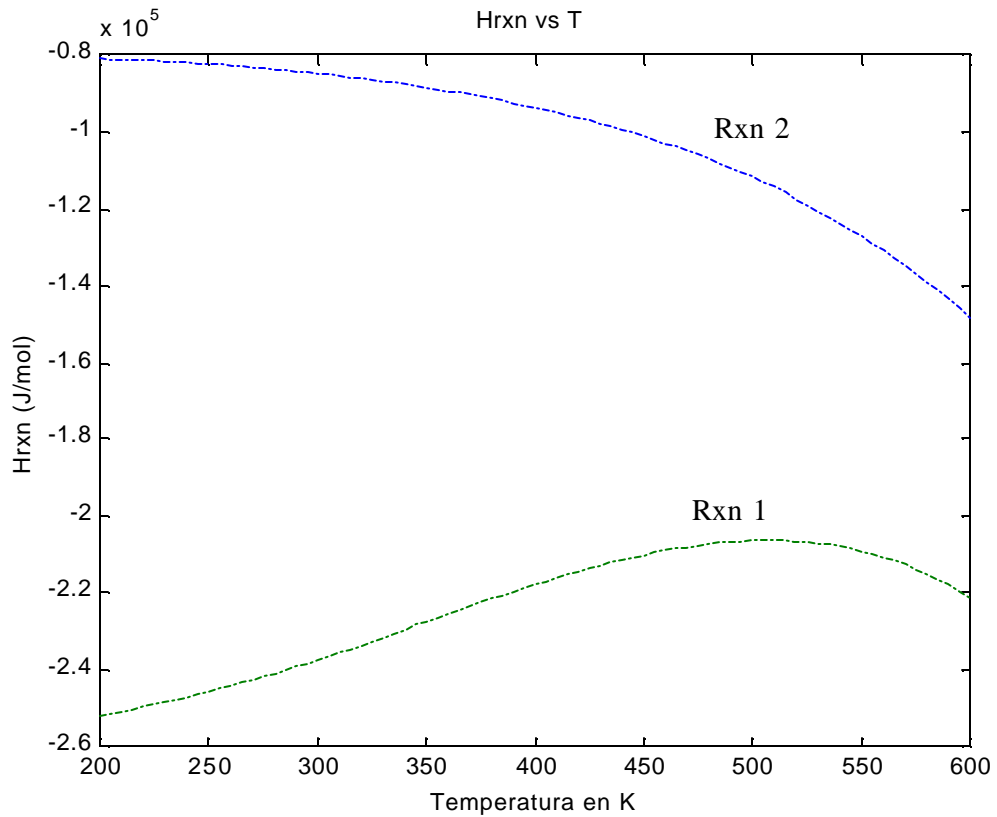
$$\ln[K] = \frac{-G}{RT}$$

y obtener la gráfica G_{rxn} vs T (gráfica 2)

Reacciones:



Gráfica 1



De esta gráfica, podemos deducir que ambas reacciones son bastante exotérmicas, en particular la reacción de epoxidación (reacción 1) cuyo calor de reacción oscila entre $-2.55 \cdot 10^5$ y $-2 \cdot 10^5$ J/mol, aproximadamente.

El calor de reacción de la epoxidación disminuye a medida que aumenta la temperatura hasta 520K aproximadamente, donde aumenta nuevamente al aumentar la temperatura.

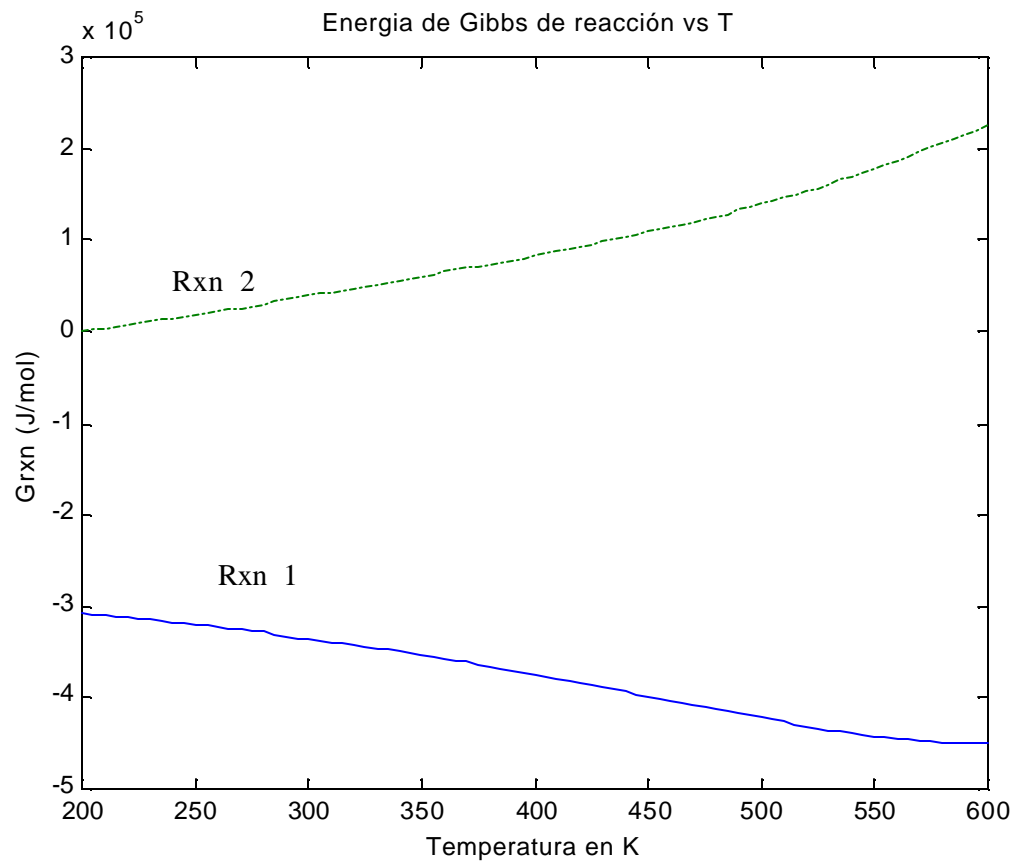
En la alcoxilación (reacción 2), a medida que aumenta la temperatura, aumenta el calor de reacción.

Como las dos reacciones se darán simultáneamente se debe buscar un rango de temperaturas, donde se minimice el calor neto producido por ambas reacciones (para que no tenga que ser tan grande el sistema de

extracción de calor) y además, se busca que halla seguridad en el sistema de reacción.

También se debe tener en cuenta que si la reacción se da en fase líquida se debe seleccionar rangos de temperaturas que proporcione estas condiciones, sin tener que trabajar altas presiones; lo que se logra a bajas temperaturas.

Gráfica 2



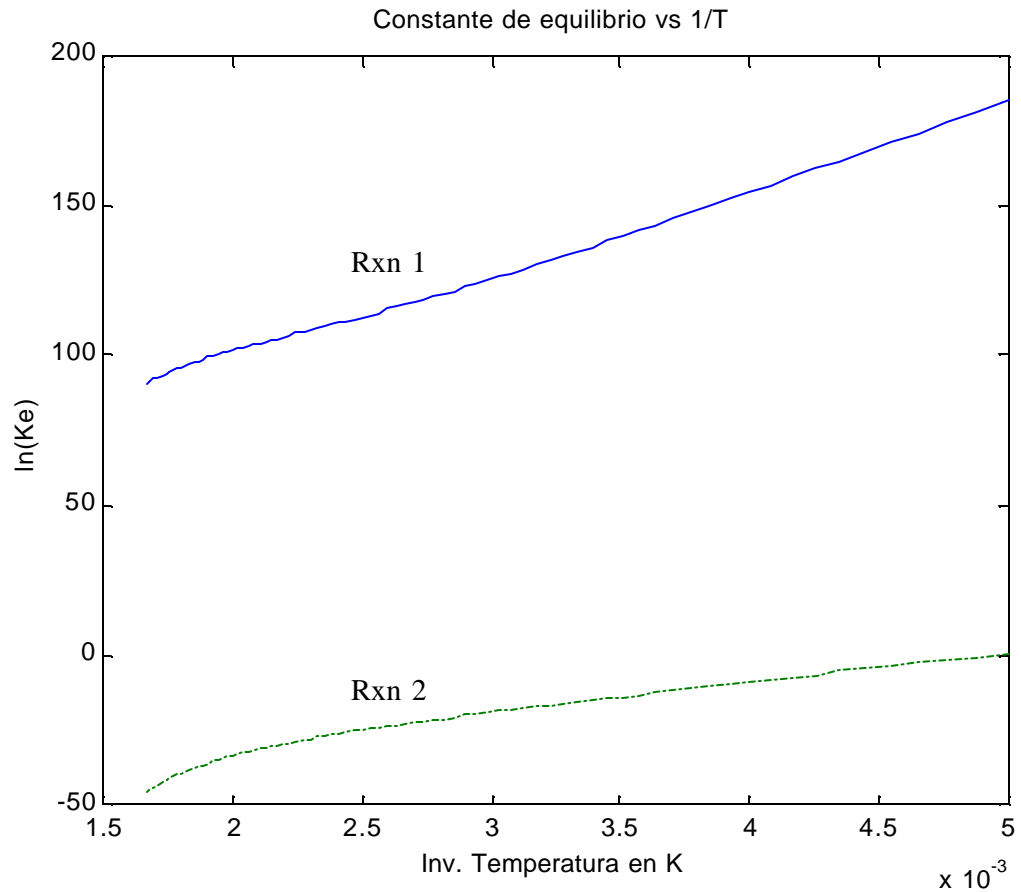
En esta grafica podemos observar el comportamiento de la energía libre de Gibbs con respecto a la temperatura para cada una de las reacciones.

Para la reacción de epoxidación a medida que aumenta la temperatura disminuye la energía libre de Gibbs, lo que indica que la reacción se favorece a altas temperaturas.

Para la reacción 2, la energía libre de Gibbs aumenta con la temperatura, lo que nos indica que solo es posible trabajar a bajas temperaturas para que se de la reacción.

Ya que estas dos reacciones se llevarán a cabo en un mismo reactor, este se debe operar a bajas temperaturas que es el único rango donde se cumple que en ambas este valor sea negativo y sea posible la reacción.

Gráfica 3



En esta gráfica presentamos el comportamiento de la constante de equilibrio con respecto a la temperatura, donde para ambas reacciones el equilibrio se desplaza hacia la formación de productos (constante de equilibrio grande) a medida que disminuye la temperatura, por tanto, es mejor trabajar a bajas temperaturas. Mientras que al aumentar la temperatura disminuye la constante de equilibrio, indicando que es mayor la concentración de los reactivos y menor la de los productos.

Para la reacción 1 K_e es bastante grande, con lo que podemos asegurar que la reacción se da solo en el sentido de los productos (irreversible).

En la reacción 2, K_e aumenta a medida que disminuye la temperatura, pasando esta de ser pequeña a altas temperaturas hasta alcanzar un valor

en que se favorece la formación de productos, sin embargo, esta constante es muy pequeña en comparación con la reacción 1, por lo cual no se puede asegurar una irreversibilidad.

CONCLUSIÓN DEL ANÁLISIS TERMODINÁMICO

Realizado el análisis del comportamiento de la entalpía de la reacción (calor de reacción), la energía de Gibbs (viabilidad de la reacción) y constante de equilibrio (desplazamiento del equilibrio) con la temperatura para cada una de las dos reacciones, procedemos a analizar los resultados obtenidos con el fin de hallar una temperatura optima de proceso para cada una de las reacciones, donde se vean favorecidas tanto la energía de Gibbs como la constante de equilibrio.

En ambas reacciones las mejores condiciones de operación se dan a bajas temperaturas, que es donde se presentan los valores más pequeños de Gibbs y los más grandes para K_e . Además, teniendo en cuenta que se utilizará un catalizador diferente para cada reacción, los cuales se activan a determinadas temperaturas para favorecer el curso de cada una de las reacciones; confirmando las condiciones de operación establecidas por “ Muller; Ulrich; Grosch; George Heinrich; Walch; Andreas; Rieber y Norbert” en la patente americana No 403590 “Síntesis de Glicol Mono Eteres”. Donde la reacción de epoxidación se lleva a cabo con un catalizador de silicatos de Titanio o Vanadio a una temperatura de -30°C (243 K) y la reacción de alcoxilación con un catalizador como la zeolita ácida: H-B-Beta Zeolita a una temperatura de 0°C (273 K).

