

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

ESCOLA POLITÈCNICA SUPERIOR D'ALCOI



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA

CAMPUS D'ALCOI

# Diseño de un proceso de producción de ácido acrílico, vía acroleína

Memoria presentada por:

José Luis Catalá Masanet

Grado en Ingeniería Química

Tutores: Salvador C. Cardona Navarrete y Jaime Lora García

Convocatoria de julio de 2020

# Resumen

En este proyecto se ha diseñado un proceso completo de producción de ácido acrílico por la vía de la acroleína. Este diseño incluye condiciones de operación y dimensiones básicas de los equipos. Tras una revisión bibliográfica se han definido las etapas y equipos básicos de los cuales consta el proceso. Una vez definido el diagrama del proceso global, se han optimizado económicamente las dimensiones de equipos y condiciones de operación de la etapa de reacción, haciendo uso del simulador ProMax. Después, se han dimensionado los equipos de las etapas de separación posteriores, completando el diseño del proceso. Finalmente, se ha realizado un estudio económico del proceso completo y analizado la rentabilidad.

Palabras clave: Ácido acrílico, Optimización económica, ProMax

# Resum

En aquest treball s'ha dissenyat un procés de producció d'àcid acrílic, per la via de l'acroleïna. El disseny inclou condicions d'operació i dimensions bàsiques dels equips. Després d'una revisió bibliogràfica, s'han definit les etapes i equipaments bàsics dels quals consta el procés. Un cop definit el diagrama del procés global, s'ha optimitzat les dimensions dels equips i les condicions d'operació per tal de maximitzar el benefici econòmic. Posteriorment, s'han dimensionat els equips de les etapes de separació, aconseguint un disseny complet del procés. Finalment, s'ha realitzat un estudi econòmic del procés i l'anàlisi de la rendibilitat.

Paraules clau: Àcid acrílic, Optimització econòmica, ProMax

# Abstract

In this Project an Acrylic Acid process has been designed, via acrolein. The design includes operational conditions and basic dimensions of each piece of equipment. After a bibliographic research, the required equipment and stages of this design have been established. Once the Process Block Diagram is defined, an economic optimisation of the reactive stage has been performed by means of ProMax simulator. Then, required downstream equipment has been dimensioned, accomplishing a complete design of the process. Finally, the economics of the whole process have been analysed and a profitability analysis takes place.

Keywords: Acrylic Acid, Economic optimisation, ProMax

# Índice de contenidos

Resumen .....	2
Índice de contenidos .....	3
Índice de figuras .....	5
Índice de tablas .....	6
1. Introducción .....	7
1.1. Usos del ácido acrílico .....	7
1.2. Procesos de producción .....	8
1.3. La vía de la acroleína .....	8
1.4. Alternativas .....	9
1.4.1. Diseño inicial .....	9
1.4.2. Alternativas en la etapa de reacción .....	12
1.4.3. Alternativas en las etapas de separación .....	13
1.5. Simuladores de procesos .....	16
1.6. Optimización de procesos .....	17
2. Objetivos .....	18
2.1. Objetivo académico .....	18
2.2. Objetivo técnico .....	18
2.3. Metodología .....	18
3. Optimización del reactor .....	19
3.1. Caso base .....	19
3.1.1. Cinética .....	19
3.1.2. Condiciones de operación .....	20
3.2. Implementación del modelo en ProMax .....	23
3.3. Función objetivo .....	25
3.3.1. Valor de los productos .....	26
3.3.2. Coste de operación .....	27
3.3.3. Dimensionamiento de equipos .....	28
3.3.4. Coste de inversión .....	31
3.4. Variables de decisión y restricciones .....	34
3.5. Análisis del caso base y estudio de sensibilidad .....	35
3.6. Proceso de optimización .....	37

3.6.1.	Temperatura.....	38
3.6.2.	Volumen del Reactor .....	40
3.6.3.	Caudal molar de aire alimentado .....	42
3.6.4.	Caudal molar de vapor alimentado al reactor .....	44
3.7.	Resultados de la optimización .....	46
3.8.	Trabajo previo.....	50
4.	Diseño del tren de separación posterior .....	51
4.1.	Restricciones en el diseño de los equipos .....	51
4.2.	Dimensionamiento de los equipos .....	52
4.3.	Resultados del tren de separación .....	52
5.	Estudio económico completo .....	55
5.1.	Capital de inversión .....	55
5.2.	Costes de operación .....	59
5.2.1.	Costes variables .....	59
5.2.2.	Costes fijos .....	60
5.3.	Análisis de rentabilidad .....	61
6.	Conclusiones .....	62
	Bibliografía.....	63
	Anexos.....	65
	Anexo A. Ecuaciones para la estimación del coste de operación del tren de separación .....	65
	Anexo B. Fichas de Seguridad Química.....	66

# Índice de figuras

Figura 1. Estructura química del ácido acrílico (Fuente: PubChem) .....	7
Figura 2. Vías de producción de ácido acrílico (Fuente: Intratec Solutions, LLC.).....	8
Figura 3. Diagrama de flujo inicial. Etapa de reacción (Fuente: Turton, 1998).....	10
Figura 4. Diagrama de flujo del proceso híbrido extracción-destilación (Turton, 1998; Chien, Yu & Lee, 2017) .....	11
Figura 5. Diagrama de la alternativa de destilación secuencial (Fuente: Chien, Yu & Lee, 2017).....	13
Figura 6. Diagrama de proceso de la separación mediante destilación azeotrópica (Fuente: Suo et al., 2015).....	15
Figura 7. Ejemplo de un proceso simulado en ProMax (BR&E LLC., 2020).....	16
Figura 8. Diagrama del proceso diseñado completo .....	21
Figura 9. Diagrama de proceso de la etapa de reacción en el caso base (Fuente propia).....	22
Figura 10. Árbol de decisión del entorno termodinámico para simuladores de procesos. (Fuente: Martínez Sifuentes, 2000) .....	24
Figura 11. Diagrama de flujo de información en la optimización.....	26
Figura 12. Curva de transferencia de calor obtenida de ProMax. ....	28
Figura 13. Coste del reactor en el caso base en función del volumen de cada tanque ...	30
Figura 14. Impacto de la potencia en el coste de un compresor.....	31
Figura 15. Comparación entre CAPEX y OPEX.....	35
Figura 16. Desglose de los costes en el caso base.....	36
Figura 17. Análisis de la sensibilidad de la F.O. para cada variable de decisión.....	37
Figura 18. Selectividad relativa y conversión del propileno frente a la temperatura del reactor .....	38
Figura 19. Influencia de la temperatura en la F.O. y el valor de los productos.....	39
Figura 20. Influencia de la temperatura en los costes.....	39
Figura 21. Influencia de la temperatura en la concentración de oxígeno .....	40
Figura 22. Influencia de VR en la función objetivo .....	40
Figura 23. Influencia de VR en la conversión de propileno .....	41
Figura 24. Influencia de VR en los costes .....	41
Figura 25. Influencia de VR en la concentración de oxígeno .....	42
Figura 26. Influencia del caudal molar de aire en la F.O. y en la conversión de PP.....	43
Figura 27. Evolución de los costes frente a $F_{\text{aire}}$ .....	43
Figura 28. Influencia del caudal molar de aire en la concentración de oxígeno a la salida .....	44
Figura 29. Influencia del caudal molar de vapor entrante en la F.O. ....	45
Figura 30. Influencia del caudal molar de vapor en los costes de operación .....	45
Figura 31. Influencia del caudal molar de vapor en la concentración de oxígeno .....	46
Figura 32. Comparación de la mejora obtenida en la F.O. según variable de decisión..	47
Figura 33. Etapa de reacción en optimizada (Obtenido mediante ProMax).....	49
Figura 34. Diagrama de proceso del tren de separación diseñado.....	54
Figura 35. Esquema para la estimación del capital de inversión.....	55

# Índice de tablas

Tabla 1. Datos cinéticos de las reacciones irreversibles en fase gas (Turton, 1998).....	20
Tabla 2. Valores definidos para el caso base (Luyben, 2016).....	23
Tabla 3. Parámetros para la ecuación NRTL en este sistema (Chien, Yu, & Lee, 2017).....	24
Tabla 4. Valor de mercado de los productos. (Fuente: ICIS, 2020).....	26
Tabla 5. Costes energéticos .....	27
Tabla 6. Constantes para la curva de estimación de costes de adquisición en la etapa de reacción (Turton, 1998) .....	33
Tabla 7. Factores para la estimación del coste estimado de equipos (Fuente: Turton, 1998) .....	33
Tabla 8. Resultados del estudio económico en el caso base.....	35
Tabla 9. Resultados de la optimización sobre la F.O. ....	46
Tabla 10. Comparativa de resultados entre caso base y caso óptimo.....	48
Tabla 11. Resultado de la aplicación de algoritmos iterativos .....	50
Tabla 12. Especificaciones para los equipos del tren de separación (Chien, Yu, & Lee, 2017).....	51
Tabla 13. Constantes para la curva de estimación del coste de adquisición base en etapas downstream (Turton, 1998) .....	56
Tabla 14. Constantes para la curva de estimación del coste de adquisición en el tren de separación (Turton, 1998).....	56
Tabla 15. Factores de instalación utilizados en la estimación de costes (Fuente: Hand, 1958).....	58
Tabla 16. Cálculo de los costes de inversión de la planta completa.....	59
Tabla 17. Listado de costes variables .....	60
Tabla 18. Balance económico del proceso completo .....	61

# 1. Introducción

El ácido acrílico es un compuesto orgánico que, a temperatura ambiente, existe en forma de líquido incoloro y con olor agrio. Es el ácido carboxílico insaturado más simple (Figura 1). Es altamente soluble en agua y su vapor es más denso que el aire.

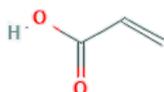


Figura 1. Estructura química del ácido acrílico (Fuente: PubChem)

Se trata de un material muy reactivo y polimeriza rápidamente si no se controla mediante inhibidores. Su temperatura de vaporización a presión atmosférica es de 141°C, por lo que es menos volátil que el agua. Puede formar mezclas explosivas en contacto con el aire a partir de 48,5°C (su punto de inflamabilidad a presión atmosférica).

Los consumidores no están expuestos al ácido acrílico a través de los productos (apartado 1.1), por lo que sólo supone un riesgo para la salud durante su producción y almacenamiento industrial. En este segundo caso, se debe minimizar el contacto directo y prestar atención a su almacenamiento, ya que es un compuesto corrosivo e inflamable.

En cuanto a la amenaza medioambiental, la producción industrial de este compuesto se lleva a cabo en sistemas cerrados. Su posible vertido al medio ambiente puede ocurrir generalmente a través de aguas residuales o gas exhausto de proceso. Este compuesto se biodegrada rápidamente en estaciones depuradoras de aguas residuales y supone un riesgo insignificante en cuanto a contaminación de suelos.

## 1.1. Usos del ácido acrílico

El ácido acrílico (AA) o ácido 2-propenoico es utilizado principalmente como intermediario en la producción de acrilatos, ésteres del AA (por ejemplo: acrilato de metilo, acrilato de etilo, acrilato de butilo y acrilato de 2-etilhexilo) y poliacrilatos. También se emplea como un comonomero con acrilamida en poliacrilamida aniónica y para producir hidroxiacrilatos. El AA y/o sus derivados pueden utilizarse en recubrimientos textiles o decorativos, de albañilería e industriales o adhesivos, entre otros. Además, los poliacrilatos se utilizan como espesantes, dispersantes, controladores de reología, detergentes, adhesivos, textiles y químicos para el tratamiento de aguas. (Speight, 2002)

A mediados de la década de 1980 surgieron dos nuevas aplicaciones: los polímeros superabsorbentes (SAP, por sus siglas en inglés) y los polímeros detergentes. Los SAP son poliacrilatos reticulados con la capacidad de absorber y retener más de 100 veces su propio peso en líquido. Actualmente se utilizan en ámbitos como la higiene íntima o

médica. Los SAP representan más del 30 % del consumo mundial de AA, principalmente a través del consumo de pañales. (ICIS.com, Acrylic Acid Uses and Market Data, 2008).

El volumen de producción anual de AA en la UE se estimó en aproximadamente 810.000 toneladas y su consumo intraeuropeo se estima en 830.000 toneladas anuales. (European Chemicals Agency, 2002)

En cuanto a las dimensiones de las plantas de producción de ácido acrílico, la compañía Air Liquide indica en la descripción de su tecnología para este proceso que un solo tren de reacción tiene una capacidad de producción de 160.000 Ton/año de ácido acrílico. En Rusia, Gazprom inauguró en 2017 una planta para la producción de 80.000 Ton/año de ácido acrílico de grado éster. En Texas (EE. UU.), el grupo Arkema gastó 90 M\$ en 2019 para reemplazar 2 reactores, cada uno con capacidad de 45.000 Ton/año.

## 1.2. Procesos de producción

Existen diferentes métodos de producción de AA. En la actualidad, el principal proceso utilizado para la producción del ácido acrílico es la oxidación parcial del propeno o propileno (Figura 2), por la vía de la acroleína. La mayor parte del propileno utilizado proviene del fraccionamiento del petróleo, lo que supone una fuente de propileno no renovable.

También existen otras vías de producción de AA a partir de compuestos orgánicos, como la carbonilación del óxido de etileno o la carboxilación del acetileno, aunque hoy no son competitivos a escala industrial. De la misma forma, se han desarrollado vías que utilizan fuentes renovables de materia prima, como la vía del glicerol o las rutas fermentativas a partir de glucosa y azúcar crudo, con rendimientos no competitivos.

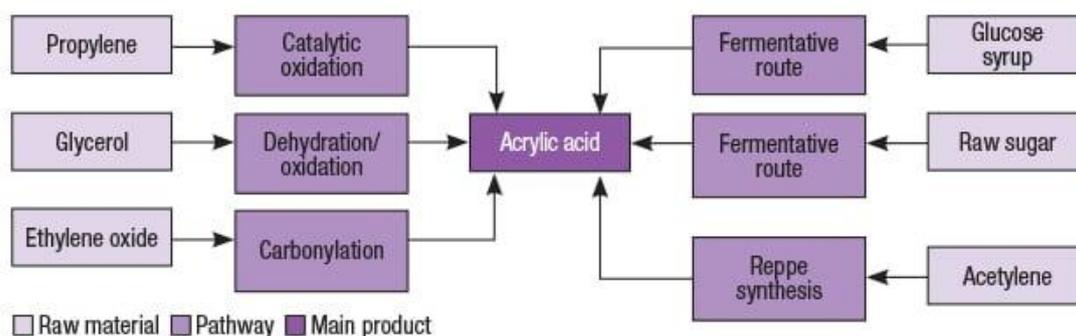


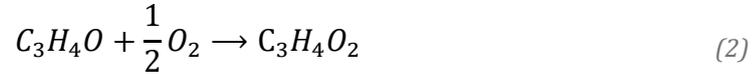
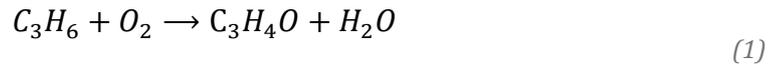
Figura 2. Vías de producción de ácido acrílico (Fuente: Intratec Solutions, LLC.)

A pesar de que se han realizado numerosas propuestas para la producción de ácido acrílico a partir de distintas fuentes de materia prima, la oxidación del propileno sigue siendo la mejor opción en cuanto a viabilidad económica.

## 1.3. La vía de la acroleína

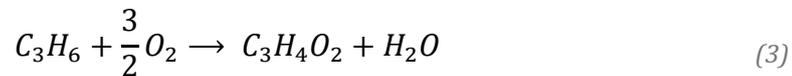
En la industria, la oxidación del propileno a ácido acrílico ocurre mediante dos reacciones en serie. Como se muestra en la reacción (1) se observa que el propileno se oxida

produciendo acroleína y agua. Después, de acuerdo con la reacción (2), la acroleína se oxida generando ácido acrílico.

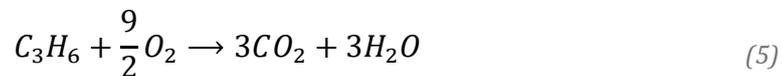
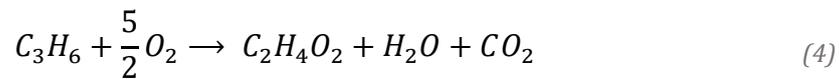


Para optimizar la conversión, la mayoría de los procesos industriales utilizan dos reactores en serie, utilizando en cada uno de ellos las condiciones de operación propicias para cada reacción. (Lin, 2001)

A nivel académico, la mayor parte de literatura simplifica el diseño de procesos de producción de ácido acrílico asumiendo una sola etapa como se muestra en la reacción (3), aunque esta simplificación reduce de manera significativa el rendimiento del proceso a nivel industrial. (Turton, 1998)



En este proceso ocurren dos oxidaciones paralelas, además de la principal, que generan subproductos: ácido acético, según la reacción (4), dióxido de carbono, en las reacciones (4) y (5), y agua, en todas las reacciones.