Para asegurar que primero se lleve a cabo la reacción de epoxidación, el reactor debe mantenerse a -30°C por un tiempo determinado para favorecer la producción de oxirano y luego llevarlo 0°C para provocar la activación del

catalizador alcoídico y llevar a cabo la reacción del óxido de etileno y el butanol para la obtención del Butilglicol.

NOTA: El código de programación para el análisis termodinámico efectuado en MATLAB se presenta en el ANEXO.

2.9 SÍNTESIS DEL PROCESO

En la información bibliográfica obtenida (Patente Americana No. 403590) sólo se describe la unidad de reacción a nivel experimental, es decir, la cantidad de reactivos cargados, la masa de catalizador utilizado y el tiempo de reacción. Por tanto, se propondrá como sería un proceso industrial para la obtención de butilglicol con su correspondiente sección de acondicionamiento y separación, para una producción de 704 ton año, valor aproximado como la centésima parte del consumo en Estados Unidos de etileno glicol éteres (<http://ceh.sric.sri.com/Public/Reports/663.5000/Abstract.html>).

La creación del proceso se llevará a cabo siguiendo los pasos para diseño de procesos presentados en "Process Design Principles" (Warren D. Seider, J. D. Seader, Daniel R. Lewin).

Modo de proceso: Batch

Es proceso Batch debido a que se manejan tres fases, un catalizador sólido, unos reactivos líquidos y se presuriza con uno de los reactantes gaseoso. Además de que esta forma de obtención de glicol éteres integrada se encuentra en experimentación y no se cuenta con datos sobre la cinética, y lo mejor es llevar a cabo el proceso de forma similar a los experimentos.

Materia prima:

Etileno: Se adquiere en estado gaseoso en recipientes de alta presión

Peroxido de hidrógeno: Se dispone de el en solución al 30%, ya que es una sustancia bastante inestable.

Butanol: Se dispone de butanol líquido de alta pureza (99%).

Catalizador: Son partículas sólidas de dos tipos: H-ZSM-5 zeolita y H-B-Beta zeolita.

Se dispone de todos los reactivos

Síntesis del problema:

Se dispone de todos los reactantes a la temperatura ambiente (28 °C) y presión atmosférica (1 atm) a excepción del etileno que se mantiene presurizado.

El producto debe obtenerse líquido a temperatura ambiente y con un 99% de pureza.



Operaciones llevadas a cabo en el proceso:

Reacciones químicas.

Se dan dos reacciones químicas: una para la producción de óxido de etileno a partir de etileno y peróxido y otra para la obtención de butilglicol mediante la reacción de óxido de etileno y butanol. Ambas reacciones se dan en fase líquida y son catalizadas por partículas sólidas de silicato de titanio y H-ZSM-5 zeolita respectivamente.

Las dos reacciones se efectúan en el mismo reactor, produciéndose primero el óxido de etileno a $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$ y luego el butilglicol a $0\text{ }^{\circ}\text{C}$, por lo que el reactor se debe operar por lotes.

Inicialmente se cargan los reactivos líquidos y el catalizador al reactor a temperatura ambiente, para acondicionarlos hasta la temperatura de la primera reacción es necesario que el reactor posea un sistema de intercambio de calor como un enchaquetamiento por el cual circule un refrigerante. Para matener la homogeneidad dentro del reactor, este tendrá un sistema de agitación de hélice, con una velocidad angular de 800 rpm que consume 1 hp por cada 1000 gal.

Debido a que es necesario refrigerar y la temperatura ambiente es un poco alta, se puede acondicionar el reactor en un cuarto frío a $20\text{ }^{\circ}\text{C}$, para disminuir la transferencia de calor de los alrededores al sistema.

Ya que se trata de un reactor por lotes el catalizador debe ser alimentado con alguna de las corrientes líquidas de manera homogénea.

Alcanzados los $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$ se comienza la adición de etileno al reactor para dar comienzo a la primera reacción. El reactor debe poseer un sistema de sellamiento para gases que permita la operación a altas presiones.

Debido a que esta forma de proceso para la obtención de butilglicol es apenas objeto de estudio no se posee su ecuación cinética, por lo que operaremos el reactor a iguales condiciones que las trabajadas en la patente.

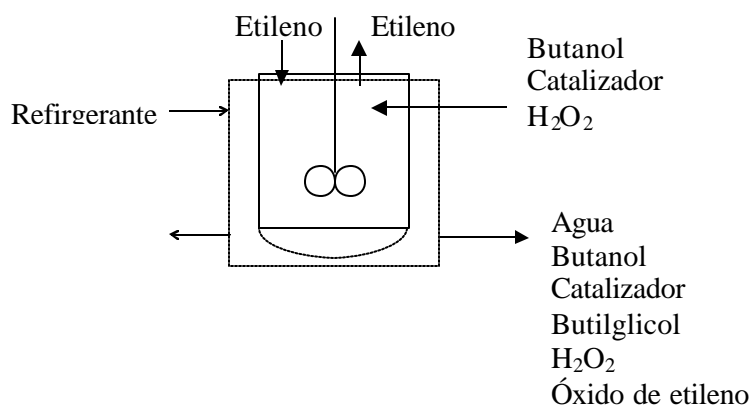
	X (composición molar)	W (composición másica)
Etileno	0.3287	0.2296
Butanol	0.2793	0.4043
H ₂ O ₂ (30% peso)	0.3921	0.3328
Silicato de Titanio		0.0166
H-ZSM-5 zeolita		0.0166

En la patente se presurizó un autoclave de 250 ml con 20.7 g de etileno, es decir, cuando empezaron a trabajar el reactor a $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$ la presión era de 59 atm; por lo que se trabajara nuestro reactor a la misma presión. La presión de operación será alta ya que se dispone de un olefina gaseosa y esta es solubilizada en el butanol sólo a altas presiones y bajas temperaturas.

El tiempo de reacción trabajado en la patente fue de 5 horas y 30 minutos, 30 minutos a $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$ (epoxidación) y 5 horas a $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ (alcoxilación).

Finalizada la reacción se debe retirar inicialmente el etileno restante que se encuentra en forma gaseosa y una vez se encuentra a presión atmosférica se retiran los productos líquidos junto con los catalizadores a $0\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Para obtener el butilglicol de la pureza deseada es necesario efectuar un sistema de separación, en el cual se debe retirar: catalizador, agua, óxido de etileno y peróxido de hidrógeno.



Mezclado de corrientes.

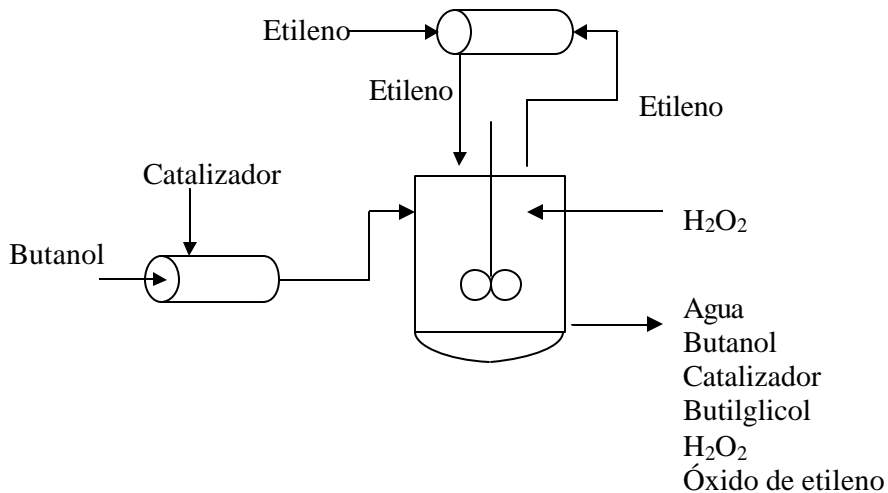
Para facilitar la carga del catalizador al reactor, este se debe mezclar primero con uno de los reactivos líquidos que lo fluidice; para ello se puede utilizar la corriente de butanol ya que el peróxido de hidrógeno puede ser más riesgoso.

La mezcla de catalizador-butanol se realiza antes del reactor mediante una unidad de mezclado, que puede ser un mezclador sin movimiento que posea placas helicoidales fijas que se encargan del mezclado. Este mezclador se podría operar a temperatura ambiente.



Terminada la reacción, el etileno remanente en estado gaseoso debe ser removido del reactor y dado que es una cantidad apreciable se debe reutilizar en la próxima operación del reactor. Para ello se puede tomar la corriente de salida y almacenarla en un tanque para luego combinarla con el etileno puro de reposición y alimentarla al reactor nuevamente.

El etileno almacenado intercambiará calor con el medio, alcanzando la temperatura ambiente, mientras que es alimentado al reactor.



Separación.

La corriente de productos que sale del reactor no posee las especificaciones con que se debe distribuir el producto, por ello se deben efectuar operaciones de separación que garanticen un cambio en la composición de las corrientes. Primero es necesario remover los sólidos, lo cual se puede realizar mediante centrifugación (según la tabla 5.1, pag 144 del libro "Process Design Principles"); el catalizador removido será llevado de nuevo a la tolva de alimentación para ser utilizado en la siguiente cochada. La centrifugación se llevará a cabo a la misma temperatura de salidad de las especies del reactor (0°C) .

La corriente líquida efluente de la centrifugación, que posee agua, H₂O₂, óxido de etileno, butanol y butilglicol se separará en un tren de destilación de dos etapas; en la primera se espera retirar la totalidad del óxido de etileno presente y en la segunda se desea obtener un producto de fondos con las especificaciones correspondientes al butilglicol comercial. Se seleccionó la destilación ya que las diferencias en la volatilidades relativas de los componentes respecto al butilglicol son lo suficientemente grandes (mayores a 1.5) para asegurar una separación completa en el caso del óxido de etileno y una buena separación en la segunda.

En la siguiente tabla se especifican las presiones de vapor de los componentes y sus volatilidades relativas con respecto al butilglicol a 49 °C, ya que el algoritmo para determinar el tipo de condensador que se debe usar se da en el libro "Process Design Principles" a esta temperatura.

	Pvapor (atm)	Volatilidad relativa (a)
Butanol	0.0423	7.2
Agua	0.1153	19.64
Óxido de etileno	3.8242	651.4821
Butilglicol	0.00587	1

Como se puede observar en la tabla, la volatilidad relativa del óxido de etileno (651.48) es muy superior a las demás; por lo que se ha reconsiderado la idea de usar una idea de usar una torre de destilación por la de implementar una torre de flasheo, reduciendo costos y garantizado la misma efectividad.

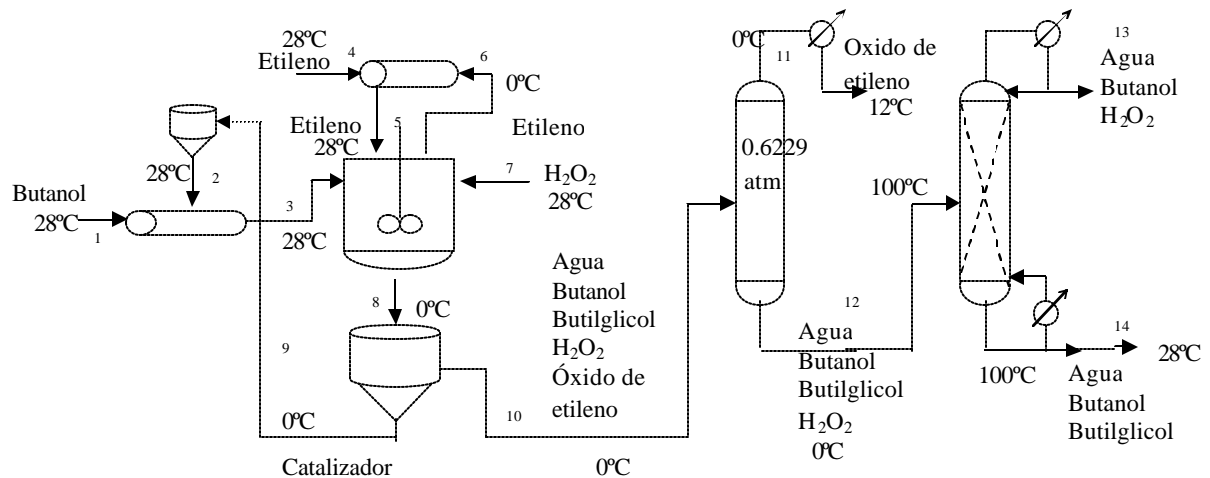
La temperatura de entrada de la corriente a la torre de flasheo es de 0°C (Temperatura de salida de la centrifugación y la presión de operación de la misma es la de saturación del óxido de etileno a esta temperatura (0.6529 atm). Se utilizará un condensador total para licuar los vapores de óxido de etileno que se deben obtener a 12 °C (temperatura de saturación a 1 atm). Los fondos generados se encontrarán a 0°C y la presión de operación de la torre.

La torre de destilación sería la última etapa del proceso de separación; su operación consiste de una alimentación proveniente de la torre de flasheo que podría ingresar a 100 °C, la presión de operación será de una atmósfera y se espera que la composición molar del producto de fondos sea: 97.2 % de butilglicol, 1.29% de agua y 1,56 % de butanol (determinadas de las especificaciones en peso antes mencionadas).

Para determinar el tipo de condensador se debe calcular a 49 °C la presión de burbuja del destilado, si es menor de 1.48 MPa se debe usar un condensador total; si es superior a esta presión se halla la presión de rocío de destilado; si es inferior a 2.52 MPa se usará un condensador parcial y si

es superior un refrigerante es la mejor opción para operar el condensador parcial.

Como aun no se poseen las especificaciones del destilado no es posible escoger el tipo de condensador.



Cambios de temperatura y cambios de presión.

Como se ha descrito, a través del proceso muchas veces se dispone de corrientes a diferentes condiciones de las necesarias de operación de una unidad determinada, creándose la necesidad de acondicionar dichas corrientes, para lo cual se dispone de unidades de transferencia de calor como los intercambiadores de calor cuando se presentan diferencias en la temperatura y bombas (líquidos), turbinas o compresores (gases) para cambios en la presión; ya sean grandes o solo para impulsar las sustancias a través de las tuberías.

Por tanto en el esquema del proceso se deben incluir estos accesorios cuando sean necesarios:

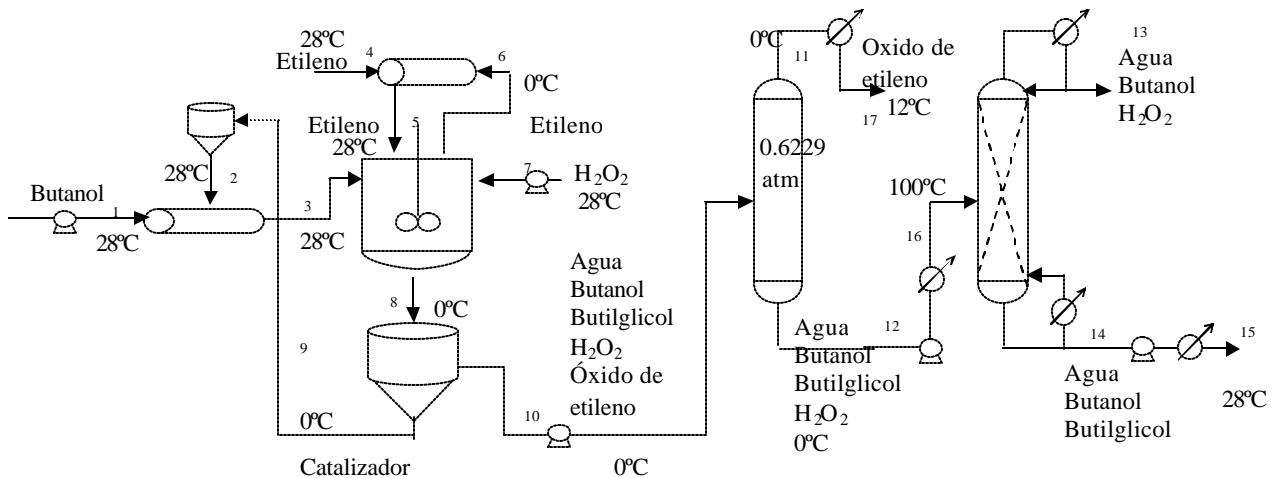
En las corrientes 1, 7, 10, 12 y 14 se implementan bombas con el fin de proporcionar energía cinética a los fluidos.

Las corrientes 12 y 15 por condiciones del proceso deben tener sistemas de intercambio de calor.

El sistema de enchaquetamiento del reactor es otra forma de intercambio calórico usado para mantener las condiciones de operación.

Cambios de fase.

Los cambios de fase se dan en equipos cuando se supera la temperatura de saturación de la sustancia o la mezcla en operación isobárica o la presión de saturación si la operación es isotérmica. En este proceso los cambios de fase se dan en los condensadores y el rehervidor asociados a la torre de flasheo y destilación.



2.10 BALANCES DE MATERIA

Los balances se efectuarán teniendo en cuenta que se espera una producción anual de 704 Tm, es decir, diariamente se tendrá que producir 1956 Kg (16550 mol) de producto. Teniendo en cuenta que el reactor se operará en dos turnos, la producción por cochada debe ser de 8275 mol.

A continuación se presenta el diagrama del proceso resumido con las especificaciones que conciernen al balance de materia, con el fin de elaborar la tabla de grados de libertad.

Nomenclatura:

F = Flujo másico

Si = Silicato de titanio

N = Flujo molar

Z = H-ZSM5 Zeolita

x = Composición molar

w = Composición másica

Subíndices:

A = Agua

B = Butanol

E = Etileno

BG = Butilglicol

OE = Óxido de etileno

H₂O₂ = Peróxido de hidrógeno

TABLA DE GRADOS DE LIBERTAD

Unidad:	Mezclador 1	Mezclador 2	Reactor	Centrífuga	Flash	Destilación
NVI	6	3	14+2r	14	10	10
NBM	3	1	8	7	5	4
NCC	2	-	3	-	-	2
NFC	-	-	-	-	-	1
NR	-	-	4	-	-	-
Grados de libertad	1	2	1	7	5	3

Relaciones:

R1: $N_7/N_5 = 1.193$

R2: $N_5/N_{3B} = 1.177$

R3: Conversión de peróxido $X = 99\%$

R4: Conversión de óxido de etileno $X = 85\%$

De la tbla de grados de libertad vemos que no se tiene ninguna unidad correctamente especificada y por lo tanto no es posible resolver el balance directamente. La unidad con menos grados de libertad es el reactor (1) que se podría resolver conocido algún flujo; por ello para resolver los balances es necesario arrastrar el flujo del butilglicol en el producto final (corriente 14) que es igual al de la salida del reactor (corriente 8).

Estrategia de solución:

Resolver el reactor y determinar los flujos de las corrientes 3, 5, 6, 7 y 8.

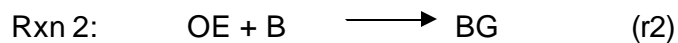
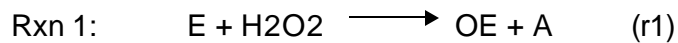
Conocida la corriente 3, los grados de libertad del mezclador 1 se reducen a cero y se pueden hallar las corrientes 1 y 2.

Con las corrientes 5 y 6 el mezclador 2 queda completamente especificado y es posible encontrar la corriente 4.

Con los flujos de la corriente 10 (butanol, butilglicol, peróxido, óxido de etileno y agua), es posible determinar los flujos de salida de la torre de flasheo.

Encontradas las condiciones de la corriente 12 los grados de libertad de la columna de destilación restan cero y finalmente son resueltos los balances molares del proceso.

Solución:



Balances por componente

Reactor:

$$\text{BG:} \quad r_2 = N_{8 \text{ BG}}$$

$$\text{OE:} \quad r_1 - r_2 = N_{8 \text{ OE}}$$

$$\text{H}_2\text{O}_2: \quad N_{7 \text{ H}_2\text{O}_2} - r_1 = N_{8 \text{ H}_2\text{O}_2}$$

$$\text{A:} \quad N_{7 \text{ A}} + r_1 = N_{8 \text{ A}}$$

$$\text{E:} \quad N_{5 \text{ E}} - r_1 = N_{6 \text{ E}}$$

$$\text{B:} \quad N_{3 \text{ B}} - r_2 = N_{8 \text{ B}}$$

$$\text{Z:} \quad F_3 W_{3 \text{ Z}} = F_{8 \text{ Z}}$$

$$\text{Si:} \quad F_3 W_{3 \text{ Si}} = F_{8 \text{ Si}}$$

Mezclador 1:

$$B: \quad N_{1B} = N_{3B}$$

$$Si: \quad F_{2Si} = F_{3Si}$$

$$Z: \quad F_{2Z} = F_{3Z}$$

Mezclador 2:

$$E: \quad N_{4E} = N_{5E} - N_{6E}$$

Centrífuga:

$$Si: \quad F_{9Si} = F_{2Si}$$

$$Z: \quad F_{9Z} = F_{2Z}$$

$$BG: \quad N_{10BG} = N_{8BG}$$

$$OE: \quad N_{10OE} = N_{8OE}$$

$$H_2O_2: \quad N_{10H_2O_2} = N_{8H_2O_2}$$

$$A: \quad N_{10A} = N_{8A}$$

$$B: \quad N_{10B} = N_{8B}$$

Flash:

$$OE: \quad N_{11OE} = N_{10OE}$$

$$BG: \quad N_{10BG} = N_{12BG}$$

$$H_2O_2: \quad N_{10H_2O_2} = N_{12H_2O_2}$$

$$A: \quad N_{10A} = N_{12A}$$

$$B: \quad N_{10B} = N_{12B}$$

Destilación:

$$\text{H}_2\text{O}_2 : \quad N_{13 \text{ H}_2\text{O}_2} = N_{12 \text{ H}_2\text{O}_2}$$

$$\text{BG} : \quad N_{14 \text{ BG}} = N_{12 \text{ BG}}$$

$$\text{A} : \quad N_{14 \text{ A}} + N_{13 \text{ A}} = N_{12 \text{ A}}$$

$$\text{B} : \quad N_{14 \text{ B}} + N_{13 \text{ B}} = N_{12 \text{ B}}$$

Matriz de resultados:

Flujos molares (gmol).

Las filas representan las corrientes y las columnas representan las sustancias.

No se incluyen los catalizadores ya que son sólidos complejos y sólo es posible determinar sus flujos másicos.

Corrientes	E	B	H ₂ O ₂	A	OE	BG	TOTAL
1	-	36795.2 30	-	-	-	-	36795.2 30
2	-	-	-	-	-	-	-
3	-	36795.2 30	-	-	-	-	36795.2 30
4	9462.20 0	-	-	-	-	-	9462.20 0
5	43307.9 85	-	-	-	-	-	43307.9 85
6	33845.7 85	-	-	-	-	-	33845.7 85
7	-	-	9558.2 9	42108.1 4	-	-	51666.4 30
8	-	27332.5	95.585	51570.8	1419.40	8043.	88461.6

		25		45	5	3	60
9	-	-	-	-	-	-	-
10	-	27332.5	95.585	51570.8	1419.40	8043.	88461.6
		25		45	5	3	60
11	-	-	-	-	1419.40	-	1419.40
					5		5
12	-	27332.5	95.585	51570.8	-	8043.	87042.2
		25		45		3	55
13	-	27203.4	95.585	51468.2	-	-	78767.2
		35		35			55
14	-	129.090	-	102.61	-	8043.	8275
						3	

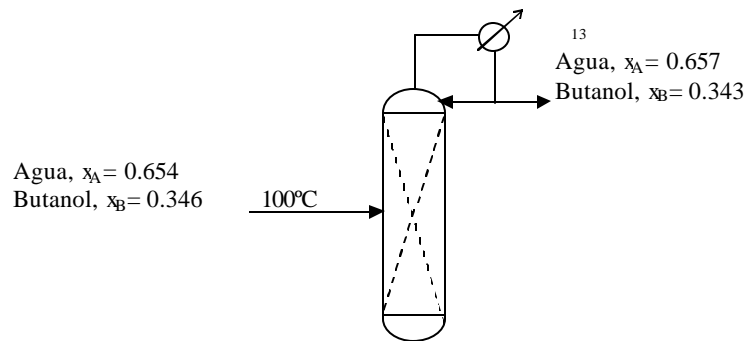
Flujos másicos (Kg).