## 1.4. Alternativas

Turton (1998) presenta un proceso para la obtención de ácido acrílico a partir de la oxidación de propileno. Se pueden encontrar algunos estudios que proponen modificaciones basándose en este proceso tanto en lo referido al reactor, como en las etapas de purificación. En esta sección se ha comprobado que existen alternativas viables tanto en la etapa de reacción como en la etapa de separación. Además, la rentabilidad que ofrecen las distintas alternativas ha sido determinada y comparada con la propuesta inicial (1.4.1).

### 1.4.1. Diseño inicial

La mayor parte de la literatura encontrada sobre este proceso de producción del ácido acrílico se basa en el proceso descrito por Turton (1998). Por tanto, es necesario describir en qué consiste la propuesta inicial.

### Etapa de reacción

En este diseño inicial se utiliza un sólo reactor de lecho fluidizado isotermo que proporciona estabilidad durante la operación y simplifica el diseño. En este reactor se introducen la corriente de propileno y la de aire, que proporciona el oxígeno necesario.

Además, hay que tener en cuenta que se trata de una combustión (aunque controlada) de un combustible, siendo un proceso altamente exotérmico. En consecuencia, se introduce al reactor una corriente de vapor para amortiguar el aumento de temperatura provocado por el calor liberado en las reacciones. El diagrama de flujo para esta etapa del proceso se muestra en la Figura 3.

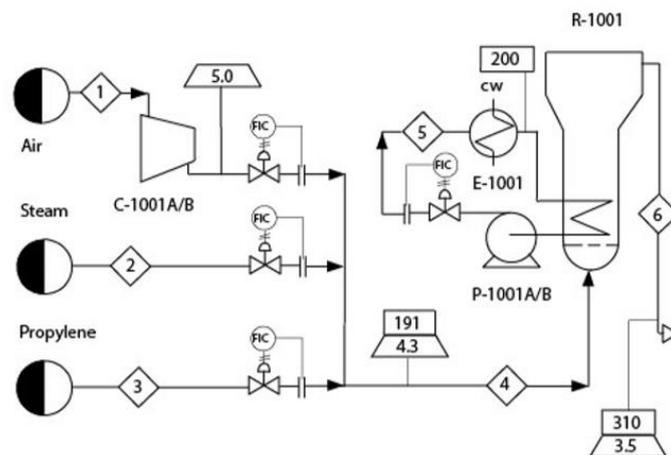


Figura 3. Diagrama de flujo inicial. Etapa de reacción (Fuente: Turton, 1998)

### Etapa de enfriamiento y absorción

Se representa el proceso completo en la Figura 4.

- La corriente saliente del reactor es refrigerada para evitar la dimerización del ácido acrílico y se separa en una unidad Flash. La corriente líquida resultante es, esencialmente, una disolución acuosa de ácido acrílico y ácido acético. La corriente gaseosa obtenida en la unidad Flash está formada por oxígeno, nitrógeno, dióxido de carbono y cierta cantidad de ácido acrílico y ácido acético.
- El siguiente equipo es una columna de absorción de gases. La corriente gaseosa entrante proviene de la unidad Flash. Se trata de absorber en una corriente de agua la fracción de ácidos contenidos en la corriente gaseosa. La corriente líquida saliente del absorbedor se mezcla con la fase líquida proveniente de la unidad Flash y se introduce en la columna de Extracción líquido-líquido (ELL).

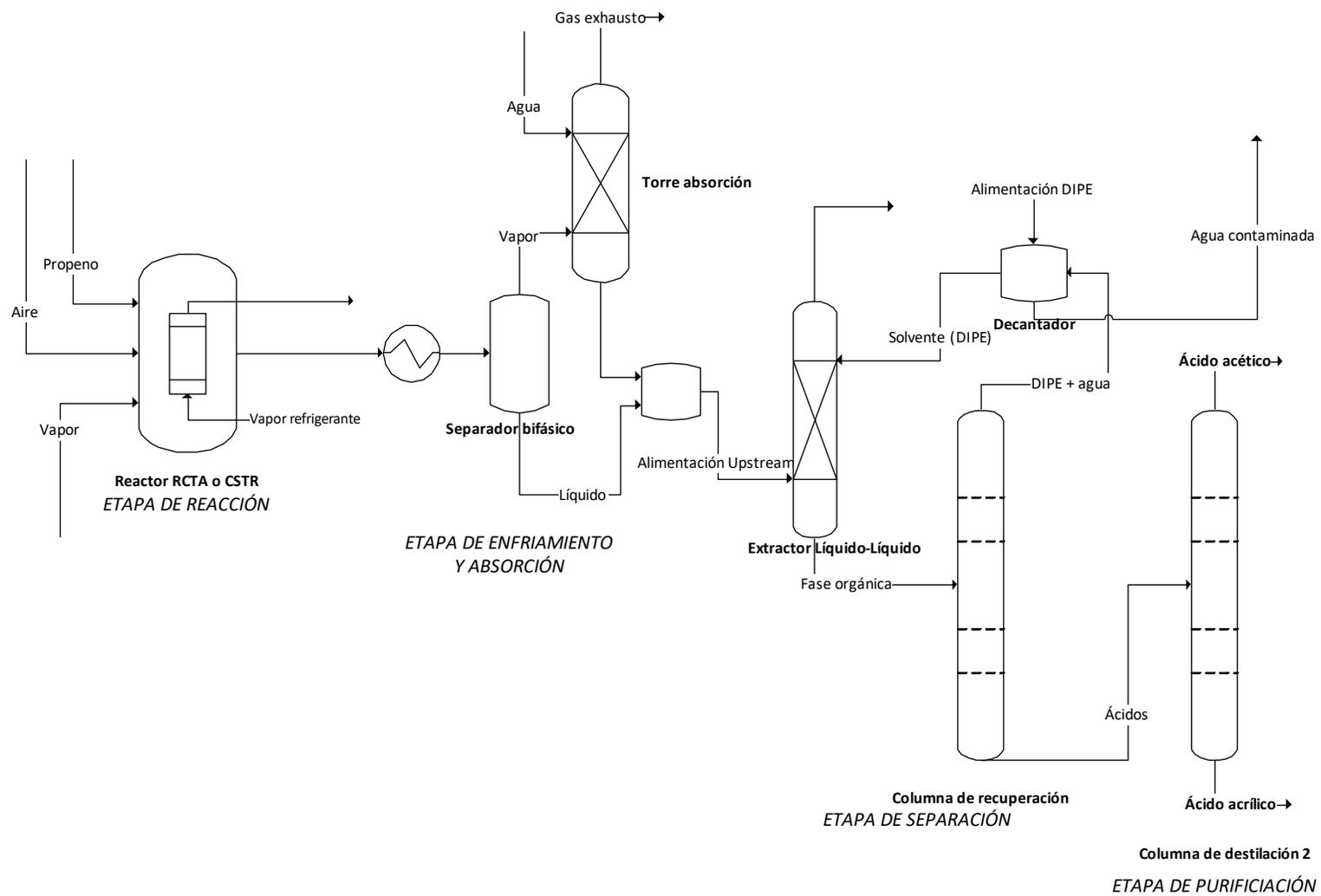


Figura 4. Diagrama de flujo del proceso híbrido extracción-destilación (Turton, 1998; Chien, Yu & Lee, 2017)

### Etapas de separación

El objetivo principal de las etapas de separación es separar los ácidos (acrílico y acético) de la gran cantidad de agua que contiene la corriente que sale de la etapa anterior.

- En la columna de ELL, se utiliza un solvente orgánico que debe ofrecer una alta solubilidad de ácido acrílico. Algunos autores sugieren el uso de Diisopropil éter (DIPE) para la separación de disoluciones acuosas de AA (Chien, Yu, & Lee, 2017). En este equipo se consigue disolver los ácidos en la fase orgánica, separándolos de la fase acuosa.

La fase orgánica saliente de la columna ELL (contiene los ácidos y cierta cantidad de agua) se conduce a una columna de recuperación donde el solvente (DIPE) y cierta cantidad de agua se obtienen en la cabeza de esta columna. La corriente de fondo de la columna de recuperación (contiene casi la totalidad de ambos ácidos) se introduce en la etapa de purificación.

### Etapa de purificación

En esta etapa se pretende separar los ácidos acrílico y acético en dos corrientes de pureza suficiente para su venta y uso.

Para ello, la corriente de fondo de la columna de recuperación se separa en una columna de destilación que contiene la mezcla de ácido acrílico y ácido acético. En esta columna se consigue la separación casi completa del ácido acrílico, que sale por el fondo de la columna y el ácido acético, que sale por la cabeza de la columna.

## **1.4.2. Alternativas en la etapa de reacción**

En el diseño inicial de Turton (1998), se describe el reactor como un lecho fluidizado isoterma, que actúa como un tanque agitado.

Una alternativa estudiada en la literatura del proceso plantea el uso de reactores tubulares tipo Flujo Pistón (RFP). Suo et al. (2015), sugiere utilizar 16.000 pequeños tubos de 10 m de longitud y un diámetro de 0.026 m para aumentar el área de intercambio de calor y poder facilitar la refrigeración y la controlabilidad del sistema.

Luyben (2016), analiza los reactores tubulares propuestos por Suo et al. En su estudio demuestra la excesiva sensibilidad del reactor tubular ante cambios en la temperatura del medio que incluso cuestionan la viabilidad del proceso en la práctica. Este fenómeno, conocido como “thermal runaway”, se refiere a la potencial pérdida del control ante ligeros cambios en variables del proceso en reactores no isoterma del tipo flujo pistón, donde ocurren reacciones altamente exotérmicas. Las consecuencias de dicho fenómeno pueden ser destructivas.

El mismo autor, propone la utilización de un Reactor Continuo de Tanque Agitado (RCTA) para garantizar la controlabilidad de esta etapa.

### 1.4.3. Alternativas en las etapas de separación

La parte de separación del ácido acrílico consta, en el diseño inicial, de las etapas descritas en el apartado 1.4.1 y mostradas en la Figura 4.

En 2017, Chien et al. realizaron una comparación económica de distintos diseños de la parte de separación y purificación (Chien, Yu, & Lee, 2017). En este estudio se realizan dos diseños para la etapa de separación y purificación. Ambos diseños incluyen un tanque Flash y una torre de absorción tras la etapa de reacción. El primer diseño, al que denominan “Proceso híbrido de extracción-separación”, sigue el diagrama inicial propuesto por Turton. El segundo diseño es un Proceso de destilación secuencial, que consta únicamente de dos columnas en serie, como se muestra en la Figura 5. En la primera de ellas se separan los ácidos del agua. La segunda se corresponde con la etapa de purificación que comparten todos los procesos, donde se separan los ácidos acrílico y acético en dos corrientes de pureza industrial.

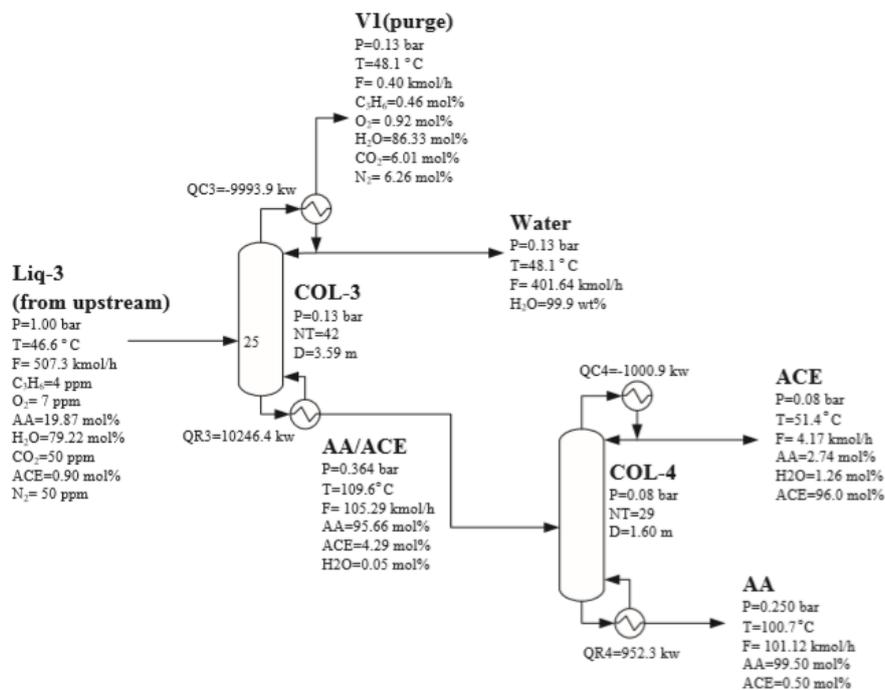


Figura 5. Diagrama de la alternativa de destilación secuencial (Fuente: Chien, Yu & Lee, 2017)

En sus conclusiones, Chien, Yu & Lee (2017) señalan que la alternativa híbrida de extracción-destilación ofrece un ahorro del 10,9 % en el cómputo global de costes de inversión y operación en base anual, frente a la destilación secuencial. Esto se debe esencialmente a dos motivos:

- Por una parte, en el proceso de destilación secuencial (Figura 5) la columna que separa el agua de los ácidos requiere un gran número de etapas, cuyo coste supera el coste de inversión de los equipos necesarios en la alternativa híbrida de extracción-destilación (Figura 4): columna ELL, columna de recuperación de DIPE y decantador.

- En segundo lugar, se reducen los costes de operación del proceso híbrido de extracción-destilación por la menor energía requerida en el calderín y el condensador de la columna de recuperación, con respecto a la necesaria en la columna que separa ácidos y agua en el proceso de destilación secuencial.

Además, existen otras alternativas que introducen técnicas de separación distintas. En la Figura 6 se presenta la propuesta de Suo et al. (2015). En su proceso suprimen la unidad de Extracción líquido-líquido y conduce las corrientes provenientes de la etapa de enfriamiento y absorción (las cuales contienen agua, ácido acrílico y ácido acético) directamente a una columna de destilación azeotrópica.

En esta columna, se introduce tolueno como agente de arrastre. El tolueno forma un nuevo azeótropo más volátil con el agua y ambos salen por la cabeza de la columna. La corriente de fondo (mezcla de ácido acrílico y ácido acético) se separa en una segunda columna, de forma similar al proceso propuesto por Turton. Esta alternativa permitiría eliminar la columna ELL y reducir el tamaño de la columna de destilación de la etapa de separación, además de reducir el gasto energético.

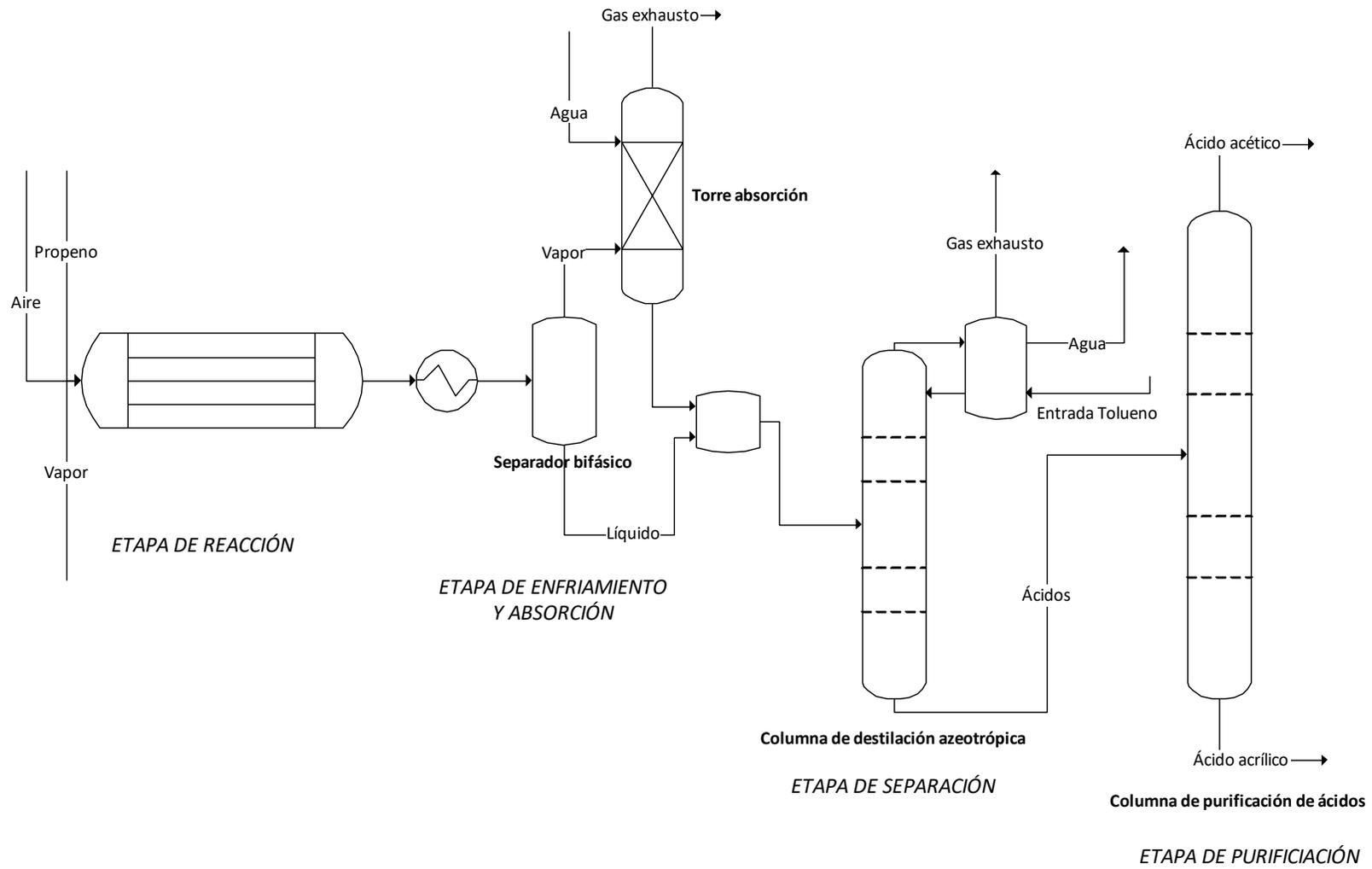


Figura 6. Diagrama de proceso de la separación mediante destilación azeotrópica (Fuente: Suo et al., 2015)

## 1.5. Simuladores de procesos

Los simuladores de procesos son programas informáticos en los cuales se puede diseñar, analizar u optimizar los procesos, cuyos datos fisicoquímicos y operaciones unitarias son representados a través de modelos matemáticos.