	E	B	H2O2	A	OE	BG	Si	Z	Total
1	-	2134.1233	-	-	-	-	-	-	2134.123
2		-	-	-	-	-	87.525	87.525	175.05
3	-	2134.1233	-	-	-	-	87.525	87.525	2309.173
4	264.9416	-	-	-	-	-	-	-	264.9416
5	1212.6236	-	-	-	-	-	-	-	1212.623
6	947.6820	-	-	-	-	-	-	-	947.682
7	-	-	324.9818	757.9465	-	-	-	-	1082.928
8	-	1585.2864	3.24989	928.2752	62.4538	950.5572	87.525	87.525	3704.872
9		-	-	-	-	-	87.525	87.525	175.05
10	-	1585.2864	3.24989	928.2752	62.4538	950.5572	-	-	3529.823
11	-	-	-	-	62.4538	-	-	-	62.4538
12	-	1585.2864	3.24989	928.2752	-	950.5572	-	-	3467.368
13	-	1577.7992	3.24989	926.4282	-	-	-	-	2507.477
14	-	7.48722	-	1.8469	-	950.5572	-	-	959.8914

Para realizar los balances de energía del proceso aún hace falta determinar las condiciones de operación de la torre de destilación, la temperatura del destilado y la de fondos bajo operación isobárica. Por lo que se realizará el diseño de esta para obtener las composiciones del fondo.

Dado que la fracción molar de peróxido de hidrógeno a la entrada de la torre de destilación es tan pequeña (0.001098) y de que este siempre se encuentra disuelto en agua, que representa la mayor composición de la corriente de entrada, se trabajará la solución de estas sustancias como agua pura. De esta manera, la entrada a la torre constaría de agua, butanol y butilglicol, lo que se pretende en esta unidad es separar el agua y el butanol del producto final, concentrando todo el butilglicol en los fondos y evaporando el agua y el butanol restantes; ya que el agua y el butanol poseen temperaturas de saturación similares (100 y 117 °C), sus volatilidades relativas con respecto al butilglicol son grandes y la temperatura de saturación de este es alta (171 °C) se asumirá que el butilglicol no se evapora y la separación solo se da entre el agua y el butanol.

De lo anterior, para realizar el diseño de la torre es necesario cambiar las composiciones halladas en el balance de materia por composiciones libres de butilglicol y tomar el peróxido de hidrógeno como agua. En el siguiente esquema se dan las nuevas fracciones molares para el agua y el butanol a la entrada y salida de la torre.



Primero se realizará el diagrama de temperatura versus x - y y luego el diagrama de distribución para poder iniciar el diseño de la torre por el método McCabe Thiel.

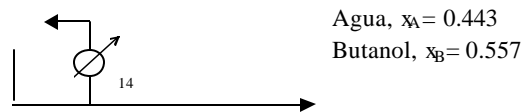
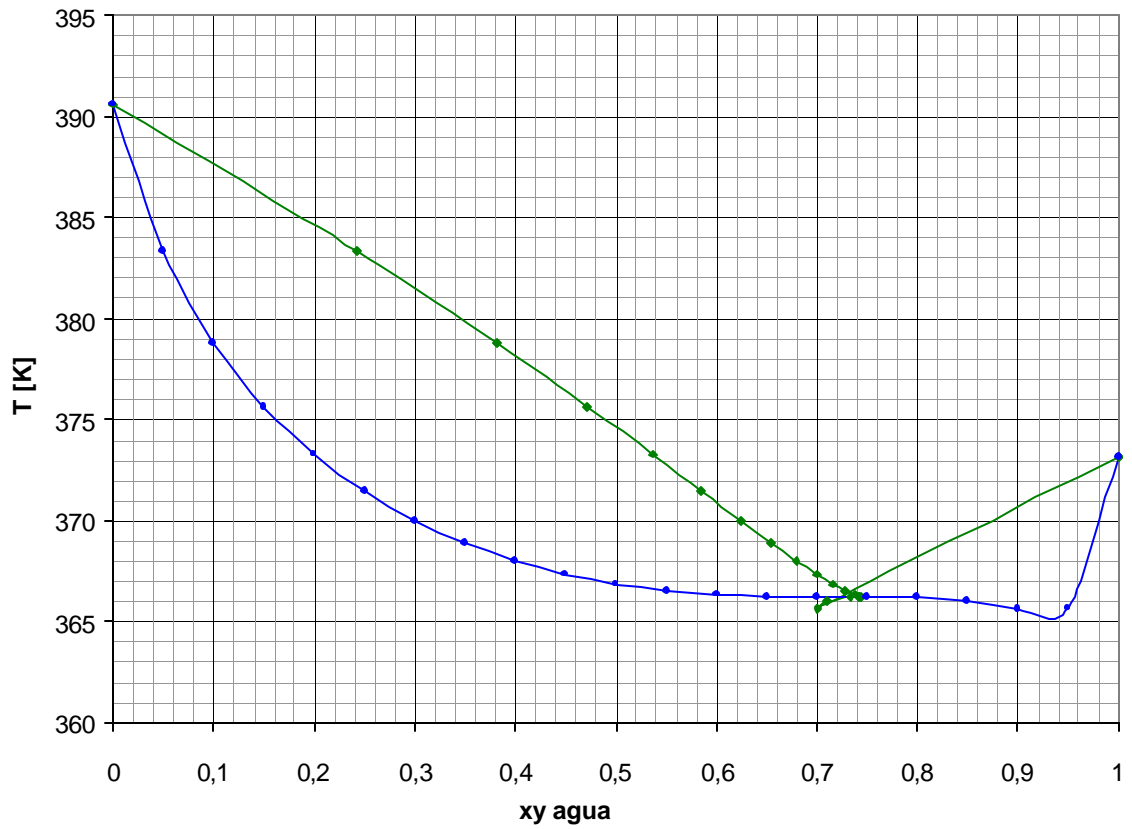
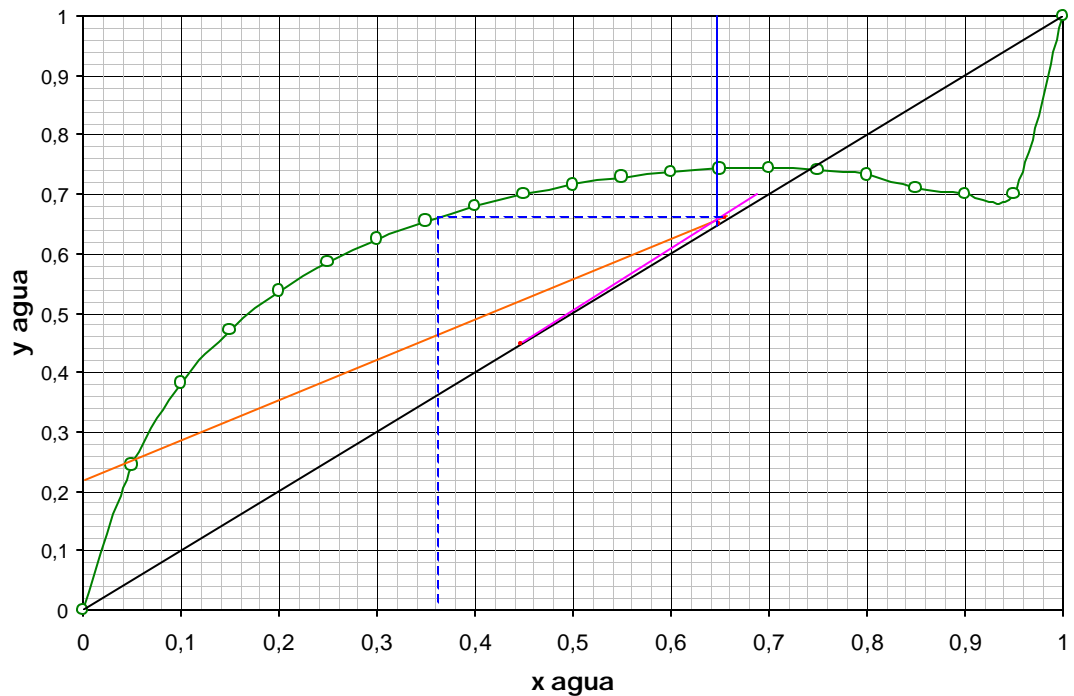


Diagrama T xy



De la gráfica podemos decir que se presenta un azeótropo de composición aproximada de 0.74, sin embargo esto no presenta ningún tipo de problema para la separación dado que la alimentación, la composición de destilado y los fondos se encuentran a la izquierda de este punto.

Diagrama de distribución



Luego se ubican la composición de la alimentación, el destilado y los fondos. Se trazan las líneas de alimentación y de operación de la sección de enriquecimiento tomando un reflujo de 2. Esto implica que la pendiente de la línea de operación de la sección de enriquecimiento tiene un valor de $2/3$, lo que lleva a que intercepto con las ordenadas sea de 0.2178. A continuación se dibuja la línea de operación de la sección de agotamiento entre el punto de la sección de fondos y la intersección entre la línea de alimentación y la de enriquecimiento. Finalmente se indican los escalones correspondientes a los platos.

Como vemos en el diagrama y-x, para alcanzar una composición de fondos de 0.443 una etapa teórica sería mas que suficiente. Ya que lo que se pretende no es enriquecer el destilado con butanol o agua, si no concentrar butilglicol en los fondos, sería mas razonable utilizar un flash isotérmico, que es más económico y operable que una columna de destilación, obteniéndose

de igual forma la especificación del producto. Por ello mejor se realizará el cálculo de una destilación flash.

Para una destilación flash, el balance molar para la sustancia más volátil, en nuestro caso el agua es el siguiente.

$$x_f = f \cdot y_D + (1 - f) \cdot x_B$$

donde los subíndices f, D, B se refieren a la alimentación, el destilado y los fondos respectivamente.

Para una composición de fondos de $x_B = 0.443$ que es lo que se desea, el y_D que estaría en equilibrio se puede obtener del diagrama T xy al igual que la temperatura.

$$y_D = 0.699$$

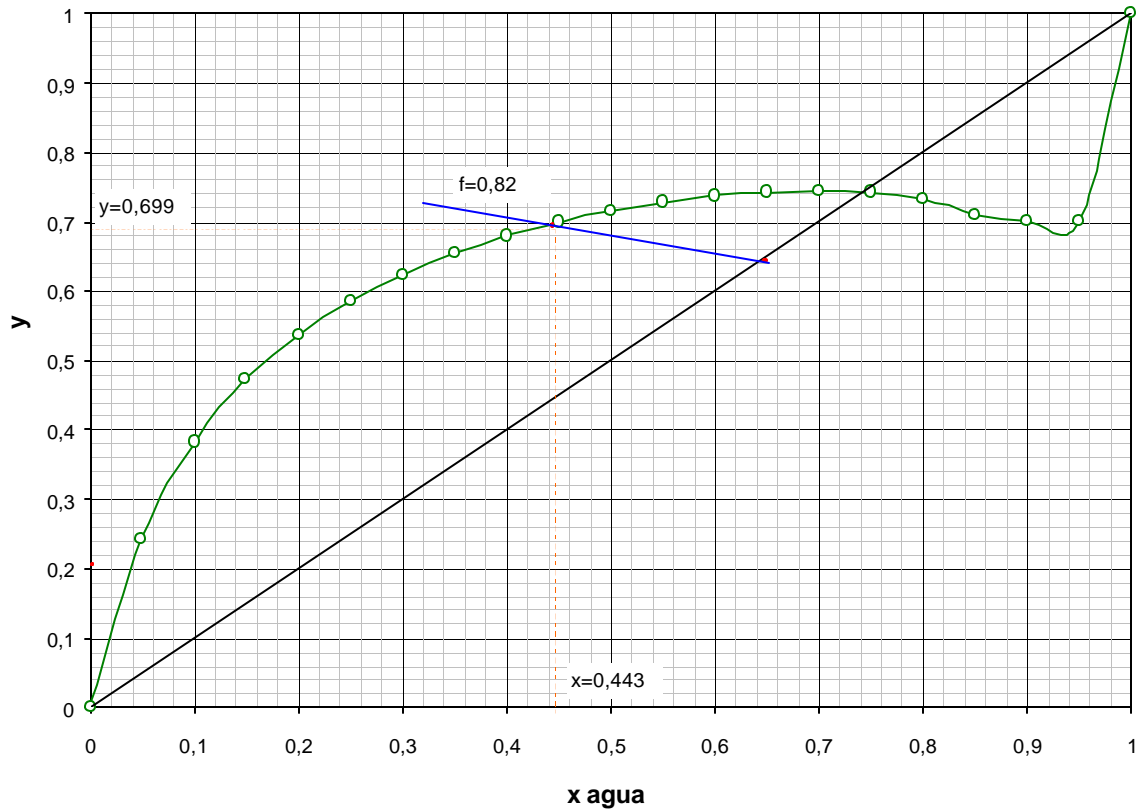
$$T = 367.3 \text{ K}$$

Para estas condiciones la fracción evaporada f se puede despejar de la ecuación del balance.

$$f = \frac{x_f - x_B}{y_D - x_B} = 0.8242$$

Diagrama para la torre de flasheo

Diagrama de distribución



En la composición del destilado, se presenta una pequeña variación en comparación por los hallados en los balances de materia ($y_D= 0.657$), esto debido a que el diseño solo se realiza para el butanol y el agua, sin tener en cuenta el butilglicol, lo que afecta el equilibrio, sin embargo la variación no es muy grande por lo que se puede hacer esta aproximación para determinar las condiciones de operación de la torre de flasheo.

Adicional a la torre de flasheo se ve la necesidad de realizar otras modificaciones. Dado que la tubería representada en el diagrama de flujo por la corriente 10 eventualmente sería muy larga, no se puede asegurar que permanezca isotérmica sin poseer un muy buen aislamiento, por lo que se supone que en este trayecto habrá una transferencia de calor con los alrededores, de tal manera que al final la temperatura del fluido que circula

por allí halla alcanzado la ambiente(28°C). Debido a esto la temperatura a la entrada de la torre de flasheo será de 28°C, que está por encima de la temperatura de saturación del óxido de etileno (12°C), lo que conlleva a que no se necesite una reducción de presión y la torre de flasheo se convierta en un simple tanque de expansión.

Como del nuevo tanque de expansión el óxido de etileno saldrá a 28°C, se reconsidera la idea de un condensador debido a sus altos costos, para ser reemplazado por un compresor.

3. EL PROCESO DE PREPARACIÓN Y EVALUACIÓN DE PROYECTOS

El estudio del proyecto pretende contestar el interrogante de si es o no conveniente realizar la inversión. Esta recomendación sólo será posible si se dispone de todos los elementos de juicio necesarios para tomar la decisión.

Con este objeto, el estudio de viabilidad debe intentar simular con el máximo de precisión lo que sucedería al proyecto si fuese implementado, aunque difícilmente pueda determinarse al proyecto si fuese implementado, aunque difícilmente pueda determinarse con exactitud el resultado que se logrará en su implementación. De esa forma, se estimaron los beneficios y costos que probablemente ocasionaría y, por lo tanto, que pueden evaluarse.

En términos generales, 5 son los estudios particulares que deben realizarse para evaluar el proyecto. Ellos son los de la viabilidad comercial, técnica, legal, organizacional y financiera, si se trata de un inversionista privado, o económica, si se trata de evaluar el impacto en la estructura económica del país. Cualquiera de ellos que llegue a una conclusión negativa determina que el proyecto no se lleve a cabo.

El estudio de la viabilidad comercial indicará si el mercado es o no sensible al bien o servicio producido por el proyecto y la aceptabilidad que tendría en su consumo o uso.

El estudio de viabilidad técnica estudia las posibilidades materiales, físicas y químicas, condiciones y alternativas de producir el bien o servicio que se desea generar con el proyecto.

El estudio de la factibilidad organizacional es el que normalmente recibe menos atención, a pesar de que muchos proyectos fracasan por falta de capacidad administrativa para emprenderlo. El objetivo de este estudio es principalmente, definir si existen las condiciones mínimas necesarias para garantizar la viabilidad de la implementación, tanto en lo estructural como en lo funcional.

El estudio de la viabilidad financiera de un proyecto determina, en último término, su aprobación o rechazo. Este mide la rentabilidad que retorna la inversión.

ESTUDIO DE PROYECTO				
ESTUDIO DE MERCADO	ESTUDIO TÉCNICO	ESTUDIO DE LA ORGANIZACIÓN	ESTUDIO FINANCIERO	EVALUACIÓN

3.1 ESTUDIO DEL MERCADO

Más que el estudio del consumidor para determinar el precio del producto y la cantidad que demandará, para calcular los ingresos, se tendrá que analizar los mercados proveedor, competidor, distribuidor, consumidor y externo.

✓ *El mercado del proveedor:*

Tener en cuenta la calidad, cantidad, oportunidad de la recepción y costo de materiales:

Distribuidor / Reactivos	CARTAGEN A	CHILE	BOGOTÁ (SHELL)	MÉXICO (ASA)	CALI
Butanol	--	--	USD1,44 L	USD 1,4L	--
Etileno	*	USD1,48 L	--	USD1,46 L	--
H₂O₂	--	--	--	USD 0,89	USD1,1 L

* Próximamente se producirá etileno en la refinería de Cartagena.

Por la disponibilidad, costo del reactivo y transporte, es más rentable para la industria cellosolvente, comprar el butanol en la Shell, en Bogotá. Inicialmente el etileno se comprará en la industria ASA de México, pero con el tiempo, hay la posibilidad de comprarlo en Cartagena. Por estas dos razones la ubicación de la planta es en Cartagena-Colombia.

Si comparamos los precios del peróxido de hidrógeno de la industria de Cali y de México, la diferencia de precios es de \$588 pesos moneda colombiana,

más barato en México; pero si tenemos en cuenta el costo de transporte y disposición, sale más favorable comprarlo en Cali.

✓ *El mercado competidor:*

Son las industrias que elaboran y venden el producto, en nuestro caso, el Butilglicol.

Por tal razón sería favorable conocer los antecedentes del competidor, como conocer los precios a que vende, las condiciones, plazos y costos de los créditos que ofrece y los descuentos por volúmenes y pago.

Con estos datos podemos determinar si somos capaces de poder competir con las demás industrias.

PRECIO DE LOS PRODUCTORES DEL BUTILGLICOL	
PRODUCTORES	PRECIO (USD POR LITRO)
SHELL (BOGOTÁ)	5.25 L
ASA (MÉXICO)	4.69 L
CELLOSOLVENTE (CARTAGENA)	4,67 L

Como podemos observar el precio del producto por nuestra industria es mucho menos que los ofrecidos por la Shell y ASA, cuyo fin, es de controlar el mercado nacional, con utilidades del 45%.

El precio de nuestra industria con la misma calidad de la industria de México, es un poco más bajo, pero competir en el exterior no es favorable, ya que hay que tener en cuenta transporte y otros factores de importancia.

Como subproducto tendremos el óxido de etileno, que se vendrá un 20% de utilidades, lo que nos indica que podemos competir con las demás industrias productoras del butilglicol o del óxido de etileno.

PRECIO DEL PRODUCTO DEL OXIDO DE ETILENO	
PRODUCTORES	PRECIO (USD POR LITRO)
BOGOTÁ (DESCONOCIDA)	5,0
CELLOSOLVENTE (CARTAGENA)	4,8

Hay que tener en cuenta que esas utilidades es con respecto a los reactivos, no en comparación con los valores del equipo ni personal u otros.

3.2 ESTUDIO TÉCNICO

Tiene por objeto proveer información para cuantificar el monto de las inversiones y costos de operación pertinentes a esta área.

De aquí se podrá obtener la información de las de capital, mano de obra y recursos materiales, tanto para la puesta en marcha como para la posterior operación del proyecto.

Para este análisis económico se debe tener en cuenta:

- ✓ *Inversiones de obra física:* es aquella inversión que realiza para la adquisición de terrenos, construcciones, remodelaciones, etc.

ITEM	UNIDA D DE MEDID	CANTIDAD (DIMENSIÓ N)	COSTO UNITARIO \$	COSTO TOTAL \$
-------------	---------------------------------	--------------------------------------	----------------------------------	-------------------------------

	A		COLOMBIANO S	COLOMBIANO S
Terreno	M ²	1.600	300.000	480.000.000
Construcción	M ²	348	500.000	174.000.000
Implementación de equipos	Unidad	11	400.000	4'400.0000
Inversión de obras físicas				658.400.000

✓ *Inversión en equipamiento:*

Se entiende que son todas las inversiones que permitan la operación normal de la planta de la empresa:

✓ **Costo y Diseño Del Equipo**

Cuando se está construyendo una planta, luego de preparar un diagrama de flujo del proceso y resolver los balance de materia y energía, el paso siguiente es especificar los equipos que aparecen en él. Sería necesario tener especificación detallada del diseño y los dibujos de fabricación de todo el equipo, incluyendo instrumentos, cableado, tuberías y equipo auxiliar. Se necesitaría especificar todos los detalles mecánicos completamente (esto para diseños donde el grado de detalle es alto y tiene un costo de 10 a 20 % del costo de una planta).

Son pocos los procesos propuestos que llegan a materializarse y el dinero gastado en los diseños no aceptados es dinero perdido, por tanto, un ingeniero debe saber identificar rápidamente los costos del equipo adecuado de manera que se pueda predecir el beneficio económico. Esto requiere de métodos cortos de diseño que puedan emplearse para obtener resultados baratos y que tengan una exactitud razonable.

Los métodos cortos de diseño por los general no sustituyen a los diseños rigurosos necesarios para la construcción real del equipo, sin embargo, son adecuados para muchas estimaciones de costos.

Aunque cuando se realiza una visita a una planta, se observa que muchos equipos son casi irreconocibles cuando están en uso, integrados y cubiertos como sucede con los instrumentos, controles, aislamientos, líneas de servicio, tuberías, válvulas, y otros equipos exteriores; es necesario saber que los costos de los equipos periféricos y auxiliares pueden estimarse fácilmente utilizando factores desarrollados por los ingenieros de costos y por tanto sólo los costos de los componentes principales del proceso mostrado en el diagrama de flujo deben ser evaluados en detalle.

Equipos presentes en el proceso:

Caldera

Bombas

Compresores

Intercambiadores de calor

Tanques de alta presión

Tanques a la presión atmosférica

Tolva

Reactor

Centrífuga

Tanque de proceso (flash)

Mezclador sin movimiento

Caldera

Datos necesario para su especificación:

Temperatura de entrada, Presión de entrada, Concentración de entrada, Concentración de salida, Consumo de combustible, Tipo de combustible, Temperatura de vapor de proceso, Presión de vapor de proceso, Capacidad.

El medio más común para utilizar el calor en las plantas de proceso es el vapor debido a su bajo costo, limpieza, no corrosividad, gran contenido de energía y gran tasa de transferencia de calor. Para disminuir la corrosión, generalmente el agua de alimentación de la caldera lleva un tratamiento y desmineralizada, por tanto, la economía de operación exige que el condensado se recircule siempre que sea posible por lo general una recirculación de 70 a 90 %

Para calderas industriales pirotubulares se presentan las siguientes especificaciones obtenidas de la Tabla 4-8 (Ulrich).

Relación máxima de vapor (Kg/s)	25
Trabajo máximo de calentamiento (KJ/s)	60000
Eficiencia del combustible	75-80%
Fluido de servicio	Vapor
Temperatura máxima (°C)	210
Presión máxima (bar)	18
Temperatura de congelación (°C)	0
Materiales de construcción	
	Acero al carbón
	Acero al molibdeno o cromo
	Acero inoxidable
	Aleaciones de níquel o cromo
Tipo de combustible	
	Aceite ligero (5 a 10 % exceso de aire)
	Gas (5 a 10 % exceso de aire)
	Subproductos combustibles (5 a 20 % exceso de aire)

De la figura 5-26 (Ulrich) se obtiene el costo de compra de una caldera pirotubular con una carga térmica de 5000 KJ/s según:

$$C_{bm} = C_p \cdot F_{bm} \cdot F_p \cdot F_t$$

F_{bm}, F_p y F_t se determinan de la figura 5-25 (Ulrich).

$$F_{bm} = 1.8 \quad F_p = 1 \quad F_t = 1$$

$$C_p = \$ 80000 \text{ dolares}$$

Por tanto el costo de compra de la caldera es C_{bm} = \$ 144000 dolares

Bombas

Datos necesarios para su especificación:

Consumo de energía, Temperatura de entrada, Presión de entrada, Presión de salida, Flujo.

Los datos pueden extraerse directamente de la información del diagrama y del balance de materia que comprende el diagrama de flujo. En general, la definición de los materiales de construcción y del tipo de bomba exigen experiencia.

El consumo de potencia puede calcularse a partir de la ecuación de energía mecánica, haciendo un cambio despreciable en la velocidad y elevación, e incluyendo los términos de pérdida por fricción y en accesorios en la eficiencia y considerando los cambios en la densidad por efectos de presión como despreciable, se tiene la siguiente ecuación:

$$\dot{W}_s = \frac{\dot{m} \Delta P}{\rho \varepsilon_i} = q \frac{\Delta P}{\varepsilon_i} \quad (\text{Ec. 4-2 Ulrich})$$

De esta manera \dot{W}_s es la llamada potencia de eje, la cual entra al sistema a través de un eje en movimiento.