Tipos de simuladores de procesos según la estrategia de resolución del modelo matemático:

- Secuencial Modular. Dividen el modelo del proceso en módulos y empiezan a resolver el modelo desde las corrientes de alimentación, módulo a módulo secuencialmente.
- Simultáneos (Equation-Oriented). Resuelven todo el modelo simultáneamente.

El simulador utilizado en este trabajo como soporte para el diseño del proceso y su simulación completa es ProMax 5.0, de la empresa estadounidense Bryan Research & Engineering, LLC.

Este simulador permite representar procesos químicos en estado estacionario a través de figuras de diagramas de proceso (Figura 7). Cada figura contiene un modelo matemático del proceso que representa. ProMax realiza los cálculos fisicoquímicos en base a la información del proceso introducida, de forma secuencial.

El software ProMax permite la personalización de los cálculos mediante hojas de cálculo de Excel anexadas. De esta forma, se permite exportar los resultados a Excel, donde se añada cualquier cálculo adicional por parte del usuario, como pueden ser estudios económicos.

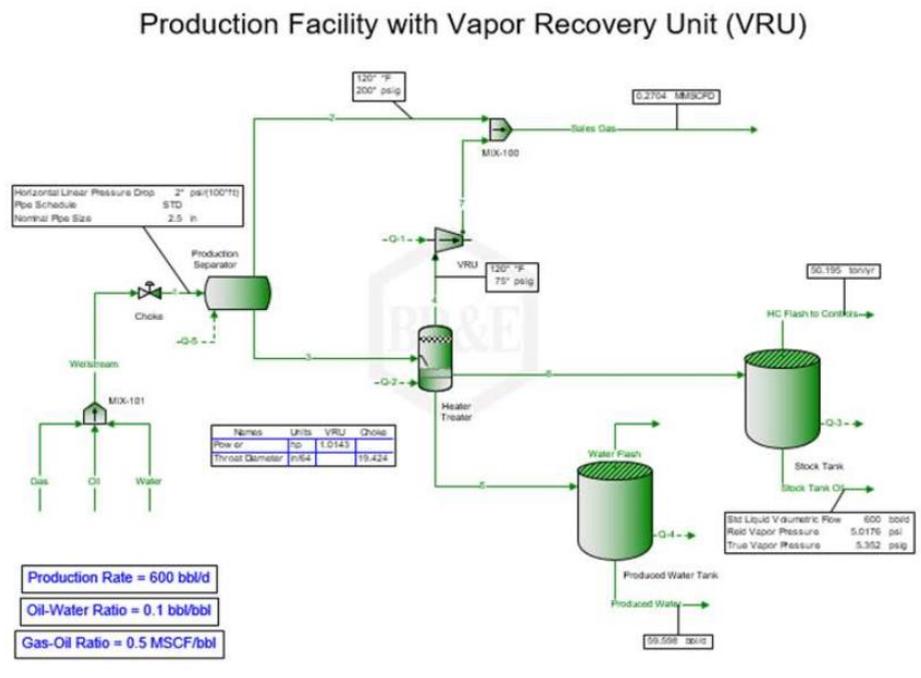


Figura 7. Ejemplo de un proceso simulado en ProMax (BR&E LLC., 2020)

## 1.6. Optimización de procesos

La optimización de procesos es la disciplina de ajustar una serie de parámetros para potenciar las condiciones más deseables en un proceso sin violar unas restricciones previamente definidas.

La optimización de un proceso puede perseguir toda una variedad de objetivos. Por ejemplo, se puede maximizar la producción en un equipamiento ya existente, si se persigue un objetivo económico, o minimizar la emisión de gases de efecto invernadero, si el objetivo es medioambiental.

Turton (1998), divide la optimización de procesos químicos en dos tipos. Por un lado, existe la optimización topológica que consiste en mejorar un proceso a través de cambios en los equipos utilizados en un proceso y su distribución. Por ejemplo, incluye el uso de recirculaciones, sustitución de una operación de separación por otra más conveniente, integración del calor, etc. En segundo lugar, la optimización paramétrica se encarga de ajustar los parámetros y condiciones de un proceso definido para conseguir el resultado deseado. Además, Turton indica que la optimización topológica debe realizarse en las etapas más tempranas del diseño de un proceso, dejando la optimización paramétrica para etapas de diseño más avanzadas.

Así pues, en este trabajo se considera que la optimización topológica ha sido suficientemente estudiada en la literatura y su análisis se muestra en la sección 1.4. En este trabajo se realizará la optimización paramétrica de la etapa de reacción.

## **2. Objetivos**

Tras el análisis comparativo de la literatura relacionada con el proceso de producción de ácido acrílico, se define el alcance de este trabajo.

### **2.1. Objetivo académico**

En primer lugar, este trabajo pretende constatar la utilización de las habilidades y conocimientos que conforman las competencias adquiridas en el Grado en Ingeniería Química. Entre ellas se encuentra la consecución de un proyecto llevado a cabo individualmente que aborde la revisión bibliográfica, el diseño de procesos y equipos, el análisis de los resultados y un estudio económico, con capacidad de planificación e iniciativa en la toma de decisiones y la resolución de problemas.

### **2.2. Objetivo técnico**

El objetivo técnico de este trabajo es realizar el diseño de un proceso de producción de ácido acrílico, con un volumen de producción de 50.000 Toneladas anuales.

Este diseño incluirá la optimización de las condiciones de operación en la etapa de reacción para garantizar el máximo beneficio económico. El diseño óptimo de la etapa de reacción se completará con las etapas posteriores necesarias para obtener un proceso de producción completo. Para ello, se hará uso del simulador ProMax.

### **2.3. Metodología**

A continuación, se describen los pasos que se van a seguir en este trabajo.

1. Análisis de las alternativas existentes para este proceso y definición de las bases del diseño
2. Optimización de la etapa de reacción
3. Diseño de las etapas posteriores
4. Estimación de económica del proceso completo
5. Estudio de viabilidad económica

## 3. Optimización del reactor

En el apartado 1.4 se ha revisado las distintas alternativas existentes. El proceso diseñado en este trabajo define su diagrama de flujo (Figura 8) mediante la unión de la etapa de reacción propuesta por Luyben (2016) y el tren de separación a través de destilación secuencial, que ofrece una menor rentabilidad, pero facilita la realización de una estimación económica de nivel académico al constar de un menor número de equipos.

En este apartado, se pretende obtener las dimensiones y las condiciones de operación de los equipos de la etapa de reacción que maximicen el beneficio, teniendo en cuenta que se desea una producción estable de 50.000 Toneladas de ácido acrílico anuales.

Para cualquier optimización paramétrica se debe partir de un caso base y definir la Función Objetivo (F.O.), las variables de decisión (o variables de diseño) sobre las que se puede actuar y las restricciones del sistema que deben ser cumplidas.

En un sistema donde exista más de una variable de decisión, la aplicación de métodos matemáticos para la optimización de una F.O. puede llegar a ser muy compleja. En este trabajo existen cuatro variables de decisión, descritas en la sección 3.4.

Turton (1998) explica los pasos a seguir en la optimización de procesos químicos. Para decidir cómo y cuáles variables analizar, Turton (1998) propone priorizarlas. El autor sugiere diferentes estrategias para elegir las variables de decisión clave atendiendo a la sensibilidad de la F.O. ante cambios en las variables de decisión, o bien, a la controlabilidad del proceso.

En este trabajo, tras definir la F.O., las variables de decisión y las restricciones, se realizará un análisis de la sensibilidad de la F.O. ante cambios en las variables de decisión para decidir el orden en la optimización de las distintas variables de decisión.

### 3.1. Caso base

Como se indica en los objetivos del trabajo (2.2), se pretende diseñar una planta para un volumen de producción anual determinado: 50.000 Toneladas de ácido acrílico. En este trabajo se toman las condiciones de operación ofrecidas por Luyben (2016). Luyben toma como caso base, a su vez, la mayoría de las condiciones de operación del diseño inicial propuesto por Turton (1998). En la Figura 9 se muestra el diagrama de esta etapa del proceso.

#### 3.1.1. Cinética

Como se indica en la sección 1.3, la literatura académica simplifica el mecanismo de reacción en la producción de ácido acrílico mediante la oxidación del propileno en un solo paso (reacción (3)).

Paralelamente, se genera ácido acético (reacción (4)). Aunque este subproducto tiene valor industrial, su valor en el mercado es menor que el del ácido acrílico (Tabla 4). Por otra parte, ocurre la generación de  $CO_2$  (reacción (5)) que representa una pérdida de materia prima, además de un impacto medioambiental negativo que hay que tratar de minimizar. Se asume que las tres reacciones ocurren de forma irreversible y en fase gas.

La velocidad de las reacciones viene dada por la presión parcial de los reactivos (propileno y oxígeno) y la constante cinética. Las reacciones son de primer orden respecto a cada componente. La velocidad de reacción de cada reacción queda definida según la siguiente ecuación.

$$r_i = k_i P_{C_3H_6} P_{O_2} \quad [3.1. 1]$$

Siendo  $P_{C_3H_6}$  y  $P_{O_2}$  las presiones parciales de los reactantes y  $k_i$  la constante cinética para cada una de las tres reacciones. A su vez, la constante cinética obedece la ecuación de Arrhenius:

$$k_i = k_{0,i} \cdot e^{\frac{-E_{A,i}}{RT}} \quad [3.1. 2]$$

Donde interviene el factor preexponencial ( $k_i$ ), la energía de activación de cada reacción ( $E_{A,i}$ ), la temperatura a la que tiene lugar la reacción ( $T$ ) y la constante de los gases ideales ( $R$ ). Los datos cinéticos de las reacciones se presentan en la Tabla 1 e incluyen el uso de un catalizador de 0,5 de fracción hueca y 2000  $kg/m^3$  de densidad de partícula.

Tabla 1. Datos cinéticos de las reacciones irreversibles en fase gas (Turton, 1998)

Reacción	$E_{A,i} \left( \frac{kcal}{kmol} \right)$	$k_{0,i}$
1	15.000	$4,4167 \times 10^{-5}$
2	20.000	$2,4528 \times 10^{-4}$
3	25.000	$5,0278 \times 10^{-2}$

Concentración en Pa  
Factor preexponencial ( $k_{0,i}$ ) en  $kmol s^{-1}m^{-3}Pa^{-2}$

### 3.1.2. Condiciones de operación

La corriente de propileno alimentado al reactor según la bibliografía (Luyben, 2016) es de 127  $kmol/h$ . Sin embargo, en este trabajo se ajusta mediante iteración para cumplir con la producción anual de AA fijada, haciendo uso de la herramienta *Solver* que incorpora ProMax. En el caso base la corriente de entrada de propileno es de 109,25  $kmol/h$  a 11,5 bar y 25°C. Además, la alimentación al reactor consta de una corriente de aire ( $O_2$  y  $N_2$ , 21 y 79 % mol, respectivamente) de 1362  $kmol/h$  a 25°C y 1,01 bar y una corriente de 992,3  $kmol/h$  de vapor de agua a 160°C y 6 bar.

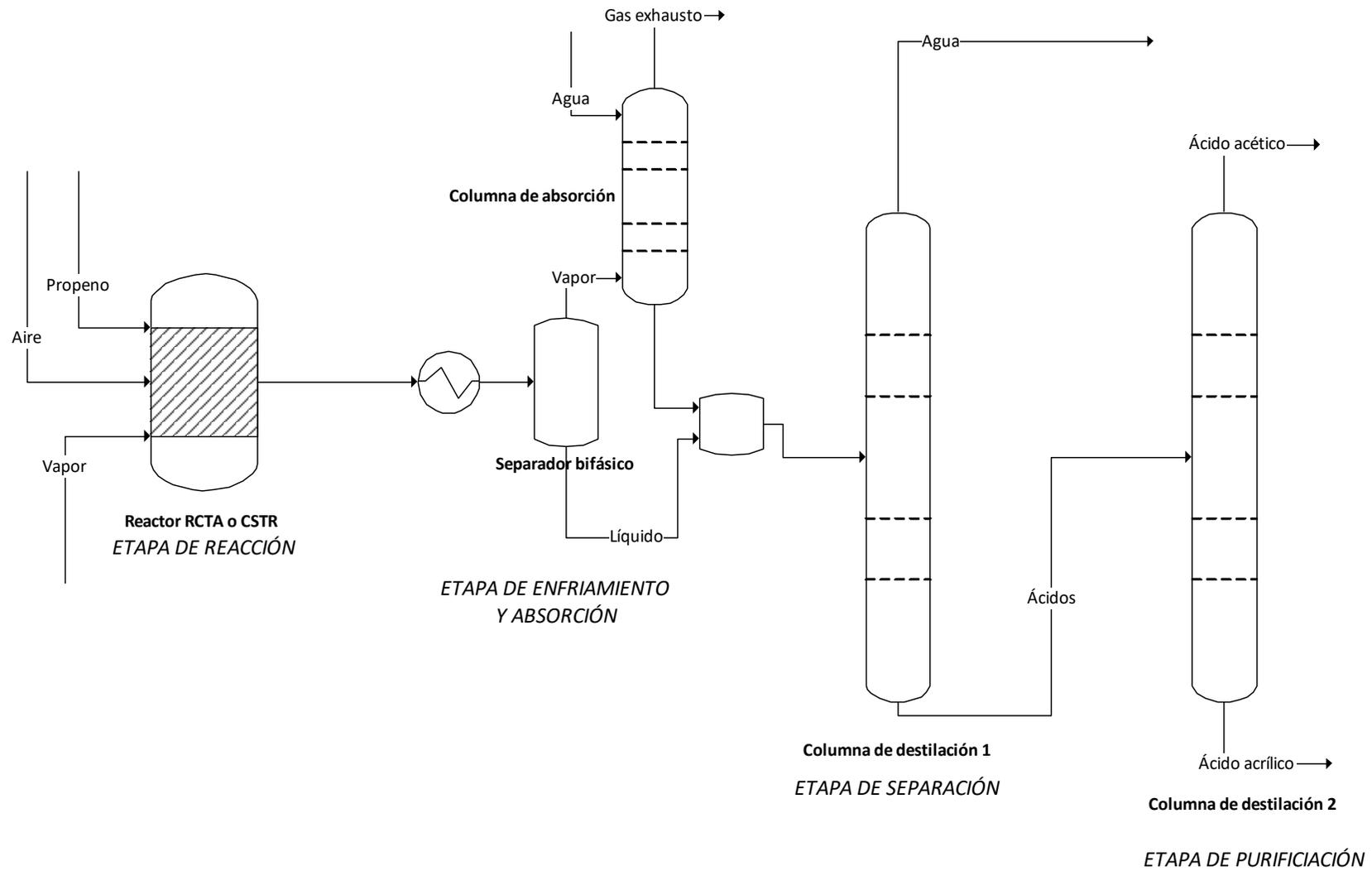


Figura 8. Diagrama del proceso diseñado completo

La corriente de vapor alimentado al reactor cumple varias funciones: actúa como sumidero del calor generado por la reacción, al mismo tiempo que reduce la concentración de oxígeno en la corriente de salida y evita la formación de coque, que desactivaría el catalizador. Para asegurar esta última función, el caudal molar de vapor debe ser al menos 4 veces el caudal de propileno alimentado. En la Tabla 2 se puede observar que la relación *Vapor/PP* supera ampliamente el límite inferior de 4.