Para identificar el tipo de bomba y su eficiencia (ϵ_i) para una aplicación dada se cuenta con la tabla 4-20 (Ulrich). Para uso industrial en procesos químicos las bombas centrífugas radial es la más importante. Estas generalmente son el transporte más confiable, de trabajo pesado y económico, de líquidos de baja viscosidad en grandes volúmenes.

De la tabla 4-20 (Ulrich) se tiene que para bombas centrífugas radial:

Presión máxima del sistema (bar)	350
Intervalo de temperatura (°C)	-240 a 500
Capacidad máxima (m ³ /s)	10
Intervalo de viscosidad del fluido (Pa s)	< 0.2
Intervalo de eficiencia	50 – 85

Materiales de construcción

Acero al carbón

Hierro fundido

Acero inoxidable

Titanio

Etc.

La eficiencia se escoge como la más conveniente de la tabla mostrada en la tabla 4-20 (Ulrich).

Para tuberías de 2 ½ de pulgada, donde se espera que la velocidad de flujo aumente el doble. El la corriente 1 se esperan alimentar 2134.123 Kg en una hora, por tanto por segundo se debe alimentar 0.5928 Kg. Las corrientes de alimentación cuentan con 1 hora de carga al reactor y la de salida con 45 minutos para la descarga de productos.

Así para todas las corrientes en las que existe bomba se tiene:

Corriente	m (Kg/s)	q (m ³ /s)	ϵ_i	ΔP (Kpa)	W_s (Kw)
1	0.5928	0.000732	0.85	92	0.08
7	0.3	0.0003	0.8	46.63	0.02
10	1.31	0.00146	0.85	203.606	0.35
12	1.28	0.00142	0.85	198.99	0.33
14	0.355	0.00039	0.8	55.17	0.027

Obtenida la potencia de eje de las bombas se determina de la figura 5-49 (Ulrich) en función de la potencia del eje el costo de compra para bombas centrífugas.

Corriente	1	7	10	12	14
Cp (\$ dolares)	1100	1050	1200	1150	1050

Los precios son completos e incluyen los impulsores de motor eléctrico.

Para efectos del material de construcción se debe multiplicar el valor de costo (Cp) por un factor Fm. Para el material de construcción seleccionado (hierro fundido) el factor es 1, por tanto, los precios son los mismos.

Compresores

Datos necesarios para su especificación:

Consumo de electricidad, Temperatura de entrada, Presión de entrada y salida, Flujo.

Los transportadores de gas como los compresores son mecánicamente y teóricamente análogos a las bombas de líquido. Las diferencias principales consisten en volúmenes específicos mucho mayores y la viscosidad mucho menor de los gases. Con consecuencia, los compresores son mucho más grandes, tienen tolerancias menores, operan a velocidades mayores y

requieren más mantenimiento, consumen más potencia y son más caros que las bombas que operan con flujos en masa similares y presiones similares.

La potencia de eje puede ser determinada de un balance de energía, sabiendo que el trabajo efectuado sobre el sistema es igual al calor disipado más el cambio entálpico del fluido.

$$\dot{W}_s = m(\dot{h}_s - \dot{h}_e) + Q$$

En situaciones no críticas es seguro suponer que el compresor es adiabático. El cálculo adiabático siempre da una sobrestimación de las necesidades de potencia, siempre y cuando se pierda calor y no se agregue. Para la mayoría de las situaciones normales una eficiencia aproximada de 70 % es buena.

Entonces la potencia de eje efectuada sobre el fluido es

$$P = \epsilon_i \cdot \dot{W}_s$$

Para la compresión de dióxido de etileno que se encuentra en la corriente 11 como gas a 28°C hasta líquido en la corriente 12 a 28 ° C, el cambio entálpico es

$$h_s - h_e = 25527 \text{ J/mol}$$

Se esperan evacuar 62.4538 Kg de óxido de etileno en 45 minutos por la corrientes 11 y 12, por tanto se deben retirar 0.02313 Kg por segundo.

La potencia de eje es: $\dot{W}_s = 0.02313 \text{ (Kg/s)} * 58.015 \text{ KJ/Kg} = 1.3418 \text{ KJ/s}$

La potencia efectuada sobre el fluido es: $P = 1.3418 \text{ (KJ/s)} * 0.7 = 0.939 \text{ KW}$

De la figura 5 -30 (Ulrich) se estima el costo del compresor como función de la potencia de fluido (P) sin incluir los costos del impulsor.

Para una potencia de 1 KW el costo de compra (Cp) es \$ 5000 dolares. El costo de compra del impulsor es determinado de la figura 5-20 con una potencia de eje de 1.3 KW y 60 rpm, obteniéndose un valor de \$ 200 dolares, incluyendo el factor de corrección que depende de su uso (Fbm), para uso en compresores es de 1.5, por tanto, el valor final del impulsor es \$300 dolares.

Para el valor total de compra del compresor es necesario, al precio de compra (Cp) incluirle el precio del impulsor y el factor de corrección que depende del material de construcción; para compresores centrífugos de acero al carbón Fbm es 2.5.

El costo de compra final del compresor es.

$$C_{pf} = 5000 \cdot 2.5 + 300$$

$$C_{pf} = \$ 12800 \text{ dolares}$$

Intercambiadores de calor

Datos necesarios para su especificación:

Carga de calor, Consumo de combustible, Temperatura de entrada, Temperatura de salida, Presión de entrada, Coeficiente de transferencia de calor.

Los intercambiadores de calor son importantes e imprescindibles en la industria de los procesos químicos, ya que son instrumentos fundamentales para la conservación y transferencia de energía. El intercambio de calor no es sólo una operación unitarias principal en aislamiento, sino un elemento importante en muchas otras operaciones. Aun cuando las aplicaciones y los trabajos son muy numerosos, los tipos de intercambiadores de calor son limitados y muy estándar, lo que permite una fácil caracterización y descripción.

El área del intercambiador se determina utilizando la ecuación simple de transferencia de calor:

$$Q = U A \Delta T_m$$

Donde Q puede calcularse del balance de energía. ΔT_m es comúnmente determinada como la media logarítmica de las temperaturas de los fluidos de proceso y servicio; para tomar esta suposición se debe cumplir que:

- El sistema se encuentre en régimen permanente.
- El coeficiente global de transferencia de calor debe ser constante a través de todo el intercambiador.
- No debe haber cambio de fase.

Los pasos de diseño preliminar de los intercambiadores incluyen la selección, especificación del trabajo, el cálculo de la diferencial de temperaturas que actúa como fuerza impulsora, la evaluación del coeficiente global de transferencia de calor, el cálculo del área de transferencia de calor y la identificación de los materiales de construcción.

1. Selección del tipo de intercambiador

Se seleccionaron tubos en U ya que estos tienen una excelente resistencia al choque térmico creado por cambios súbitos de temperatura, a causa de que están libres para su expansión y contracción. Además de que el conjunto completo de tubos puede retirarse para lavarlo. Los intercambiadores de tubos en forma de U son baratos pero la sección doblada de tubo es difícil de limpiar.

Aplicaciones específicas:

Condensación: Se utiliza para condensar líquidos en el lado de la coraza, de manera que las películas de líquido no sean demasiado grandes y reduzcan la eficiencia. Cuando se desea subenfriamiento

del líquido, se orienta el intercambiador de coraza y tubos verticalmente.

Enfriamiento: Implica la descarga de calor sensible de un fluido de proceso a los alrededores naturales, comúnmente se emplea agua fría y más recientemente se han vuelto populares los enfriadores de aire.

Calentamiento: Implica la adición de calor sensible al líquido, este calor es proporcionado por la condensación de vapor.

De la tabla 4-13 (Ulrich) se tienen los siguientes datos para diseño preliminar.

	Condensador	Enfriador	Calentador
Presión (bar)			
Coraza	0.1	0.2-0.6	0.2-0.6
Tubo	0.1	0.2-0.6	0.2-0.6
ΔT (°C)	10-50	5-50	10-50
Corriente de proceso			
Entrada	<500	<150	<500
Salida	\approx Tentrada	<Tentrada	>Tentrada
Corriente de servicio			
Entrada	30	30	Varios
Salida	45	45	Varios

2. Especificaciones de carga

La determinación de la carga de un intercambiador es una aplicación directa de información del diagrama de flujo. El balance de energía

generalmente es simple. Aplicando el estado estacionario y a una de las corrientes y sin incluir trabajo.

$$Q = m(h_2 - h_1)$$

3. Determinación de la fuerza impulsora de la temperatura

Considerando que se cumple lo antes establecido para el uso de la media logarítmica.

$$\Delta T_m = \frac{\Delta T_h - \Delta T_c}{\ln\left(\frac{\Delta T_h}{\Delta T_c}\right)}$$

ΔT_c : Terminal fría

ΔT_h : Terminal caliente

4. Coeficientes globales de transferencia de calor

En las evaluaciones de prediseño, en donde los valores aproximados son más que válidos, se evita el cálculo de los coeficiente de transferencia de calor. Considerando las incertidumbre que causa la incrustación, los coeficientes basados en la experiencia son adecuados aun para muchos de los diseños finales. En la tabla 4-15 (Ulrich) aparecen los valores tomados de Perry en unidades internacionales.

De la tabla 4-15 (Ulrich) se tiene que para disolventes orgánicos del lado de la coraza y agua por los tubos, el coeficiente global de transferencia de calor (U) está en un rango de 280-850 J/m²sK, para efectos de diseño del intercambiador de máximo costo se escoge:

$$U = 280 \text{ J/m}^2 \text{ s K}$$

5. Calculo del área de transferencia de calor

$$A = \frac{Q}{U\Delta T_m} \quad (\text{Ec 4-72 Ulrich})$$

6. Materiales de construcción

De la tabla 4-28 (Ulrich) es posible hacer una selección preliminar del material de construcción en función del tipo de sustancias de proceso y la corrosión que estas conllevan en el equipo:

Para disolventes y líquidos como glicoles, alcoholes y agua y para gases como el óxido de etileno el acero al carbón no presenta limitaciones.

	Q(KJ/s)	ΔT_m	A (m ²)
Condensador	1.7258 E 3	65.85	93.6
Enfriador	4.774 E 1	30.815	5.533
Calentador	6.6337 E 2	136.259	76.88

El costo se determina a partir de la figura 5-36 (Ulrich) en función del área del intercambiador.

	Costo de compra (\$ dolares)
Condensador	9000
Enfriador	2500
Calentador	8000

Centrífuga

Datos necesarios para su especificación:

Temperatura de entrada, Presión de entrada, Concentración de entrada y salida, Consumo de electricidad, Flujo o capacidad.

Para la separación del catalizador, se escogió un separador centrífugo de transporte helicoidal que asegura una separación total de los sólidos de tamaños superiores a $0.1 \mu\text{m}$ de diámetro; posee una gran eficiencia, el porcentaje de sólidos en la torta es de 50 a 80 % y el porcentaje en peso de los sólidos en la alimentación puede estar entre 0 y 60 %. El consumo de potencia es alto y su costo de compra depende de la velocidad de alimentación de los sólidos secos y el material de construcción. El costo se puede estimar a partir de la gráfica 5-4 (Ulrich), donde también se encuentran los factores de corrección para el tipo de material.

$$C_{bm} = C_p * F_{bm}$$

La velocidad de alimentación de sólidos se obtiene multiplicando la corriente de sólido del reactor por la fracción de sólidos.

$$m_s(\text{Kg/s}) = 0.065 \text{ Kg/s}$$

$$C_p = \$ 15000$$

$$\text{Para acero al carbón } F_{bm} = 2$$

El costo de compra de la centrífuga es:

$$C_{bm} = 15000 * 2 = \$ 30000 \text{ dolares.}$$

Recipiente de proceso (flash)

Datos necesarios para su especificación:

Temperatura de entrada y salida, Presión de entrada y salida, Concentración de entrada y salida, Carga de calor, Consumo de electricidad, Flujo o capacidad.

La expansión isotérmica o flash se debe realizar en un recipiente de proceso de orientación vertical. Se tomará un recipiente de 1 m de diámetro una relación diámetro altura de 4. Como la torre opera a presión atmosférica, no

hay necesidad de hacer correcciones debido al material ni a la presión, el material seleccionado es acero al carbón.

El costo del recipiente es \$ 165000 dólares (altura 4 m y diámetro 1 m)

Reactor

Datos necesarios para su especificación:

Temperatura de salida, Presión de salida, Carga de calor, Temperatura de entrada, Presión de entrada, Concentración de entrada y salida, Capacidad.

Para el diseño del reactor es necesario seguir los siguientes pasos:

1. Definición de las condiciones terminales
2. Definición de los datos cinéticos
3. Análisis de equilibrio
4. Selección del reactor
5. Balance de energía
6. Determinación del tamaño del reactor
7. Calculo de la caída de presión
8. Reevaluación
9. Evaluación económica

El reactor debe ser cilíndrico, ya que no se puede obtener el volumen de reacción a través del diseño del mismo porque no se cuenta con la cinética, entonces se ha estimado a partir de las sustancias que se cargan y del etileno gaseoso con el que se presuriza, el volumen ocupado es de 14 m^3 de etileno y 3 m^3 de las demás sustancias, por lo que se necesitaría un reactor de 17 m^3 .

Diámetro de reactor 2.5 m

Longitud del reactor 3.5 m

Para estimar el costo, se tiene que la presión de operación es de 59 atm y la temperatura de 0°C. Si se usa acero al carbón, norma ASTM A387 grado 22 case 2 ¼ (Cr-Mo) para resistencia al peróxido de hidrógeno.

Presión de diseño = $59 \times 1.2 \times 14.7 = 1040.76$ psig

Temperatura de diseño = 28 °C, temperatura ambiente.

El esfuerzo que puede aguantar este acero al carbón a 28 °C es de 13100 psi (tabla B2, Chemical Reactor Design for Process Plants, Vol 2. Rose, Howard) $S = 13100$ psi.

E, el coeficiente de unión es de 1.

La corrosión mínima permitida es de 1/8 in.

Con estos datos, podemos determinar el espesor de la pared del reactor a partir de:

$$t = \frac{PR}{SE - 0.6P} \quad (\text{Tabla B.1 Page 189 para } P < 0.385SE \text{ y } t < R/2)$$

P = Presión en psig

R = Radio en pies

S = Esfuerzo que puede aguantar el acero el carbón por área

$$t = 0.342 \text{ pie} = 4.1 \text{ pulgadas}$$

Incluyendo corrosión el espesor es $t = 4.225$ pulgadas

Peso total del cilindro, si la densidad del acero al carbón es de 490 lb/ft³

$$\text{Cilindro: } \pi * 8.2 * \frac{4.225}{12} * 11.483 * 490$$

Peso cilindro: 51034.2 lb

Si la tapa inferior y superior se diseñan elípticas, se puede usar la ecuación de la tabla B.3 (Page 196)

Cabeza: Capacidad, dada en unidades de longitud al cubo: $\frac{\pi D^3}{24}$

Entonces tenemos:

$$\frac{490 * \pi \left[\frac{4.225}{12} + 8.29 * 1.23 \right]^2 \left(\frac{4.225}{12} \right) * 2}{4} = 29525.88 \text{ lb}$$

El peso total es = $51034.12 + 29525.88 = 80560 \text{ lb}$

Si tenemos que el costo del acero al carbón es de 12000 pesos por kilo, el costo total del reactor sería de \$ 483'360.000 pesos

Tanques de almacenamiento

Datos necesarios para su especificación:

Temperatura de entrada, Presión de entrada, Capacidad

Tanque de presión atmosférica:

Los tanques grandes de almacenamiento a presión atmosférica se emplean universalmente para mantener la materia prima para su procesamiento o para los productos que esperan su embarque. En la mayoría de los procesos modernos no puede enviarse los vapores hacia la atmósfera para lo cual se emplean sistemas de ventilación interna o un techo flotante. Estos tanques generalmente son cilindros grandes, hasta de 15 m de altura y más de 30 m de diámetro con techos en forma de cono.

Para asegurar una operación ininterrumpida el diseñador proporciona generalmente una capacidad de aproximadamente 30 días de almacenamiento para las materias primas y los productos manufacturados.

De la tabla 4-27 (Ulrich) se obtienen los valores máximos típicos para recipientes:

Volumen (m ³)	100000
Altura (m)	15
Diámetro (m)	90
Tiempo de Almacenamiento	30 días

Para un volumen máximo de almacenaje de producto es 60 m³ para 30 días, el costo del recipiente con techo cónico es: $C_{bm} = C_p * F_{bm}$

F_{bm} es 1.9 para acero inoxidable

El costo de compra es : $C_{bm} = 5000 * 1.9 = \$ 9500$ dolares

Para almacenaje de reactivo se dispone de un tanque de igual capacidad y por tanto igual precio y un tanque de 20 m³ cuyo precio es de \$ 5700 dolares.

Tanques de alta presión:

En muchas situaciones, el almacenamiento a baja presión no resulta práctico no deseable. En los tanques esféricos o con forma de bala se puede acomodar grandes presiones ya que tienen paredes más gruesas. Consideraciones prácticas y económicas limitan el tamaño de estas unidades muy por debajo de los tanque de presión atmosférica. Con los gases, la densidad aumenta para proporcionar una capacidad mayor de almacenamiento a presión elevada. Los tanques cilíndricos con extremos redondeados son menos costosas y por conveniencia de acceso generalmente están orientados con el eje horizontal.

Para determinar el costo de los recipientes de alta presión es necesario determinar el volumen de almacenaje ya que en la figura 5-61 (Ulrich) el costo de compra es función del volumen, la presión y la forma.

En el recipiente se almacenaran 43307.985 mol de óxido de etileno a una presión manométrica de 17 bar en un recipiente de bala.

El volumen es entonces:

$$V = \frac{nRT}{P} = \frac{43307.985(\text{mol}) * 8.314(\text{J/molK}) * (28 + 273)\text{K}}{1801325}$$

$$V = 60 \text{ m}^3$$

De la tabla 5-61 (Ulrich) el costo del recipiente es : $C_{bm} = C_p * F_{bm}$

$$C_{bm} = 11000 * 2.1 = \$ 23100 \text{ dolares}$$

Tolvas:

Recipiente orientado verticalmente con una sección transversal comúnmente cuadrada y tiene la base en forma de cono invertido para la descarga de los sólidos por gravedad.

El catalizador se depositará sobre una tolva que para volúmenes de almacenaje menores a 80 m^3 tiene un costo de compra incluyendo el factor del material (2.1) para acero inoxidable menor de \$ 1000 dólares.

Mezclador sin movimiento

Datos necesarios para su especificación:

Consumo de energía, Carga de calor, Temperatura de entrada, Presión de entrada, Concentración de entrada y salida.

Los mezcladores sin movimiento son dispositivos ingeniosos de tuberías que pueden subdividir y volver a cambiar los filamentos de líquido viscoso,

suspensiones o pastas. El mezclador es una serie de aspas de metal o elementos similares insertados dentro de una sección de tubería. La caída de presión típica de un mezclador sin movimiento se encuentra alrededor de 0.01 bar, para la mayoría de los líquidos.

A causa del capital, mantenimiento y costo de operación bajos se han vuelto muy populares en otra clase de aplicaciones.

De la tabla 4-16 se obtiene que para mezcladores sin movimiento los criterios y datos para el diseño preliminar son:

Intervalo de tamaños del equipo:

Diámetro del recipiente (m) 0.003-2

Longitud o altura del recipiente (m) 0.03-80

Flujo del fluido mezclado (Kg/s)

Gases 0.001-100

Líquidos 0.01-1000

Tiempo típico de residencia (s) 0.02-5

Intervalo de viscosidades (Pa s) 0 – 1000

Adecuada para suspensión líquido – líquido

Consumo de potencia: líquido - sólido 0.001m – 0.04

Incluyen la eficiencia

Para una tubería de 2.5 in se selecciono un mezclador de igual diámetro.

De la figura 5-41 (Ulrich) se determinan el costo de compra en función del diámetro y con un factor de 1.5 para acero al carbón.

El costo de compra es $C_{bm} = \$600 * 1.5 = \$ 900$ dolares

MÁQUINAS	CANTIDAD	VALOR UNITARIO (\$) COLOMBIANO	VALOR TOTAL (\$) COLOMBIANO
Mezclador	1	2.520.000	2.520.000
Bombas	5	Diferentes precios	15.540.000
Centrífuga	1	84.000.000	84.000.000
Reactor Batch	1	483.360.000	483.360.000
Tanques	5	Diferentes precios	136.640.000
Tanque de proceso (flash)	1	462.000.000	462.000.000
Compresor	1	35.840.000	35.840.000
Condensador	2	25.200.000	25.200.000
Caldera	1	403.200.000	403.200.000
Intercambiador	1	29.400.000	58.800.000
INVERSIÓN INICIAL EN MÁQUINAS			\$1707.100.000

✓ *Balance de personal:*

El costo de mano de obra constituye uno de los principales ítems de los costos de operación de la industria.

El estudio del proyecto requiere de la identificación y cuantificación del personal que se necesitará en la operación, para determinar el costo de remuneraciones por período.

CARGO	N° DE PUESTOS	VALOR UNITARIO (\$) COLOMBIANO	VALOR TOTAL (\$) COLOMBIANO
Obrero para la alimentación del catalizador	2	500.000	1'000.000
Obrero supervisor de alimentación del butanol y el etileno en el catalizador	1	700.000	700.00
Ingeniero para supervisión del reactor y demás unidades	1	1'200.000	1'200.000
Empleado jefe de operación	1	800.000	800.000
Obrero de lavado	4	350.000	1'800.000
Obreros de empaque	10	450.000	4'500.000
Técnico	1	700.000	700.000
Ingeniero de laboratorio	1	1'200.000	1'200.000
Ayudantes de laboratorio	2	400.000	800.000
Ingeniero de planta de aguas	1	1'200.000	1'200.000
Obreros bodegas	2	350.000	700.000
Celadores	4	380.000	1'520.000
Aseadoras	3	350.000	1'050.000
Administrador de empresas	1	850.000	850.000
Contador	1	900.000	900.000
Secretarias	5	600.000	3'000.000
Bibliotecario	1	420.000	420.000
Ayudantes de biblioteca	3	380.000	1'140.000
Gerente	1	2'000.000	2'000.000
Ingeniero jefe de producción	1	1'800.000	1'800.000
Gerente de ventas	1	1'500.000	1'500.000
TOTAL			\$28'780.000

✓ *Otros costos de fábrica:*

INSUMOS	UNIDAD DE MEDIDA	CANTIDAD	VALOR UNITARIO (\$) COLOMBIANO	VALOR TOTAL (\$) COLOMBIANO
Agua	M ³	7720.82	647.6	5.000.000
Pintura	Galones	20	25.000	500.000
Energía	Kw	----	----	10.000.000
Papel	Unidad	20	7800	156.000
Computadores	Unidad	10	2.800.000	28.000.000
Otros de oficina	Unidad	-----	5.000.000	5.000.000

✓ El estudio de la localización:

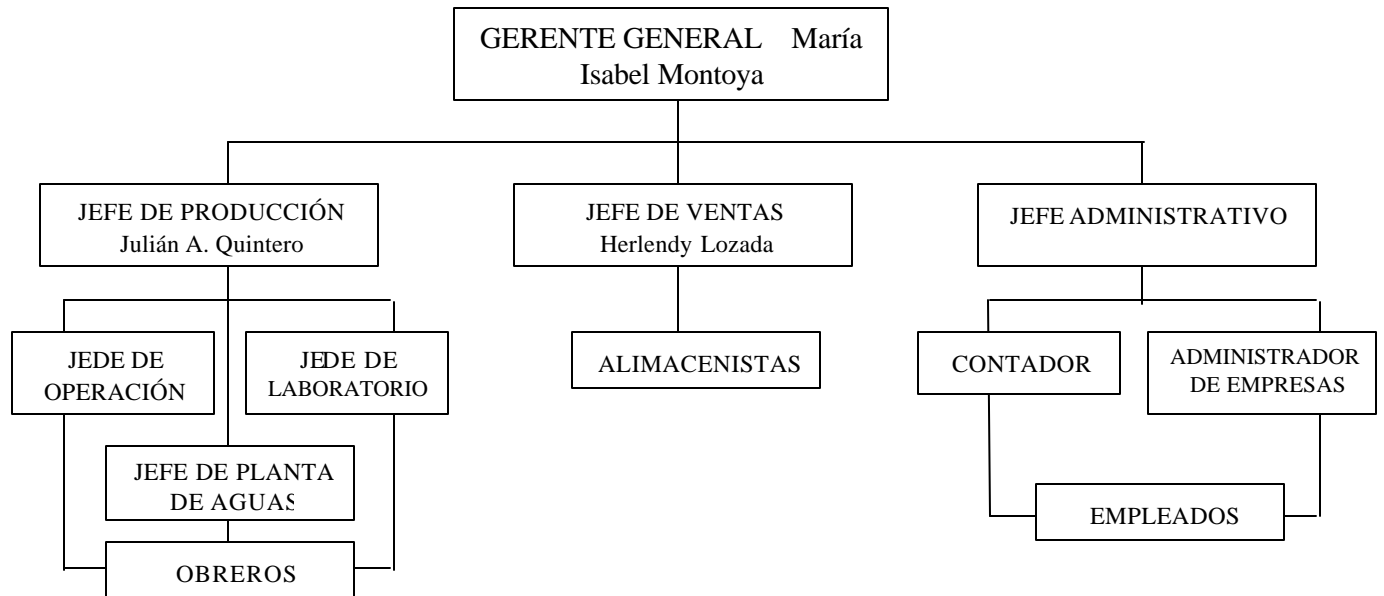
La localización tiene un efecto condicionador sobre la tecnología utilizada en el proyecto, tanto por las restricciones físicas que importa como por la variabilidad de los costos reoperación y capital de las distintas alternativas tecnológicas asociadas a cada ubicación posible.