Para comprimir el aire de alimentación se utilizan dos compresores en serie que realizan un trabajo total de 2,1 MW para comprimir el aire atmosférico hasta 4,3 bar y 152°C. El uso de dos compresores en serie con refrigeración intermedia se justifica para mantener la temperatura a la salida por debajo de 200°C, límite heurístico que sugiere la bibliografía. (Luyben, 2016)

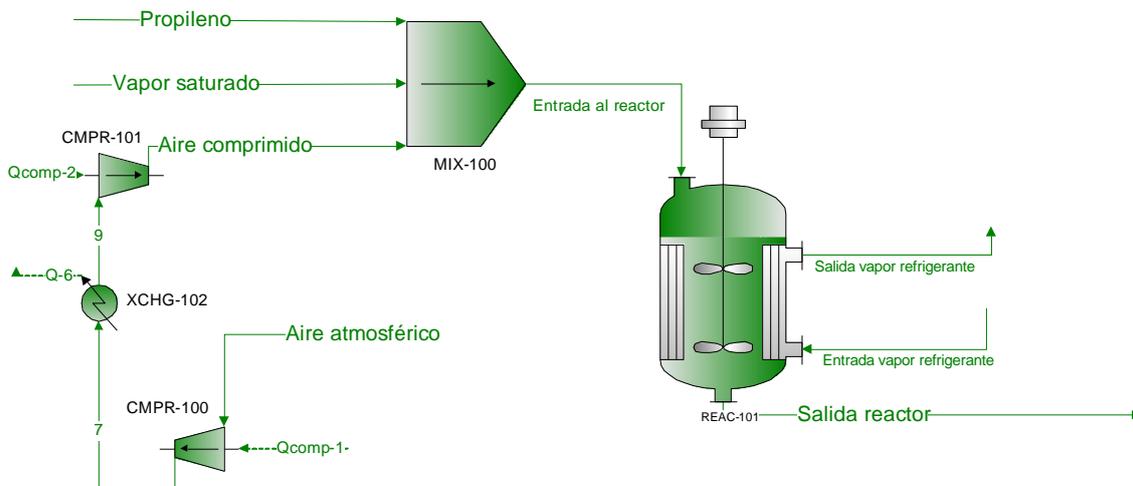


Figura 9. Diagrama de proceso de la etapa de reacción en el caso base (Fuente propia)

El reactor es un RCTA operado a 300°C y 4,3 bar. El volumen de reacción (*VR*) es de 80 m<sup>3</sup>. Su interior se refrigera mediante una espiral interna que retira una potencia térmica de 20,4 MW del reactor. Por el interior de dicha espiral entra vapor saturado a 115°C y 6 bar y sale a 160°C y misma presión. El coeficiente de transferencia de calor (*U*) para el sistema de refrigeración es de 0,28 kW m<sup>-2</sup> K<sup>-1</sup>.

Con estas condiciones, la conversión de propileno (*X<sub>PP</sub>*) es del 98,6% y la selectividad relativa del ácido acrílico frente a ácido acrílico (*AA/ACE*) y dióxido de carbono (*AA/CO<sub>2</sub>*) es, respectivamente, 14,6 y 1,7.

Tabla 2. Valores definidos para el caso base (Luyben, 2016)

Parámetro	Valor
$TR$ (°C)	300
$VR$ (m <sup>3</sup> )	80
Selectividad AA/ACE	14,6
Selectividad AA/CO <sub>2</sub>	1,7
$X_{PP}$ (%)	98,6
<b>Alimentación (kmol/h)</b>	
Propileno	109,25
Vapor	992,3
Aire	1362
<b>Productos (kmol/h)</b>	
AA	86,73
ACE	5,94
CO <sub>2</sub>	51,02
<b>Potencia (MW)</b>	
$Q_{HX}$	20,4
$W_C$	2,1
<b>Restricciones</b>	
$y_{O2}$ (% mol)	3,02
Vapor/PP	9,09
<b>Refrigerante</b>	
$T_{v,0}$ (°C)	115
$T_v$ (°C)	160

### 3.2. Implementación del modelo en ProMax

Siguiendo el árbol de decisión para la elección del entorno termodinámico ( Figura 10), el proceso es a baja presión (4,3 bar la más elevada), no se dispone de sus parámetros de interacción y no existen dos fases líquidas. Esto nos lleva a utilizar el paquete UNIQUAC y sus variantes. Luyben (2016) recomienda, también, utilizar el paquete UNIQUAC en su estudio económico del reactor mientras que Chien, Yu & Lee (2017) utilizan el paquete NRTL-HOC para su estudio de las etapas de separación y purificación.

Por lo tanto, siguiendo las recomendaciones de la bibliografía, se decide utilizar el paquete UNIQUAC en la etapa reactiva y el paquete NRTL-HOC para las etapas posteriores. En las etapas de separación se utilizan parámetros de interacción binaria para el par de componentes AA y ACE (Tabla 3). Para la interacción entre estos dos compuestos y el agua, ProMax toma los datos del modelo VLE-HOC. Para el resto de las interacciones entre compuestos se considera que existe un equilibrio ideal de fases. (Chien, Yu, & Lee, 2017)

Tabla 3. Parámetros para la ecuación NRTL en este sistema (Chien, Yu, & Lee, 2017)

Componente i	AA
Componente j	ACE
$a_{ij}(K)$	-32,7296
$a_{ji}(K)$	914,333
$b_{ij}$	0,539728
$b_{ji}$	-1,79443
$\alpha_{ij}^0$	0,3

ProMax NRTL:

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_j x_j \tau_{ji} G_{ji}}{\sum_k x_k G_{ki}} + \sum_j \frac{x_j G_{ij}}{\sum_k x_k G_{kj}} \left[ \tau_{ij} - \frac{\sum_m x_m \tau_{mj} G_{mj}}{\sum_k x_k G_{kj}} \right]$$

Donde:

$$G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} \tau_{ij})$$

$$\tau_{ij} = \frac{a_{ij}}{T} + b_{ij} + c_{ij} \cdot T + d_{ij} \cdot \ln T$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij}^0 + \alpha_{ij}^1 \cdot T$$

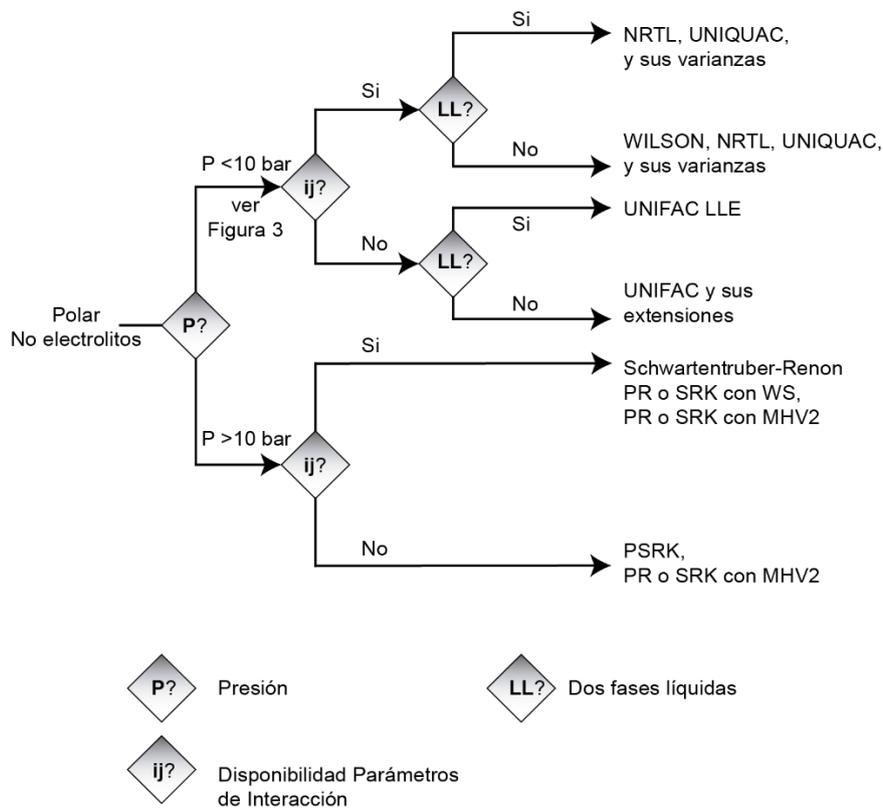


Figura 10. Árbol de decisión del entorno termodinámico para simuladores de procesos. (Fuente: Martínez Sifuentes, 2000)

### 3.3. Función objetivo

Como se describe en los objetivos de este trabajo, se pretende encontrar las condiciones de operación óptimas en el reactor. En este caso se establece como condiciones óptimas aquellas que ofrezcan un mayor beneficio económico del proceso.

Por lo tanto, para la optimización de las condiciones de operación se define como función objetivo (F.O.) el beneficio anual.

$$\text{Beneficio} \left( \frac{\$}{\text{año}} \right) = \text{valor}_{\text{productos}} - \text{coste total anual} \quad [3.3. 1]$$

Esta F.O. se define como la diferencia entre el valor de producto y subproducto/s producidos y los costes. Los costes incluyen tanto los costes de operación como los costes de inversión que requieren los equipos.

$$\text{coste total anual} = \text{coste\_anual}_{\text{operación}} + \text{coste\_anual}_{\text{inversión}} \quad [3.3. 2]$$

Mediante la herramienta de importación y exportación de datos entre ProMax y Excel, se diseña una hoja de cálculo donde se incluyen los datos necesarios y ecuaciones para la estimación económica que conforman la F.O. El flujo de datos se puede observar en la Figura 11.

1. Primero se introducen todos los parámetros del modelo diseñado en la hoja de cálculo de Excel
2. Aquellos datos necesarios para simular el proceso se importan a ProMax
3. El simulador realiza los cálculos fisicoquímicos en base a los parámetros de diseño, el modelo del sistema introducidos y el paquete termodinámico
4. Se exportan las variables calculadas del sistema a Excel
5. En la hoja de cálculo de Excel, se realiza la estimación de costes
6. Con todos los datos económicos del proceso, se puede realizar el análisis para definir el diseño óptimo

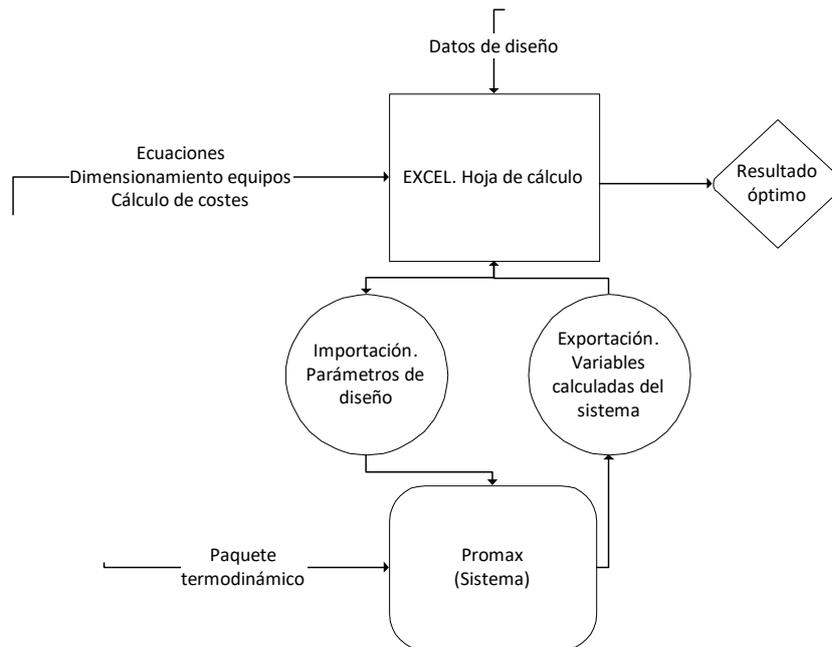


Figura 11. Diagrama de flujo de información en la optimización

### 3.3.1. Valor de los productos

Los productos generados en esta planta son de gran consumo a nivel industrial, y su valor económico viene dado por su cotización en el mercado global. Por tanto, el valor total de los productos se obtiene de la multiplicación de la cantidad producida ( $\dot{m}_{AA}$  y  $\dot{m}_{ACE}$ ) por su precio de mercado.

$$valor_{AA} \left( \frac{\$}{año} \right) = precio_{AA} \left( \frac{\$}{Ton} \right) \cdot \dot{m}_{AA} \left( \frac{Ton}{año} \right) \quad [3.3. 3]$$

$$valor_{ACE} \left( \frac{\$}{año} \right) = precio_{ACE} \left( \frac{\$}{Ton} \right) \cdot \dot{m}_{ACE} \left( \frac{Ton}{año} \right) \quad [3.3. 4]$$

En la Tabla 4 se muestra la lista de precios de mercado orientativos para los productos de interés, obtenidos de ICIS (Independent Commodity Intelligence Services).

Tabla 4. Valor de mercado de los productos. (Fuente: ICIS, 2020)

Producto	Precio (k\$/Ton)
Ácido acético	1,5
Ácido acrílico	2,4
Propileno	1,32

### 3.3.2. Coste de operación

El coste de operación (*OPEX*) se define como el coste necesario para mantener el proceso en funcionamiento. En este caso, el coste de operación viene dado por el coste de las materias primas, el vapor de proceso y el coste energético (compresión del aire atmosférico). Para el cálculo del coste de operación, se considera que la planta opera 8.000 horas al año.

$$OPEX = \text{coste}_{PP} + \text{coste}_{vapor} + \text{coste}_{compresión} \quad [3.3. 5]$$

#### Coste de las materias primas

En cuanto a las materias primas, el único producto químico con valor industrial que se utiliza es el propileno (*PP*), cuyo coste se muestra en la Tabla 4.

$$\text{coste}_{PP} \left( \frac{\$}{\text{año}} \right) = \text{precio}_{PP} \left( \frac{\$}{\text{Ton}} \right) \cdot \dot{m}_{PP} \left( \frac{\text{Ton}}{\text{año}} \right) \quad [3.3. 6]$$

#### Coste del vapor de proceso

Se utiliza vapor de agua alimentada directamente al reactor y para su refrigeración a través de un tubo helicoidal interno. Para la optimización, se tendrá en cuenta únicamente el vapor que entra al reactor a 160°C y 6 bar, cuyo coste de producción es 12,85 \$/Ton. El vapor que se utiliza para la refrigeración se revaloriza para otros usos en planta, aunque esto no se cuantifica en esta optimización.

El coste del vapor de proceso está basado en el coste del gas natural, de la electricidad y del agua en España. Para calcularlo se ha hecho uso del software CAPCOST, proporcionado por Turton (1998). El coste de la energía eléctrica y del gas natural que se utiliza en el CAPCOST se toma de la tarifa “One Luz + Gas” de Endesa. El precio de la electricidad es de 0,119893 €/kWh y el del gas natural es de 0,047714 €/kWh. El precio del agua se toma de un estudio de la Organización de Consumidores y Usuarios española (OCU) que estima el precio del agua en 1,43 €/m<sup>3</sup> de media.

Para la conversión a dólares estadounidenses se toma el valor del cambio de divisa medio en 2019 estimado como 1,12 USD/EUR. (Banco de España, 2020)

En la Tabla 5 se muestra el valor del coste de la electricidad y el coste del vapor de proceso.

$$\text{coste}_{vapor} \left( \frac{\$}{\text{año}} \right) = \dot{m}_{vapor} \left( \frac{kg}{h} \right) \cdot \text{coste}_{energético}_{vapor} \left( \frac{\$}{kg} \right) \cdot 8000 \left( \frac{h}{\text{año}} \right) \quad [3.3. 7]$$

Tabla 5. Costes energéticos

Coste	Valor
$\text{coste}_{electricidad} \left( \frac{\$}{kWh} \right)$	0,13428
$\text{coste}_{energético}_{vapor} (\$/kg)$	0,01285

### Coste de compresión

El coste de comprimir el aire atmosférico se calculará a partir de la potencia consumida por ambos compresores ( $W_C$ ), del precio de la energía eléctrica y del tiempo de operación. Así, para el caso base:

$$coste_{compresión} \left( \frac{\$}{año} \right) = W_C (kW) \cdot 8000 \left( \frac{h}{año} \right) \cdot coste_{electricidad} \left( \frac{\$}{kWh} \right) \quad [3.3. 8]$$

### 3.3.3. Dimensionamiento de equipos

Para poder realizar la estimación del coste de inversión de la etapa se necesita dimensionar los equipos que la integran, ya que las ecuaciones de cálculo de los costes de equipo van ligados a su capacidad o tamaño.

El sistema de refrigeración debe facilitar la controlabilidad del proceso en un sistema donde ocurren reacciones altamente exotérmicas. Para ello, el tanque contendrá en su interior un intercambiador de calor en forma de espiral. De esta forma se incrementa la superficie de intercambio de calor en comparación con otros tanques refrigerados como los reactores encamisados. En la Figura 12 se muestra el perfil de temperaturas que se obtiene con este diseño. La línea constante roja representa la temperatura del reactor, mientras que la línea azul, que representa al fluido refrigerante, crece entre su temperatura de entrada ( $T_{V,0}$ ) y su temperatura de salida ( $T_V$ ).