Los factores que hay que tener en cuenta para la localización son los siguientes:

- Medios y costos de transporte.
- Disponibilidad y costo de mano de obra.
- Factores ambientales
- Cercanía del mercado.

Estos son los 4 factores por los cuales decidimos implantar la industria Cellosolventes en Cartagena, ya que necesitábamos un puerto y por la cercanía a la nueva refinería de producción del etileno, además está central a los otros dos proveedores (Cali y Bogotá).

3.3 ESTRUCTURA ORGANIZACIONAL



3.4 ESTUDIO FINANCIERO

PRECIOS DEL MONTO TOTAL DE LA EMPRESA \$ COLOMBIANO	
COSTO DE EQUIPOS	1707.100.000
MATERIAS PRIMAS	36.048.780.7
INVERSIÓN DE OBRAS FÍSICAS	658.400.000
BALANCE PERSONAL	28.780.000
OTROS COSTOS DE FABRICA	48.656.000
COSTO DEL MONTO DE LA FABRICA	2478.984.780.7

✓ INVERSIONISTAS:

INVERSIONISTAS	CAPITAL \$ COLOMBIANO
MARIA ISABEL MOONTOYA	500.000.000
JULIAN ANDRES QUINTERO	450.000.000
HERLEMDY LOZADA S.	400.000.000
ACCIONISTAS (50%)	1240.000.000
TOTAL	\$2590.000.000

2.11 BALANCES DE ENERGÍA

Unidad:	Mezclador 1	Mezclador 2	Reactor	Centrífuga	Flash	Destilación
NVI						
Flujos	6	3	14	14	10	10
Vel.rxn	-	-	2			3
T,Q,w	3+1	3+1	5+1+1	3+1		3+1
NB						
Materia	3	1	8	7	5	4
Energia	1	1	1	1	1	1
Especif.						
Conversión	-	-	2	-	-	-
Relacion	-	-	2	-	-	-
Temperat.	3	3	5	3	3	3
Q,W	-	1	1	1	1	1
composición	2	-	3	-	-	3
Grados de libertad	1	1	2	6	0	5

EQUIPOS	FLUIDO DE SERVICIO (KG/S)	Q̇ (KJ/S)
Condensador	7.6468	$1.7258 \cdot 10^3$
Enfriador	0.2115	$4.774 \cdot 10^1$
calentador	34.7142	$6.634 \cdot 10^2$

BIBLIOGRAFÍA

Operaciones Unitarias en Ingeniería Química, Waren L. McCabe, cuarta edición.

Chemical reactor Design for Process Plants, Vol II, Rase Howard F.

Process Principles Design, Seader y Seider

Lange, Manual de Química, John A. Dean

Diseño y Economía de los Procesos de Ingeniería Química, Ulrich

Solvents Recovery Handbook

Enciclopedia. Ullmann. Volúmenes 4,9 y 11.

Index Merck, Fichas de seguridad según DIN

Balances de Materia y energía. G.V. Reklaitis.

Preparacion y evaluacion de Proyectos. Sapag. CH Nassir, segunda edición.

Patentes:

- Octubre 25 de 1999, US.Class 568/619, número 403590
- Mayo 23 de 1989, US Class 549/531, número 4833260

PCPLV, Programa diseñado en la Universidad del Atlántico para el cálculo del equilibrio líquido vapor.

The Properties of Gases and Liquids, Praunitz

Páginas Web:

www.nist.gov/srd/onlinelist.htm

www.dowchemical.com

www.ekachemicals.com

www.chemicalmarketreporter.com

www.quimicadelta.com.mx

<http://webbook.nist.org>

<http://ceh.sric.sri.com>

CONCLUSIONES

El planteamiento preliminar de un proceso además de los muchos conceptos que abarca, tanto nuevos como ya conocidos, pero que se nos hace necesario recordar, implica la revisión completa y extensa de la bibliografía ampliando nuestra fuentes de información pero también se hace necesario determinar de lo mucho que se recolecta lo que realmente es útil para el proceso y para continuar en el transcurso de su desarrollo sin llegar a estancarse.

Conocer los criterios y aspectos económicos, de diseño, de comercio, de finanzas, que se deben tener en cuenta para el montaje de una industria, ya que todos estos se encuentran relacionados entre si y es imposible trabajarlos independientemente.

En el análisis de costos para el diseño de las unidades se deben tener en cuenta diversos parámetros, como lo son el tipo de material, las condiciones de operación, las propiedades de las sustancias, ya que la elección incorrecta de algo puede elevar enormemente, tanto el costo inicial como el de operación de la planta.

ANEXO 1

```
%Propiedades de las diferentes sustancias como liquidos
%P=[ sigma1 sigma2 Hfo(J/mol) Sfo(J/mol*K) Gfo(J/mol)
Tb(K) Hvnormal(J/mol)], fila: 1 etileno,
%2 H2O2,3 oxido de etileno, 4 H2O, 5 butanol, 6
butilglicol
%sigma1 es el coeficiente estequiométrico para la rxn 1 y
sigma2 para la rxn 2
function[P,Cp]=propiedades
P=[-1 0 43980 117.8 78579.8 169 1544;-1 0 -187903.5
109.69416 -120496.1 424.35 44087.004;1 -1 -95700 149.45 -
140258.51 285 25527;1 0 -285830 69.95 -237337 373.15
40683.1356;0 -1 -328000 225.73 -162615 390.6 43290;0 1 -
508210 111 -264838 444.2 43475];
%Capacidades calorificas de líquidos (J/mol*K),Cp° = A +
B*T + C*T2 + D*T3 + ET4
Cp=[3.44364 1.0842 -7.13595e-3 1.65631e-5 ;89.17884 0 0 0
;7.41259 7.42687e-1 -2.7132e-3 3.90092e-6 ;18.2964
0.472118 1.33878e-3 1.31424e-6;-5.10376e-1 1.44697 -
3.83339e-3 4.28849e-6;234.042 0 0 0];

%1 Reacción
%CH2=CH2 + H2O2 = CH2CH2O + H2O
%CALCULO DEL DELTA H DE RXN
function [t,Hrxn1]=deltaHrxn1
[P]=propiedades;
for i=1:6
    vjxhof(i)=P(i,1)*P(i,3);
end
horxn=sum(vjxhof);
To=298.15;
%corrección del calor de reacción a otras temperaturas
[P,Cp]=propiedades;
for i=1:6
    a(i)=P(i,1)*Cp(i,1);
    b(i)=P(i,1)*Cp(i,2);
    c(i)=P(i,1)*Cp(i,3);
    d(i)=P(i,1)*Cp(i,4);
end
t=[200:5:600];
for j=1:length(t)
    dela(j)=sum(a)*(t(j)-To);
    delb(j)=sum(b)*(t(j)^2-To^2)/2;
    delc(j)=sum(c)*(t(j)^3-To^3)/3;
    deld(j)=sum(d)*(t(j)^4-To^4)/4;
    Hrxn1(j)=horxn+dela(j)+delb(j)+delc(j)+deld(j);
end
```

```

End

%2 Reacción
%CH2-CH2O + CH3CH2CH2CH2OH = HOCH2CH2OCH2CH2CH2CH3
%CALCULO DEL DELTA H DE RXN
function [t,Hrxn2]=deltaHrxn2
[P]=propiedades;
for i=1:6
    vjxhof(i)=P(i,2)*P(i,3);
end
horxn=sum(vjxhof);
To=298.15;
%corrección del calor de reacción a otras temperaturas
[P,Cp]=propiedades;
for i=1:6
    a(i)=P(i,2)*Cp(i,1);
    b(i)=P(i,2)*Cp(i,2);
    c(i)=P(i,2)*Cp(i,3);
    d(i)=P(i,2)*Cp(i,4);
end
t=[200:5:600];
for j=1:length(t)
    dela(j)=sum(a)*(t(j)-To);
    delb(j)=sum(b)*(t(j)^2-To^2)/2;
    delc(j)=sum(c)*(t(j)^3-To^3)/3;
    deld(j)=sum(d)*(t(j)^4-To^4)/4;
    Hrxn2(j)=horxn+dela(j)+delb(j)+delc(j)+deld(j);
end

%CALCULO DE LA ENERGIA LIBRE DE GIBBS A DIVERSAS
TEMPERATURAS
%1 Reacción
%CH2=CH2 + H2O2 = CH2CH2O + H2O
function [grxn1,t]=gibbs1;
R=8.314;%(J/mol*K)
t=[200:5:600];
[Ke]=Kel;
for i=1:length(t)
    grxn1(i)=-log(Ke(i))*R*t(i);
end

%CALCULO DE LA ENERGIA LIBRE DE GIBBS A DIVERSAS
TEMPERATURAS
%2 Reacción
%CH2-CH2O + CH3CH2CH2CH2OH = HOCH2CH2OCH2CH2CH2CH3
function [grxn2,t]=gibbs2;
R=8.314;%(J/mol*K)
t=[200:5:600];

```

```

[Ke]=Ke2;
for i=1:length(t)
    grxn2(i)=-log(Ke(i))*R*t(i);
end

%1 Reacción
%CH2=CH2 + H2O2 = CH2CH2O + H2O
%CALCULO DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO
function [Ke,tt,lnKe1]=Ke1
To=298.15;
R=8.314; %(J/mol*K)
for i=1:6
    [P]=propiedades;
    vjxgof(i)=P(i,1)*P(i,5);
end
Gorxn=sum(vjxgof);
Keo=exp(-Gorxn/(R*To));
[t,Hrxn1]=deltaHrxn1;
for i=1:length(t)
    Ke(i)=Keo*exp(-Hrxn1(i)*(1/t(i)-1/To)/R);
    tt(i)=1/t(i);
end
lnKe1=log(Ke);

%2 Reacción
%CH2-CH2O + CH3CH2CH2CH2OH = HOCH2CH2OCH2CH2CH2CH3
%CALCULO DE LA CONSTANTE DE EQUILIBRIO
function [Ke,tt,lnKe2]=Ke2
To=298.15;
R=8.314; %(J/mol*K)
for i=1:6
    [P]=propiedades;
    vjxgof(i)=P(i,2)*P(i,5);
end
Gorxn=sum(vjxgof);
Keo=exp(-Gorxn/(R*To));
[t,Hrxn2]=deltaHrxn2;
for i=1:length(t)
    [t,Hrxn2]=deltaHrxn2;
    Ke(i)=Keo*exp(-Hrxn2(i)*(1/t(i)-1/To)/R);
    tt(i)=1/t(i);
end
lnKe2=log(Ke);

```

```

%Programa general para el calculo de Hrxn,Grxn y Ke para
las reacciones de
%oxidación del etileno y la alcoxilación del óxido de
etileno con butanol
[t,Hrxn2]=deltaHrxn2;
[t,Hrxn1]=deltaHrxn1;
figure(1);
plot(t,Hrxn2,'-.',t,Hrxn1,'-');
title('Hrxn vs T ');
xlabel('Temperatura en K');
ylabel('Hrxn (J/mol)')

[Ke,tt,lnKe1]=Ke1;
[Ke,tt,lnKe2]=Ke2;
figure(2);
plot(tt,lnKe1,'-',tt,lnKe2,'-.');
title('Constante de equilibrio vs 1/T ');
xlabel('Inv. Temperatura en K');
ylabel('ln(Ke)');

[grxn1,t]=gibbs1;
[grxn2,t]=gibbs2;
figure(3);
plot(t,grxn1,'-',t,grxn2,'-.');
title('Energia de Gibbs de reacción vs T ');
xlabel('Temperatura en K');
ylabel('Grxn (J/mol)');

```