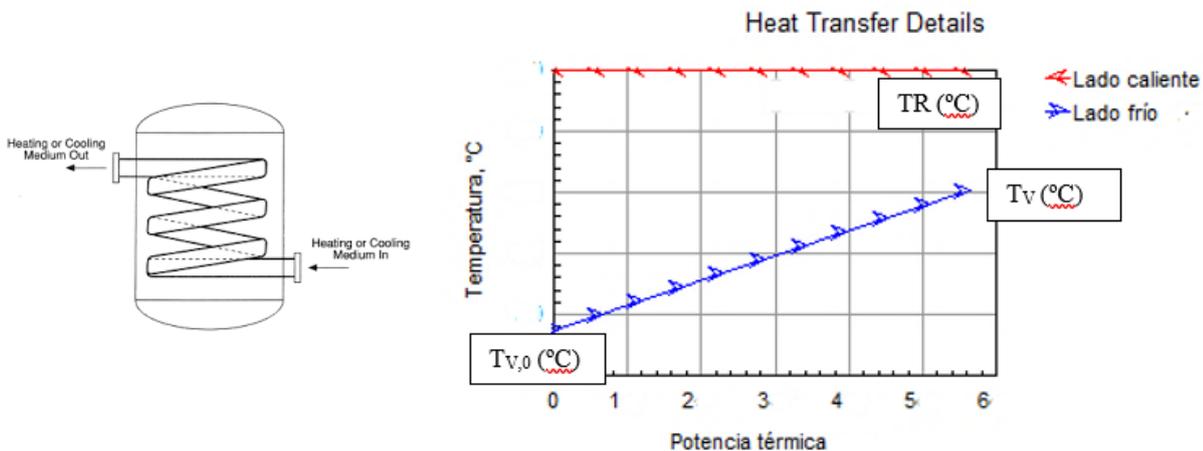


Figura 12. Curva de transferencia de calor obtenida de ProMax.

La ecuación de diseño para el intercambiador se muestra a continuación. La potencia disipada en el reactor dependerá del coeficiente global de transferencia de calor ( $U$ ), del área de intercambio de calor ( $A_{HX}$ ) y de la diferencia de temperaturas media logarítmica ( $\Delta T_{m,l}$ ).

$$q = UA_{HX} \Delta T_{m,l} \quad [3.3. 9]$$

El refrigerante utilizado será vapor de agua y se utilizará el calor liberado por las reacciones para calentar vapor a 160°C ( $T_V$ ), que podrá utilizarse en otros sistemas de calefacción de la planta. El vapor de entrada está a 1,5 bar y 115°C ( $T_{V,0}$ ) para garantizar la existencia de una sola fase, gaseosa, en el interior del intercambiador. Para el dimensionamiento del sistema de refrigeración, se toma el coeficiente global de transferencia de calor para este sistema de Luyben (2016) con un valor de  $0,28 \text{ kW m}^{-2}\text{K}^{-1}$ . En este punto se calcula  $\Delta T_{m,l}$  a partir de las temperaturas descritas.

$$\Delta T_{m,l} = \frac{T_{V,0} - T_V}{\ln\left(\frac{T_R - T_{V,0}}{T_R - T_V}\right)} \quad [3.3. 10]$$

Donde:

- Temperatura del vapor a la salida  $T_V = 160^\circ\text{C}$
- Temperatura del vapor a la entrada  $T_{V,0} = 115^\circ\text{C}$
- Temperatura del reactor  $T_R = \text{Variable}$

Con la temperatura del vapor refrigerante fijada a la entrada y a la salida, y la temperatura del reactor fijada como variable de diseño, el área de transferencia de calor ( $A_{HX}$ ) dependerá de la potencia térmica a disipar ( $q$ ).

$$A_{HX} = \frac{q}{U\Delta T_{m,l}} \quad [3.3. 11]$$

El diámetro externo ( $D_{ext}$ ) del serpentín se asume que es de 0,05 m. Además, el área de intercambio de calor es la superficie externa del serpentín.

$$A_{HX} = \pi D_{ext} \cdot L_{HX} \quad [3.3. 12]$$

Una vez obtenida el área de intercambio de calor, se puede obtener mediante geometría el volumen que ocupa el intercambiador de calor ( $V_{HX}$ ).

$$V_{HX} = \frac{\pi D_{ext}^2}{4} \cdot L_{HX} \quad [3.3. 13]$$

Con las anteriores ecuaciones, se puede deducir que el intercambiador de calor ocupa  $0,0125 \text{ m}^3$  por cada  $\text{m}^2$  de superficie de intercambio.

$$\frac{V_{HX}}{A_{HX}} = \frac{D_{ext}}{4} = 0,0125 \frac{\text{m}^3}{\text{m}^2} \quad [3.3. 14]$$

El volumen total de tanque ( $V_T$ ) debe contener, por tanto, el volumen de reacción ( $V_R$ ) y el volumen ocupado por el intercambiador de calor ( $V_{HX}$ ).

$$V_T = V_R + V_{HX}$$

[3.3. 15]

Debe tenerse en cuenta que, por razones de diseño, el reactor no puede ser excesivamente grande. Para contemplar este hecho se dividirá el volumen de reacción total ( $V_T$ ) entre el límite superior de un tanque ( $V_{max}$ ) definido en la Tabla 6, con un valor de  $35 \text{ m}^3$ . En la Figura 13 se muestra el coste total de los tanques en función del volumen de cada tanque unitario. El coste de reactor más bajo por unidad de volumen de tanque utilizado se obtiene para los valores más altos del rango permitido. La forma anómala de la curva es consecuencia de discretizar el número de reactores.

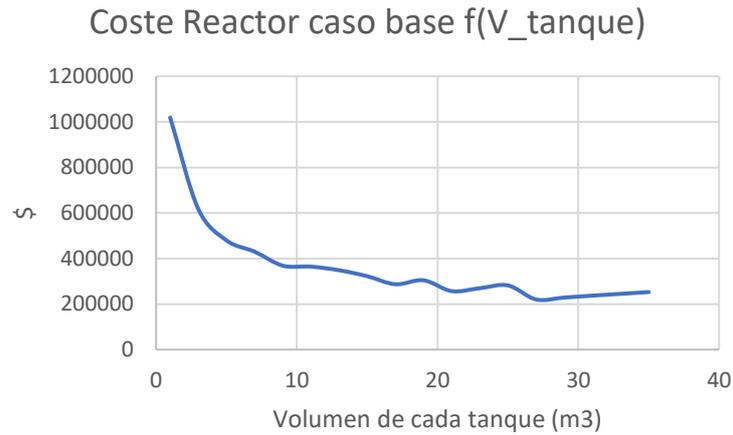


Figura 13. Coste del reactor en el caso base en función del volumen de cada tanque

Redondeando el valor obtenido se obtendrá un número entero de reactores ( $nR$ ) situados en paralelo que satisfarán el volumen total de tanque.

$$nR = V_T/V_{max}$$

[3.3. 16]

A partir de este número de reactores mínimo, se calculará el volumen de cada reactor individual ( $V_{1,R}$ ).

$$V_{1,R} = V_T/nR$$

[3.3. 17]

De igual forma, el área de intercambio de calor ( $A_{HX}$ ) se divide proporcionalmente entre el número de reactores para dimensionar los intercambiadores en cada uno de los  $nR$  reactores.

$$A_{1,HX} = A_{HX}/nR$$

[3.3. 18]

Para determinar la morfología del reactor se establece la relación de aspecto, entre diámetro interno y altura del reactor ( $D_R$  y  $L_T$ , respectivamente). (Hall, 2017)

$$L_T = 2 \cdot D_R \quad [3.3. 19]$$

El volumen de cada reactor es ahora conocido, pero también se puede obtener como el producto del área interna del cilindro por su altura.

$$V_{1,R} = \frac{\pi D_R^2}{4} \cdot L_T = \frac{\pi D_R^3}{2} \quad [3.3. 20]$$

Sustituyendo la relación de aspecto en la anterior ecuación, se obtiene una relación entre el volumen de un reactor y sus dimensiones.

$$D_R = \sqrt[3]{\frac{2V_{1,R}}{\pi}} \quad [3.3. 21]$$

En cuanto al tamaño del compresor de aire utilizado, en la Figura 14 se demuestra la existencia de un gran impacto de la potencia de diseño en el coste de un compresor. En dicha figura se representa el coste del conjunto de compresores que satisfacen una potencia 2098 kW (necesaria en el caso base) frente a la potencia de diseño. Se observa que el mínimo coste se obtiene para el grupo de compresores de 50 kW. La curva de estimación del coste utilizada se detalla en el apartado 3.3.3 y se respeta el rango de uso propuesto por el autor (Tabla 6).

En consecuencia, se decide que la potencia de diseño de un compresor de aire será de 50 kW y se utilizarán tantos como sea necesario para satisfacer la potencia de compresión. En el caso base, para satisfacer los 2,1 MW, se utilizarían 42 compresores.

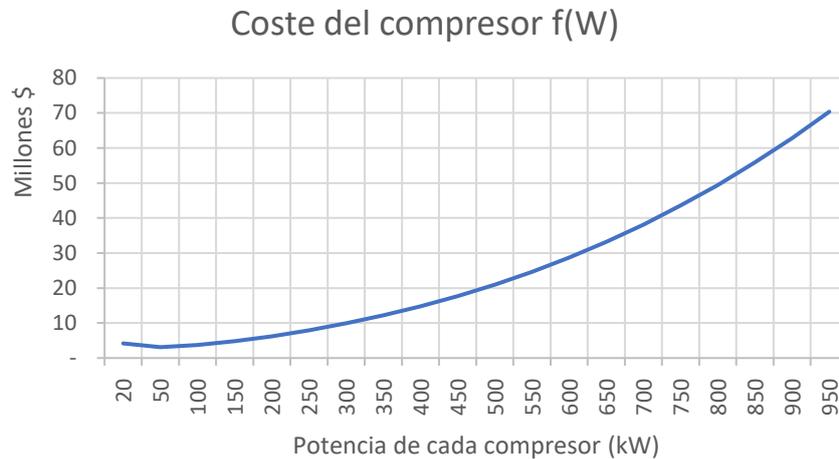


Figura 14. Impacto de la potencia en el coste de un compresor

### 3.3.4. Coste de inversión

El coste o capital de inversión (CAPEX) se define como el coste asociado a la adquisición y puesta a punto del equipamiento necesario para poner el proceso en funcionamiento.

En la estimación económica que se va a realizar ligada a la optimización de la etapa de reacción se considera que el coste de inversión es únicamente equivalente al coste de adquisición de los equipos, descartando otros factores como la instalación. El estudio completo se realizará en la sección 5.1.

En el caso de la etapa de reacción, el coste de inversión viene dado por el coste del tanque reactor, el coste del intercambiador de calor del reactor y el coste de los compresores del aire atmosférico. El coste del catalizador no se tiene en cuenta en este estudio al comprobarse en la bibliografía el ínfimo impacto económico producido. (Luyben, 2016)

$$coste\_anual_{inversión} = \frac{coste_{reactor} + coste_{intercambiador} + coste_{compresores}}{10 \text{ años}} \quad [3.3.22]$$

Este coste se divide entre el periodo de amortización del equipamiento para obtenerlo en base anual e incluirlo en la F.O. La vida útil media de los equipos en Ingeniería Química se encuentra entre 10 y 20 años, según las condiciones de operación de estos. (Costa, 1984)

En esta estimación no se tendrá en cuenta el valor económico del tiempo (intereses), a pesar de que la vida útil de los equipos podría hacerlo significativo. Este hecho sí se contempla en el estudio económico completo (sección 5).

En base a esta premisa y teniendo en cuenta que la planta opera con ácidos a temperaturas de hasta 300°C, se establece que la vida útil de los equipos es de 10 años. Debe tenerse en cuenta que esta aproximación tiene un gran impacto en la función objetivo, por lo que el resultado de la optimización puede variar notablemente.

El coste de adquisición base de los equipos se relaciona principalmente con su capacidad o dimensiones. Para esta estimación, el coste de adquisición base de los equipos de la etapa de reacción ( $C_{A,r}^0$ ) será la suma del coste de adquisición de cada equipamiento ( $C_{A,n}^0$ ):

$$C_{A,r}^0 = \sum C_{A,n}^0 \quad [3.3.23]$$

El subíndice  $n$  se refiere a que estas constantes y parámetros son particulares para cada uno de los equipamientos cuyo coste se desea estimar.

En la guía que se sigue en este trabajo, se ajusta el precio de toda una lista de equipamientos operados a temperatura y presión ambiente y fabricados de acero al carbono a una misma curva (Turton, 1998):

$$\log_{10} C_{A,n}^0 = K_{1,n} + K_{2,n} \log_{10}(A_n) + K_3 [\log_{10}(A_n)]^2 \quad [3.3.24]$$

Donde  $A$  es el parámetro de capacidad o tamaño del equipo, mientras que  $K_1$ ,  $K_2$  Y  $K_3$  son las constantes de la curva para cada equipo. Las constantes, junto a los límites de aplicación de las curvas, se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6. Constantes para la curva de estimación de costes de adquisición en la etapa de reacción (Turton, 1998)

Equipo (n)	$K_1$	$K_2$	$K_3$	Capacidad, Unidades	Lim. inferior	Lim. superior
Tanque reactor (T)	4,1052	0,5320	-0,0005	Volumen, m <sup>3</sup>	0,1	35
Espiral interna (HX)	3,9912	0,0668	0,2430	Area, m <sup>2</sup>	1	100
Compresor (COM)	5,0355	-1,8002	0,8253	Potencia, kW	18	950

Una vez determinado el coste base de adquisición de los equipos de la etapa ( $C_{A,n}^0$ ), operados a presión atmosférica y construidos de acero al carbono, se utilizan distintos factores para reflejar el impacto del material utilizado y la resistencia del diseño en el coste del equipo. En concreto, se utilizará la siguiente fórmula que corrige el coste base mediante el factor de presión ( $f_p$ ) y el factor de material ( $f_m$ ), y las constantes  $B_1$  y  $B_2$ .

$$C_{A,n}(\$) = C_{A,n}^0(B_{1,n} + B_{2,n}f_{m,n}f_{p,n}) \quad [3.3.25]$$

El mismo proceso se sigue para todos los equipos de la etapa, obteniendo el coste de adquisición de la etapa mediante el sumatorio del coste de adquisición de cada uno de los  $n$  equipos.

$$C_{A,r} = \sum C_{A,n} \quad [3.3.26]$$

Las constantes  $B_1$  y  $B_2$  se muestran en la Tabla 7. En cuanto al factor de presión, se establece que es 1, ya que todos los equipos están operados por debajo de 4,3 bar. Por otra parte, dado que la temperatura de operación está entre 160 y 300°C y habrá concentración de ácidos presente en los equipos, se elige material de construcción el acero inoxidable de la serie 304 para el reactor y el intercambiador de calor interno. En cuanto a los compresores de aire, el factor de material se considera como 1, ya que no se necesita resistencia de diseño adicional para comprimir aire atmosférico.

Tabla 7. Factores para la estimación del coste estimado de equipos (Fuente: Turton, 1998)

Equipo (n)	$B_1$	$B_2$	$f_m$	$f_p$
Tanque reactor (T)	1,75	1,55	3,1	1
Espiral interna (HX)	2,25	1,82	2,8	1
Compresor (COM)	1,89	1,35	1	1

El Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) es un número adimensional que sirve como índice de los precios en un año. El índice que sirve como base para la guía utilizada es el de 2001 (valor 397), por lo que se deben actualizar los precios de los equipos al nivel actual de inflación. Esto se realizará mediante el valor de CEPCI del 2016 (valor 542).

Entonces, el coste total de equipos de la etapa de reacción ( $C_{E,r}$ ) se obtiene mediante la ecuación [3.3.27].

$$C_{E,r}(2016) = C_{A,r} \cdot \frac{I_{2016}}{I_{2001}} \quad [3.3.27]$$

Donde:

$$I_{2016} = 542$$

$$I_{2001} = 397$$

### 3.4. Variables de decisión y restricciones

Las variables de decisión se pueden definir como aquellas variables que pueden ser especificadas en un proceso (temperatura y volumen del reactor, concentración de los reactantes, etc.). A continuación, se describen las variables de decisión y sus límites para este caso.

#### Variables de decisión y sus límites

- **Temperatura del reactor:** el reactor se refrigera con vapor a 160°C, por lo que la temperatura de operación deberá superar esta temperatura lo suficiente como para ofrecer un área de intercambio de calor realizable. En cuanto al límite superior, en la literatura (Turton, 1998) se recomienda que los reactores altamente exotérmicos refrigerados con vapor de agua no superen los 300°C, por lo que la temperatura en el caso base será el límite superior.
- **Volumen de reacción:** el volumen de reacción mínimo se establece el del caso base (80 m<sup>3</sup>). En cuanto al volumen de reacción máximo, no existen restricciones y se estudiará la factibilidad en secciones posteriores. En todo caso, el volumen máximo de cada reactor debe respetar el límite ofrecido por Turton (Tabla 6) y esto se tendrá en cuenta durante los cálculos.
- **Flujo molar de vapor entrante:** por la restricción 1, el caudal de vapor mínimo debe ser de 4 veces el caudal de propileno de entrada al reactor. Como la cantidad de propileno necesaria se calcula mediante iteración para cada escenario, el límite inferior del flujo molar de vapor será variable en cada uno de estos escenarios. El límite superior se establece el valor del caso base (992,3 kmol/h), buscando una reducción de los costes.
- **Flujo de aire entrante:** según la restricción 2, la concentración de oxígeno en el reactor no deberá ser superior a 5 % mol (Turton, 1998). Esta concentración fijará el límite máximo para esta variable en las condiciones de cada escenario. Para establecer el límite inferior, se considera que el 100% del propileno reacciona y la selectividad del ácido acrílico es máxima (no se forman subproductos). Mediante estequiometría se obtiene que la cantidad de oxígeno debería ser 1,5 veces la cantidad de propileno y, teniendo en cuenta la composición del aire, se puede obtener el Flujo molar de aire mínimo.

## Restricciones del diseño

En cuanto a las **restricciones del diseño**, en todos los sistemas hay algunas condiciones cuyo cumplimiento debe garantizarse. En esta optimización deben cumplirse las siguientes condiciones:

1. Se debe tener en cuenta que la mezcla de propileno, ácido acrílico y oxígeno a elevada temperatura puede dar lugar a ignición. Turton (1998) propone mantener la concentración de oxígeno en el reactor por debajo de 5% mol para evitar estos problemas. Se toma este límite como restricción en este diseño.
2. Por otra parte, para asegurar que se evita la desactivación del catalizador por formación de coque, se establece que el caudal de vapor mínimo debe ser de 4 veces el caudal de propileno. (West Virginia University, 2016).

## 3.5. Análisis del caso base y estudio de sensibilidad

En la Tabla 8 se muestra el desglose de los resultados de la estimación económica para el caso base. En la Figura 15 se comparan el coste anual de operación (*OPEX*), con el capital de inversión (*CAPEX*), observándose un impacto mucho mayor del *OPEX* en la F.O.

Tabla 8. Resultados del estudio económico en el caso base

<b>F.O. (M\$/año)</b>	70,72
Valor productos (M\$/año)	124,43
Precio AA (M\$/año)	120,15
Precio ACE (M\$/año)	4,28
<b>OPEX</b>	52,50
Coste PP (M\$/año)	48,65
Coste Vapor (M\$/año)	1,84
Coste Compresión (M\$/año)	2,01
<b>CAPEX 10 años (M\$/año)</b>	1,21
Coste Reactores (M\$)	2,03
Coste HX(M\$)	5,84
Coste Compresores(M\$)	4,25



Figura 15. Comparación entre CAPEX y OPEX

En cuanto al *OPEX*, el coste más relevante es el del propileno que representa más de un 90% del total (Figura 16, dcha.). El coste de vapor refrigerante y el coste energético de la compresión del aire atmosférico comparten la cuota restante de *OPEX* en proporciones similares.

En cuanto al *CAPEX*, el coste está más distribuido, aunque destaca el coste del intercambiador de calor interno (*HX*) que representa casi la mitad del coste de equipos (Figura 16, izda.). Por detrás del intercambiador de calor, se encuentran los compresores y los reactores por orden de importancia.

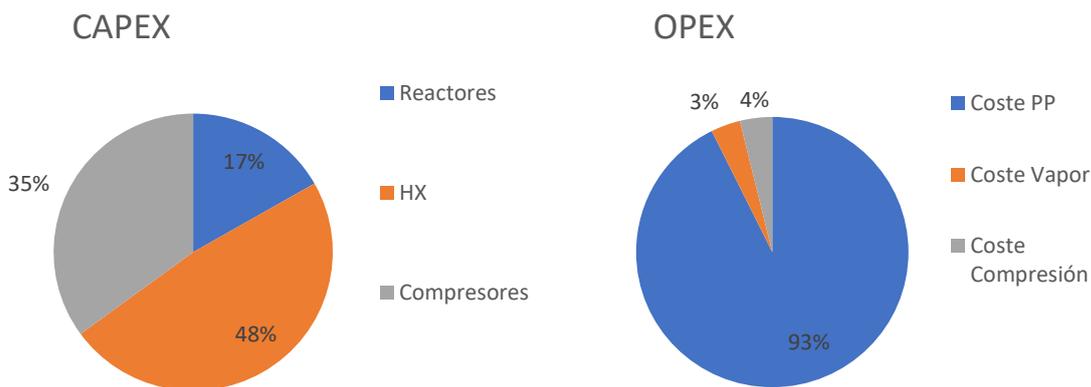


Figura 16. Desglose de los costes en el caso base

A continuación, se va a evaluar la **sensibilidad** de la F.O. para cada variable de decisión.

La sensibilidad de una función se puede definir como la medida en que la alteración de una variable afecta a dicha función. Hay diferentes métodos numéricos para medir esta sensibilidad, pero una forma común de hacerlo experimentalmente es evaluar la función en los límites de la variable. Esta es una técnica estándar de diseño experimental que resulta de gran ayuda para elegir y ordenar variables de decisión clave.

Con la facilidad que ofrecen los actuales simuladores y programas de cálculo, en este trabajo se compara la sensibilidad de la F.O. ante un incremento del 1% respecto al caso base en cada una de las cuatro variables de decisión. Las condiciones del caso base actúan como límite superior o inferior de las variables de decisión, como se indica en la sección 3.4. En los casos en los que el valor del caso base es el límite superior de una variable de decisión, el incremento para estudiar la sensibilidad será del -1%. Si por el contrario actúa como límite inferior, el incremento será de +1%. La ecuación que se sigue para calcular la sensibilidad (*S*) frente a cambios en las variables de decisión (*v.d.*) es la siguiente:

$$S = \frac{\Delta F.O.}{\Delta v.d.} \quad [3.5.1]$$

Las variables de decisión en este caso son la temperatura del reactor, el volumen de reacción, el flujo molar de aire de entrada al reactor y el flujo molar de vapor de entrada al reactor y se evalúa la sensibilidad ante cada una de ellas por separado.

Siguiendo el resultado del análisis de la sensibilidad, mostrado en la Figura 17, se establece el orden que se va a seguir en la optimización de las variables de decisión.

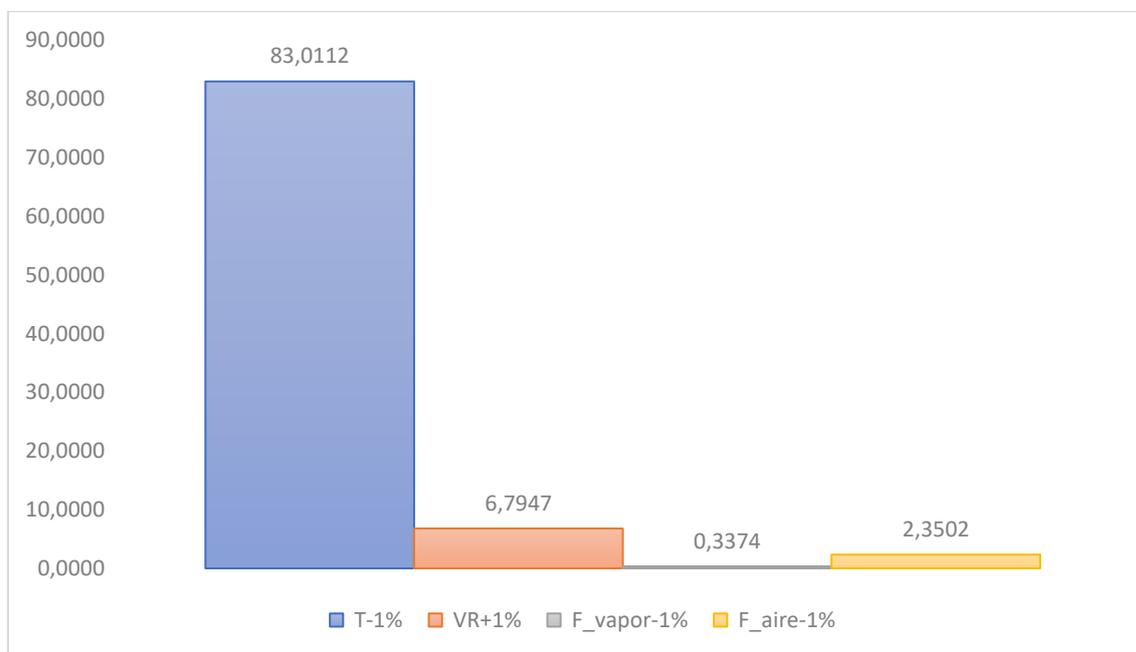


Figura 17. Análisis de la sensibilidad de la F.O. para cada variable de decisión

Así pues, el orden será el que sigue: primero, se elegirá el rango de temperatura del reactor óptimo; después, se decidirá el mejor volumen de reacción; en tercer lugar, se optimizará el caudal molar de aire alimentado; por último, se fijará el caudal molar óptimo de vapor alimentado al reactor.

### 3.6. Proceso de optimización

Siguiendo el estudio de sensibilidad de la sección 3.5, para la optimización de la primera variable se mantendrán el resto de las condiciones del caso base y se estudiará el impacto de la temperatura. Para la segunda, se mantendrán todas las condiciones del caso base excepto la temperatura, que ya habrá sido optimizada, y se estudiará el impacto de VR. Con esta misma idea se procederá con la tercera y la cuarta variable para estudiar su impacto, incorporando el valor optimizado de las variables ya analizadas y manteniendo el resto de las condiciones del caso base. En realidad, se trata de 4 optimizaciones consecutivas, cada vez de una variable, para poder facilitar la comprensión de los resultados.

En cuanto a la restricción 1, la concentración de oxígeno en el reactor se estudiará en cada paso de la optimización. El cumplimiento debe asegurarse en cada paso del procedimiento.

En cuanto a la restricción 2, la relación vapor/propileno en el caudal molar de entrada al reactor no se ve alterada hasta modificar la variable Caudal molar de vapor, por lo que únicamente se verificará el cumplimiento en ese paso de la optimización.

### 3.6.1. Temperatura

Para elegir el rango de temperatura del reactor óptimo, se estudia su influencia sobre la F.O. Para ello, se parte de las condiciones de operación del caso base (sección 3.1) y se realiza el cálculo completo de una serie de escenarios, diferenciados únicamente por una temperatura del reactor distinta. Esta temperatura está contenida entre los límites definidos en la subsección 3.4 (175 y 300°C).

En la Figura 18 (izquierda) se representa gráficamente la evolución de la selectividad relativa de los productos con la variación de la temperatura del reactor. En la Tabla 1 se observa que la generación de ácido acrílico presenta la energía de activación más baja, hecho que justifica el incremento de su selectividad relativa a los subproductos para las temperaturas más bajas. Es especialmente importante evitar la conversión de Propileno en CO<sub>2</sub>, que significa una pérdida directa de materia prima, al carecer de valor comercial.

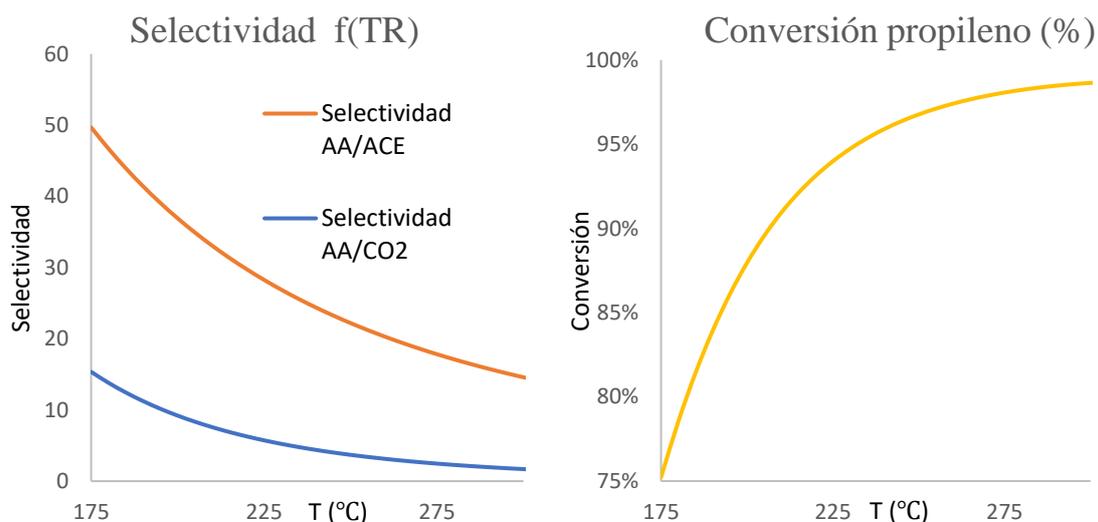


Figura 18. Selectividad relativa y conversión del propileno frente a la temperatura del reactor

Como contrapartida al aumento de la selectividad del ácido acrílico, en la Figura 18 (derecha) se observa que la conversión de propileno desciende drásticamente a las temperaturas más bajas. Este hecho demuestra la dificultad de encontrar un diseño que maximice el beneficio económico sin realizar un estudio cuantitativo.

Teniendo en cuenta estas consideraciones, el diseño óptimo deberá ofrecer un equilibrio entre conversión y selectividad. En la Figura 20 se representa la evolución de los costes según la temperatura del reactor operada. En ella se observa:

- Para las temperaturas más bajas, el descenso drástico de la conversión de propileno requiere un mayor consumo de materia prima y eleva el coste de

operación (Figura 20, izq.) para alcanzar la producción deseada. Por otra parte, cuando la temperatura es demasiado alta, el descenso en la selectividad provoca igualmente el incremento en el consumo de propileno, a pesar de la elevada conversión de propileno lograda.

- En cuanto al CAPEX (Figura 20, dcha.), aumenta para las temperaturas más bajas. Esto se debe a la mayor superficie de intercambio de calor requerida por la espiral de refrigeración del reactor.

La curva de beneficio frente a la temperatura (Figura 19) muestra su máximo para 245°C si el resto de las condiciones se mantuviesen las del caso base. Además, en la Figura 21 se observa que no se rebasa la restricción en la concentración de oxígeno en el reactor. Por lo tanto, se pasa a estudiar la influencia del volumen fijando la temperatura al valor de 245°C.

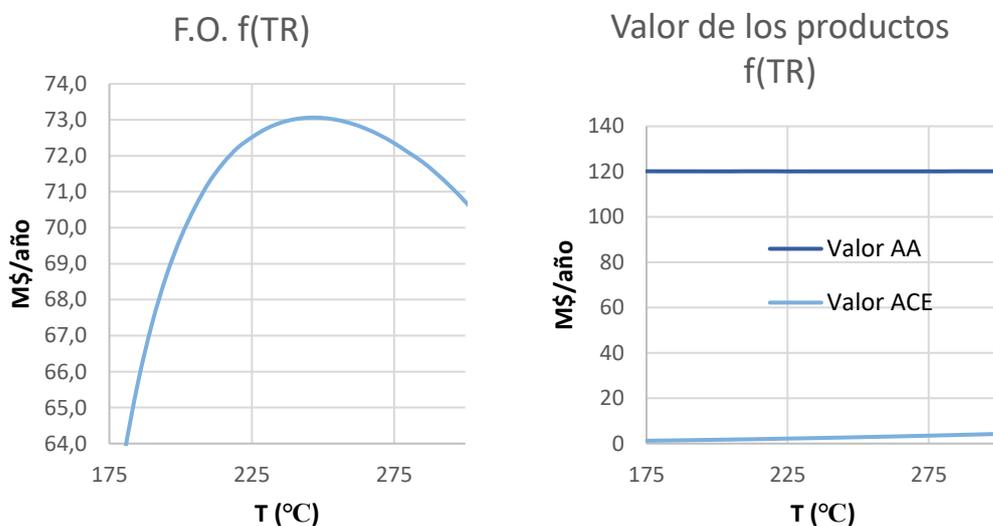


Figura 19. Influencia de la temperatura en la F.O. y el valor de los productos

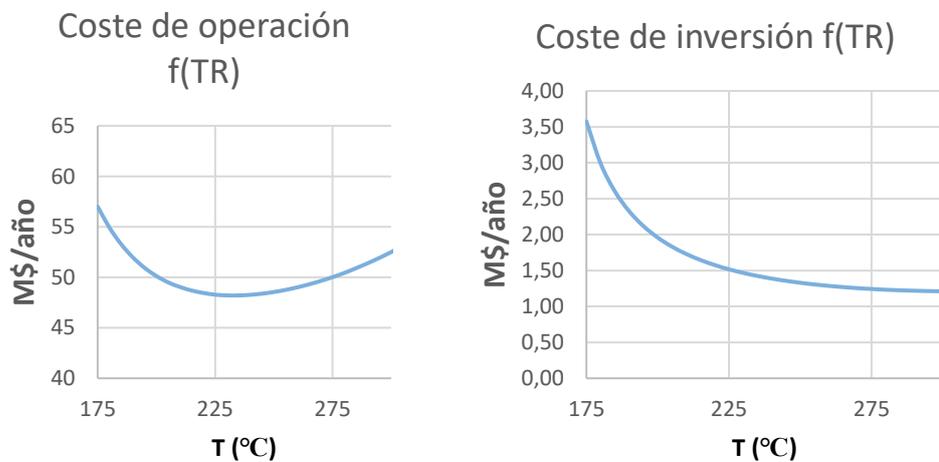


Figura 20. Influencia de la temperatura en los costes

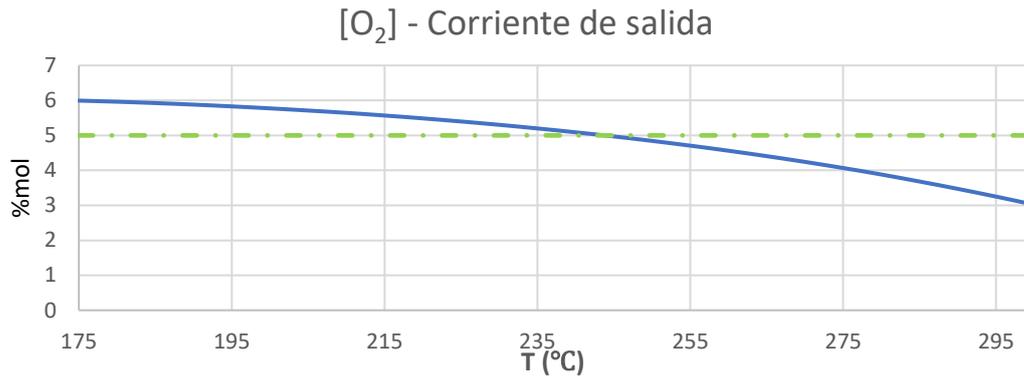


Figura 21. Influencia de la temperatura en la concentración de oxígeno

### 3.6.2. Volumen del Reactor

Para la elección del volumen de reacción óptimo, se imita el procedimiento descrito en el apartado anterior (véase apartado 3.6.1). Esto es, se realiza el cálculo completo de una serie de escenarios basados en las condiciones de operación del caso base y, ahora, en la temperatura óptima elegida el apartado anterior, 245 °C.

En la Figura 22 se representa la evolución de la F.O. con el incremento del VR desde el caso base (80 m<sup>3</sup>) hasta 880 m<sup>3</sup>. En esta figura se observa que el VR óptimo son 280 m<sup>3</sup>.

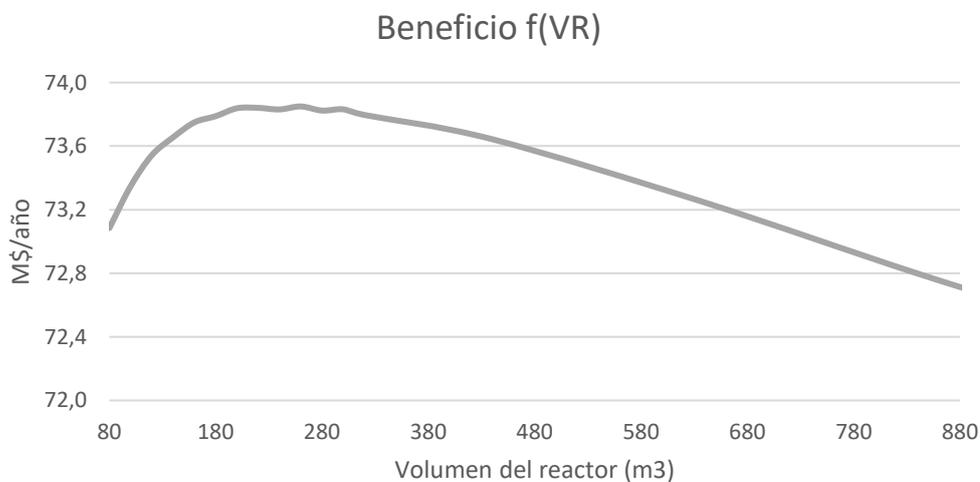


Figura 22. Influencia de VR en la función objetivo

Para volúmenes menores al óptimo, la escasa conversión de propileno (Figura 23) genera un aumento significativo en el coste de operación debido al mayor consumo de materia prima, necesario para asegurar la producción de ácido acrílico deseada. En la Figura 24 (izq.) se observa la repercusión en el coste de operación que tiene el descenso de la conversión para VR pequeños.

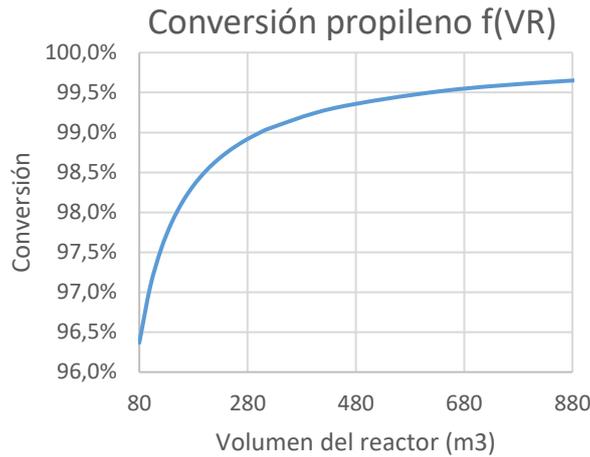


Figura 23. Influencia de VR en la conversión de propileno

Por el contrario, cuando VR toma los valores más altos, el coste de inversión aumenta considerablemente. Esto se debe al incremento de coste que trae aparejado un aumento en VR que se traduce en mayor número de reactores necesarios.

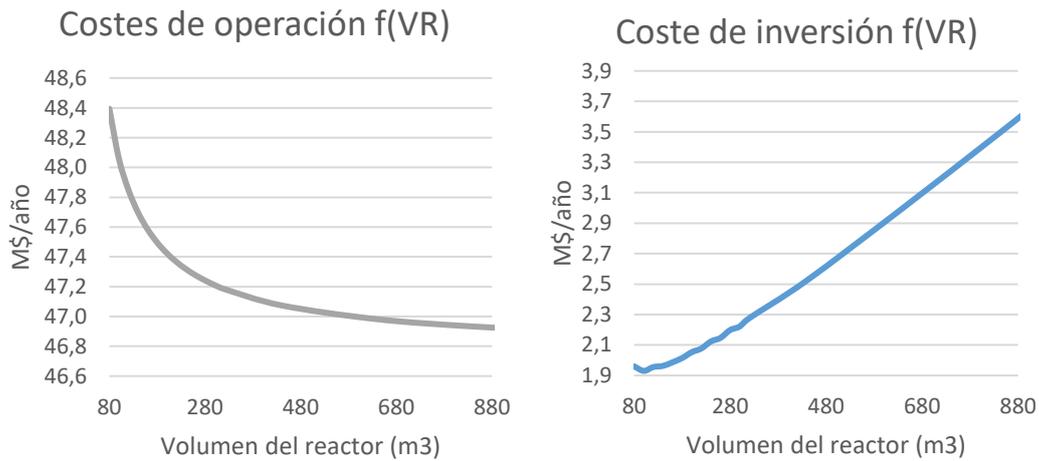


Figura 24. Influencia de VR en los costes

En cuanto a la restricción en la concentración de oxígeno en el reactor, en la Figura 25 se comprueba que la variación en VR no causa un impacto significativo en dicha concentración y se cumple en todo momento el límite superior de 5 % mol.

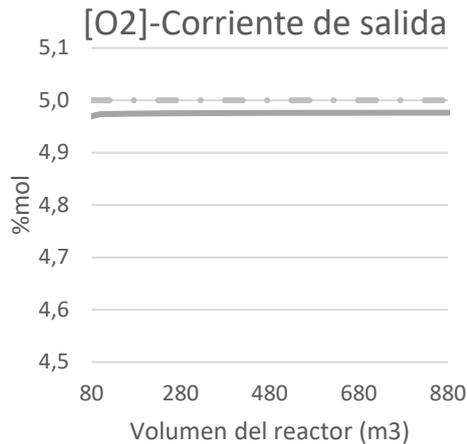


Figura 25. Influencia de VR en la concentración de oxígeno

### 3.6.3. Caudal molar de aire alimentado

Con TR y VR ahora optimizados (apartados 3.6.1 y 3.6.2), se pasa a repetir el procedimiento ahora para el caudal molar de aire alimentado ( $F_{\text{aire}}$ ). Los distintos escenarios presentarán valores del caudal de molar de aire entre el valor del caso base y el límite inferior (1362 y 750 kmol/h, respectivamente).

El caudal molar de aire de entrada al reactor contiene el oxígeno necesario para llevar a cabo las reacciones. Caudales insuficientes dificultan la conversión de propileno y el exceso de oxígeno la facilita. Por otra parte, el aumento del aire alimentado repercute en los costes de operación, mediante el coste energético de su compresión y el coste de inversión por el tamaño del compresor requerido.

En la Figura 26 (izq.) se muestra la evolución de la F.O. con la variación del caudal molar de aire entrante. Se observa que a partir de 850 kmol/h se estabiliza el beneficio en torno a los 74 M\$/año. Al comparar la evolución de la F.O. con la curva de conversión de PP frente a  $F_{\text{aire}}$ , se observa una clara correspondencia entre ambas. Es decir, para caudales

de aire menores a 850 se dificulta notablemente la conversión y se evidencia el descenso aparejado en la F.O.

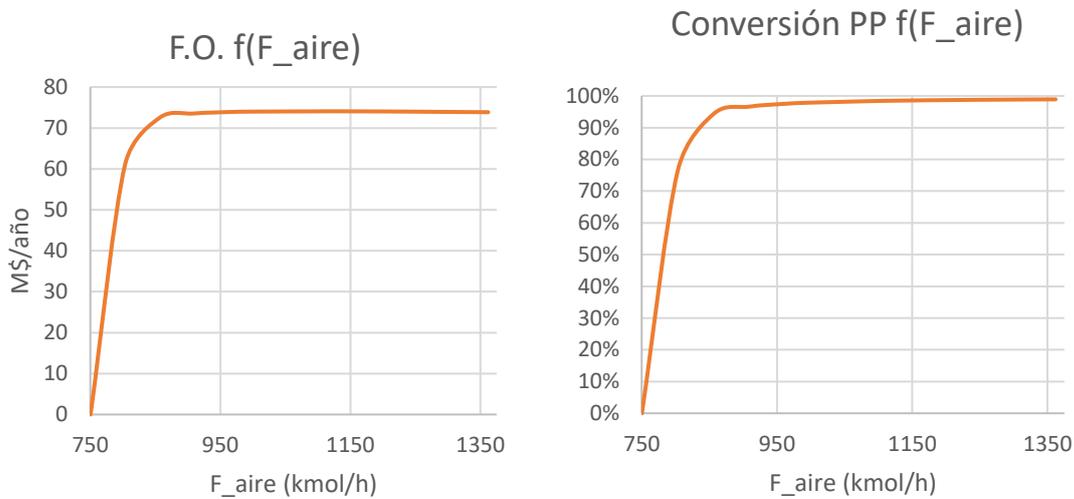


Figura 26. Influencia del caudal molar de aire en la F.O. y en la conversión de PP

En la Figura 27 (izq.) se puede observar una clara dependencia inversa entre conversión y coste de operación. Para caudales pequeños de aire alimentado, la falta de oxígeno dificulta la conversión y se ha de aumentar el caudal de propileno introducido al reactor con su correspondiente coste. Por otra parte, el coste de inversión (Figura 27) aumenta linealmente entre 1,5 y 1,7 M\$/año como resultado de aumentar la cantidad de compresores necesarios para satisfacer toda la potencia de compresión.

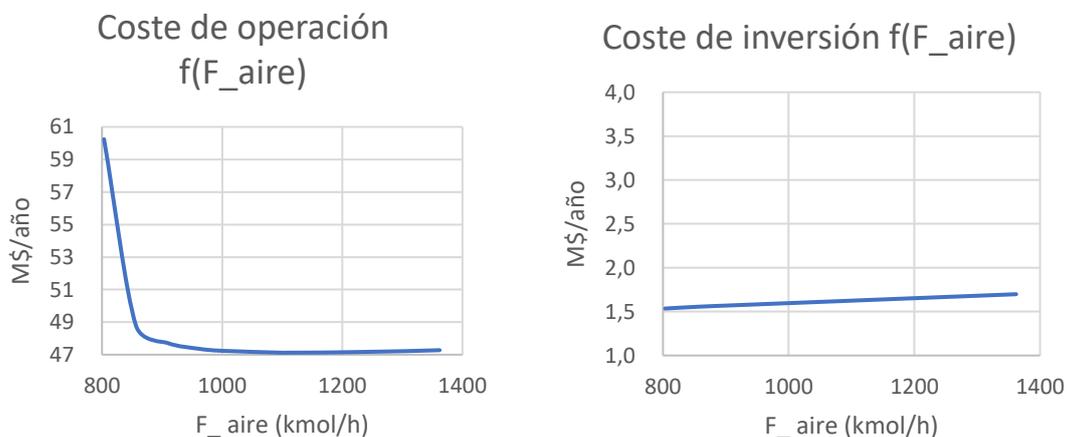


Figura 27. Evolución de los costes frente a  $F_{aire}$

El máximo de la F.O. (Figura 26) está exactamente en 74,08 M\$/año para un  $F_{aire}$  de 1120 kmol/h de aire alimentado, pero es necesario estudiar si el límite de 5% mol de oxígeno a la salida del reactor se cumple. En la Figura 28 se comprueba que el valor óptimo cumple holgadamente con este límite (situado en los 1120 kmol/h) y propicia una concentración de oxígeno a la salida del reactor de 3,18 % mol.

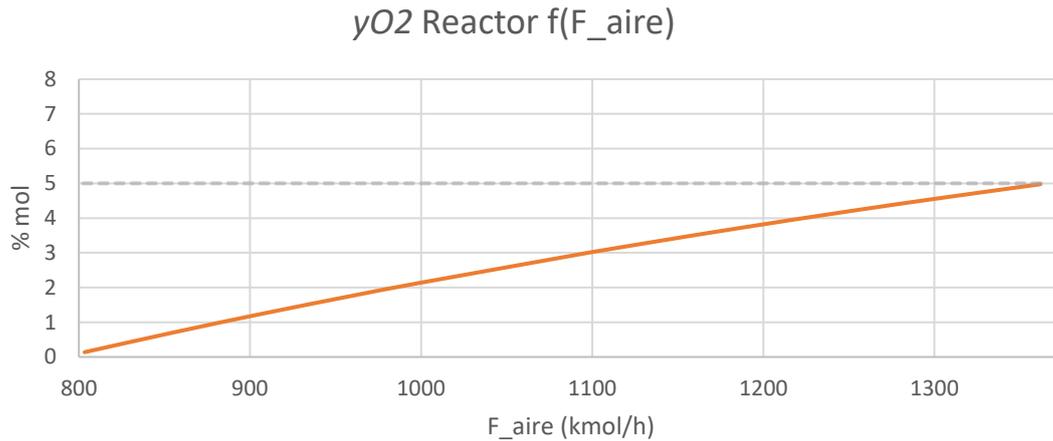


Figura 28. Influencia del caudal molar de aire en la concentración de oxígeno a la salida

### 3.6.4. Caudal molar de vapor alimentado al reactor

Se repite el procedimiento de optimización (sección 3.6) por última vez, con las tres variables de decisión ya optimizadas. Entonces, el conjunto de escenarios calculados mantiene las condiciones de operación del caso base exceptuando las tres variables de decisión que ya han sido optimizadas el caudal molar de vapor alimentado al reactor ( $F_{\text{vapor}}$ ) entre los límites descritos en el apartado 3.4.

Como se explica en la sección 3.1, el vapor introducido actúa como sumidero de calor, evita la formación de coque en el reactor y reduce la concentración de oxígeno a la salida del reactor, disminuyendo el riesgo de deflagración. El límite inferior se establece en 4 veces el caudal molar de propileno (390 kmol/h en estas condiciones de operación) y el límite superior es el caudal del caso base.

En la Figura 29 se puede verificar que la F.O. se maximiza en el límite inferior de operación del caudal molar de vapor. Esto se debe principalmente a que disminuir el caudal molar de vapor propicia concentraciones de los reactantes más altas, por lo que se reduce la aportación necesaria de propileno para conseguir la producción de ácido acrílico deseada. La reducción de coste de propileno se muestra en la Figura 30, y se puede observar que esta reducción (unos 1,4 M\$) es equivalente al incremento en el beneficio. En cuanto al coste de inversión, esta variable de decisión no tiene un impacto relevante en la evolución de la F.O.

Por lo tanto, se concluye que el caudal molar de vapor alimentado óptimo es el mínimo posible. En cuanto a la restricción de concentración máxima de oxígeno en el reactor (1), en la Figura 31 se comprueba que todo el rango de caudal estudiado cumple el límite superior de 5 % mol.

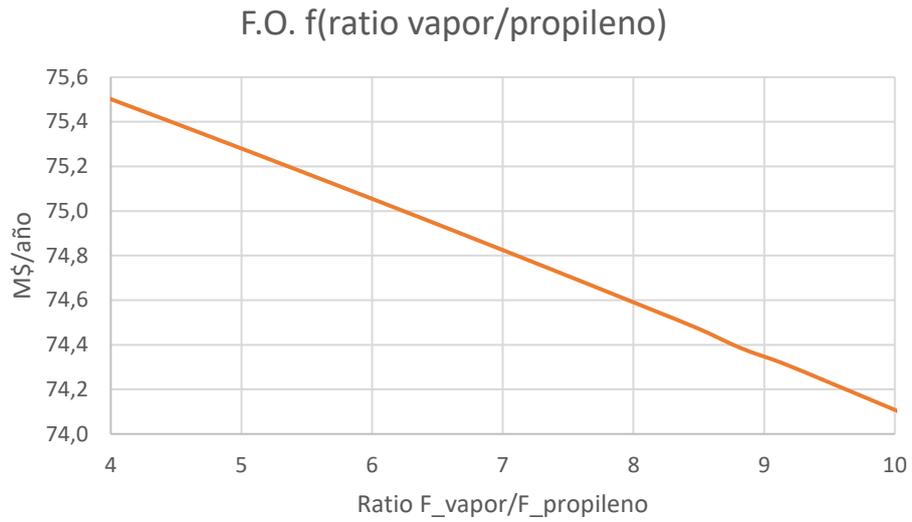


Figura 29. Influencia del caudal molar de vapor entrante en la F.O.

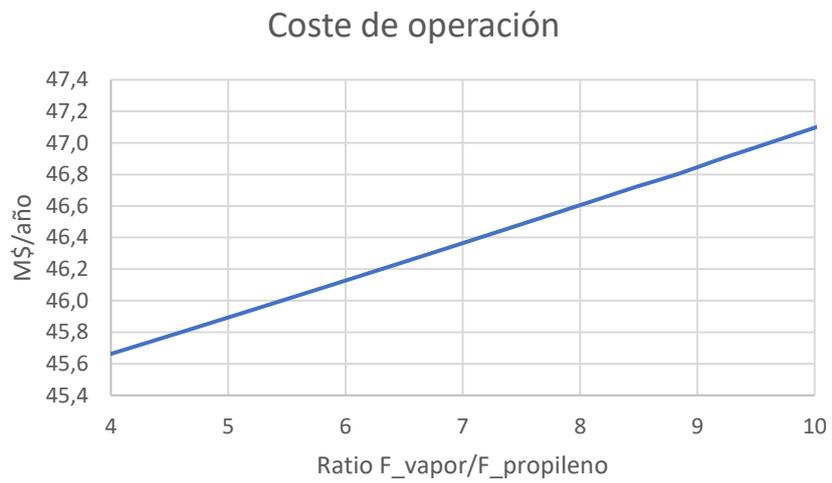


Figura 30. Influencia del caudal molar de vapor en los costes de operación

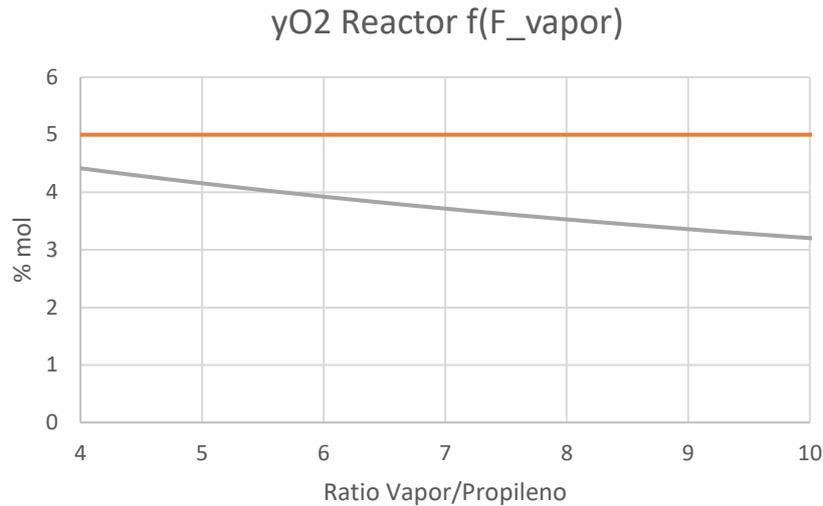


Figura 31. Influencia del caudal molar de vapor en la concentración de oxígeno

### 3.7. Resultados de la optimización

En la Tabla 9 se muestra el resultado obtenido para la F.O. en cada uno de los cuatro pasos que incluye la optimización de la sección 3.6 y el incremento que supone respecto al valor de la F.O. en el caso base. Esto es el incremento que se va acumulando paso tras paso.

Tabla 9. Resultados de la optimización sobre la F.O.

<b>Paso de la optimización</b>	<b>Beneficio (M\$/año)</b>	<b><math>\Delta F.O.</math> (% frente al caso base)</b>
Caso Base	70,72	
Optimización de TR	73,08	3,3%
Optimización de VR	73,86	4,4%
Optimización de $F_{vapor}$	74,08	4,7%
Optimización de $F_{aire}$	75,51	6,8%

En la Figura 32 se muestra el incremento en la F.O. respecto al valor obtenido en el paso anterior. Las variables con mayor impacto en el valor de la F.O. son  $TR$  y  $F_{vapor}$ . Este resultado puede parecer contrario al análisis de sensibilidad mostrado en la Figura 17, pero hay que remarcar que el rango de la variable de decisión  $F_{vapor}$  es mayor que en las demás variables.

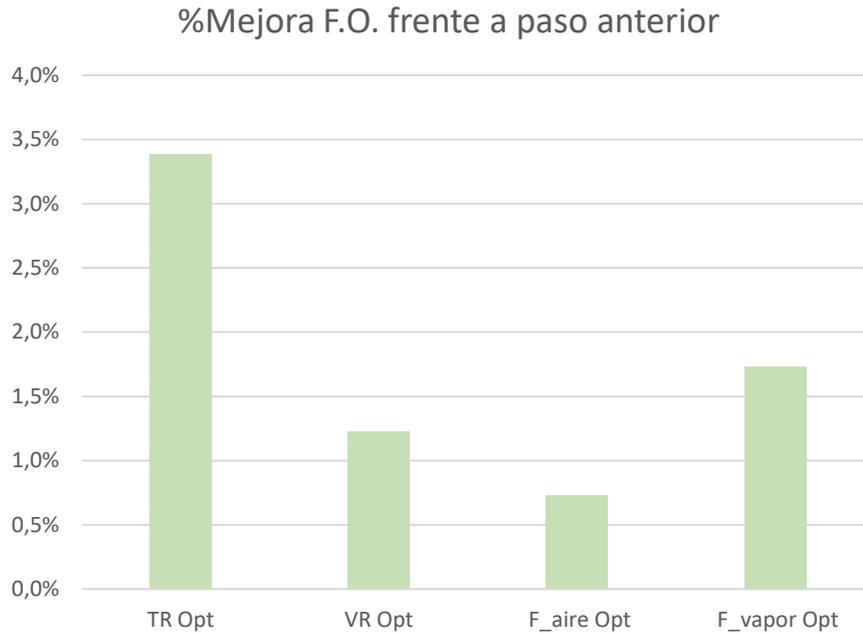


Figura 32. Comparación de la mejora obtenida en la F.O. según variable de decisión

Una vez terminado el procedimiento se puede considerar que el diseño óptimo será un RCTA operado a 245°C y 4,3 bar de presión, con un volumen de reacción 260 m<sup>3</sup> y alimentado por 96,80 kmol/h de propileno, 390 kmol/h de vapor y 1120 kmol/h de aire atmosférico. En la Figura 33 se muestra la resolución de esta etapa en las condiciones óptimas, obtenida en ProMax.

En la Tabla 10, se puede observar las diferencias entre el caso base y las condiciones óptimas de operación. En el caso base la temperatura es 65°C más baja, lo que da lugar a que la selectividad relativa del ácido acrílico frente a sus subproductos (ácido acético y dióxido de carbono) sea más elevada. En consecuencia, el valor total de los productos se ve ligeramente reducido. Como contrapartida, la mayor selectividad va en favor de una menor necesidad de materia prima (propileno).

Por otra parte, el volumen de reacción (VR) aumenta hasta los 260 m<sup>3</sup>, permitiendo que la conversión de propileno aumente un 0,5% hasta llegar al 99,1%. Este hecho reduce igualmente la necesidad de materia prima para alcanzar la producción de ácido acrílico deseada, y se alcanza una reducción de coste de propileno de 5,5 M\$/año. Por contra, el coste de reactores se eleva respecto al caso base, desde 2,03 a 5,88 M\$.

En cuanto a la potencia térmica de la espiral de refrigeración del reactor ( $QH_X$ ), se puede ver que se reduce respecto al caso base. En cambio, al distribuirse la refrigeración entre un mayor número de reactores (3 en el caso base y 8 en el óptimo), el coste total de espirales de refrigeración se ve incrementado desde 5,84 a 7,15 M\$.

El coste de compresores se ve asociado al caudal molar de aire alimentado, que se reduce en el proceso de optimización. Se observa así la disminución del coste de compresores cerca de 0,5 M\$. Igualmente, el coste de operar los compresores se reduce en 0,35 M\$/año respecto al caso base. Además, la reducción del caudal de vapor alimentado causa un ahorro en coste de vapor de 1,12 M\$/año.

Tabla 10. Comparativa de resultados entre caso base y caso óptimo

Parámetro	Caso base	Óptimo
TR (°C)	300,00	245,00
VR (m3)	80,00	260,00
Selectividad AA/ACE	14,60	23,30
Selectividad AA/CO2	1,70	4,00
XPP (%)	98,60	99,10
<b>Alimentación (kmol/h)</b>		
Propileno	109,25	97,23
Vapor	992,30	390,00
Aire	1362,00	1120,00
<b>Productos (kmol/h)</b>		
AA	86,73	86,70
ACE	5,94	3,73
CO2	51,02	21,53
<b>Energía (MW)</b>		
QHX	20,40	17,25
W_C	2,10	1,73
<b>Restricciones</b>		
yO2 (% mol)	3,02	4,41
Vapor/PP	9,09	4,00
<b>Refrigerante</b>		
T <sub>v,0</sub> (°C)	115,00	115,00
T <sub>v</sub> (°C)	160,00	160,00
<b>Estimación económica</b>		
F.O. (M\$/año)	70,72	75,51
Valor productos (M\$/año)	124,43	122,84
Precio_AA (M\$/año)	120,15	120,15
Precio_ACE (M\$/año)	4,28	2,69
OPEX	52,50	45,67
Coste PP (M\$/año)	48,65	43,29
Coste Vapor (M\$/año)	1,84	0,72
Coste Compresión (M\$/año)	2,01	1,65
CAPEX 10 años (M\$/año)	1,21	1,65
Coste nReactores (M\$)	2,03	5,88
Coste nHX(M\$)	5,84	7,15
Coste nCompresores(M\$)	4,25	3,49

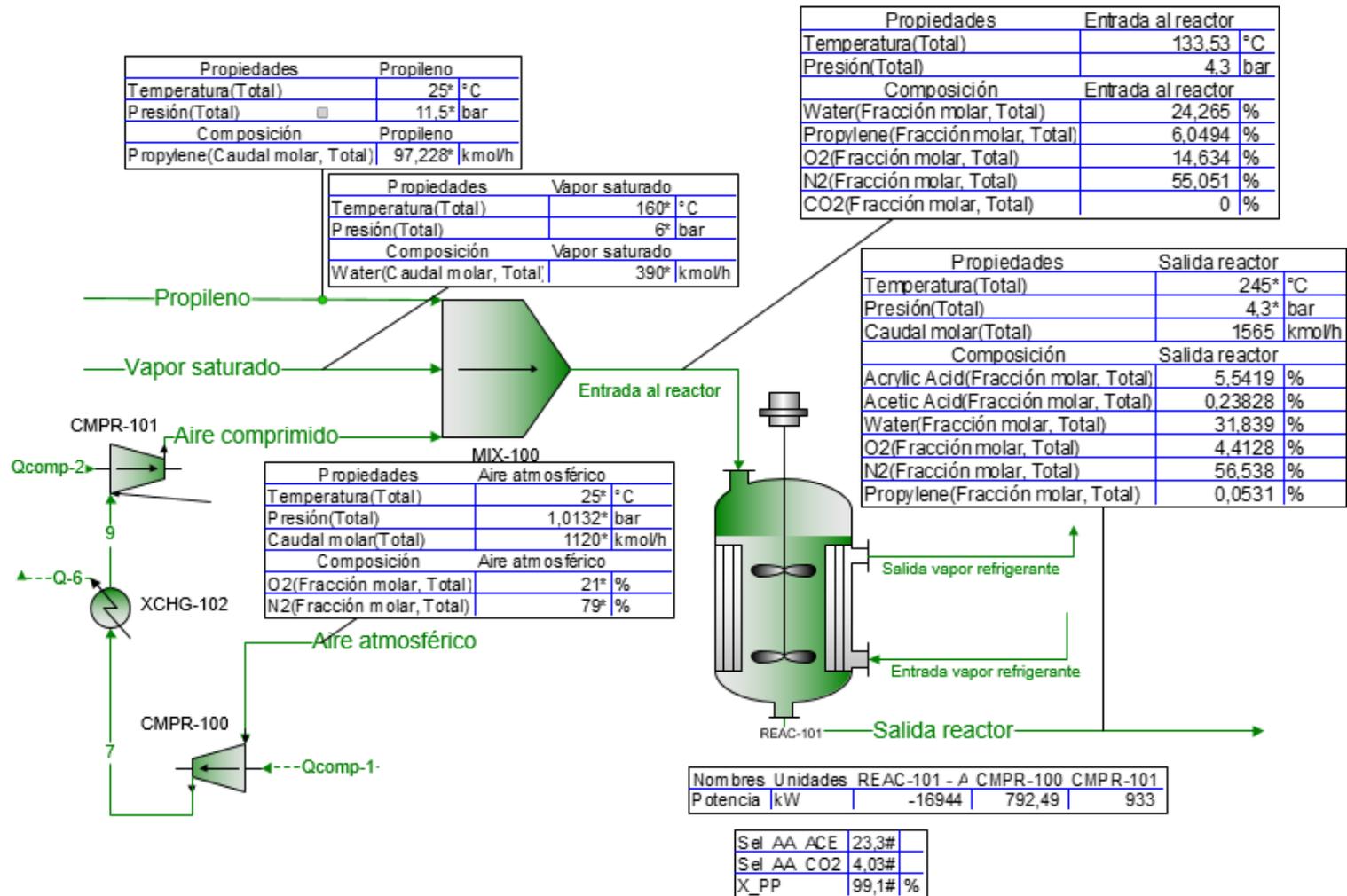


Figura 33. Etapa de reacción en optimizada (Obtenido mediante ProMax)

### 3.8. Trabajo previo

En un primer lugar, en este trabajo se ha intentado aplicar algoritmos de optimización automáticos a este sistema. En concreto, se ha intentado realizar la optimización simultánea de sólo dos variables de decisión (Volumen de reacción y Temperatura de reactor) mediante el algoritmo GRG Nonlinear para comprobar la dificultad de aplicar algoritmos automáticos. Los resultados se muestran en la Tabla 11. Se puede observar que los resultados de aplicar el algoritmo para encontrar las condiciones que maximizan la F.O. no son en absoluto concluyentes. El proceso aumenta de complejidad cuando se introducen más variables de decisión.

*Tabla 11. Resultado de la aplicación de algoritmos iterativos*

<b>Parámetro</b>	<b>Condiciones iniciales (Caso base)</b>	<b>Resultados caso 1</b>	<b>Condiciones iniciales 2</b>	<b>Resultados caso 2</b>
<b><i>F_PP</i> (kmol/h)</b>	112,2	112,18	96	96,03
<b><i>TR</i> (°C)</b>	310	310	230	233,53
<b><i>VR</i> (m3)</b>	80,58	80,58	300,13	80,58
<b>F.O. (M\$/año)</b>	70,09	70,08	74,66	70,47

Tras comprobar la dificultad de resolver esta optimización mediante algoritmos de optimización, se ha buscado una metodología más sencilla que permite obtener resultados.

## 4. Diseño del tren de separación posterior

El objetivo de este apartado es dotar al proceso de un tren de separación que permita realizar una estimación de costes válida del proceso completo. Es importante recalcar que estos equipos no han sido optimizados, a diferencia de los equipos de la etapa reactiva.

La polimerización del ácido acrílico es muy exotérmica. Por ello, deben añadirse aditivos durante su almacenamiento para poder evitarla. Además, en altas concentraciones dimeriza a partir de los 90°C por lo que las etapas de purificación se suelen realizar en condiciones de alto vacío. A 0,265 bar, la temperatura de polimerización del ácido acrílico asciende hasta los 110°C por lo que se utilizará estas condiciones en el fondo de las columnas de separación y purificación. (Suo et al.,2015)

### 4.1. Restricciones en el diseño de los equipos

Se pretende replicar el diseño del tren de separación realizado por Chien, Yu & Lee (2017), representado en la Figura 4. Las restricciones que estos autores aplican en su diseño son las siguientes:

- Tanque Flash. Se opera a 4,3 bar y 47°C.
- Absorbedor de gases. El caudal de agua entrante y el número de etapas se ajusta para conseguir una recuperación del 99,9% de ácido acrílico.
- Columna de destilación. Se pretende que la recuperación de ácidos en el fondo de la columna sea mayor que el 99,5%. Además, el agua debe salir por el retiro del condensador a una concentración de al menos 99% mol. Se utiliza una columna de 42 etapas con condensador parcial (para eliminar los gases disueltos) y retiro, para extraer el agua. También incluirá calderín.

En los equipos de las etapas de separación no se tiene en cuenta la depuración de la corriente de agua contaminada y el tratamiento de los gases emitidos.

Tabla 12. Especificaciones para los equipos del tren de separación (Chien, Yu, & Lee, 2017)

Equipo	Especificación	Descripción
Tanque flash	4,3 bar y 47°C	-
Absorbedor	99,9 %	Recuperación de AA
Columna de destilación	99,5 % mol	Recuperación de ácidos en líquido de fondo
	99 % mol agua	Líquido destilado
	0,1 % mol	Fracción de vapor en el condensador

## 4.2. Dimensionamiento de los equipos

Para el dimensionamiento de los equipos de etapas posteriores, se utilizan las funciones de dimensionamiento de equipos de ProMax.

- El tanque Flash se dimensionará para que tenga un tiempo de residencia de 5 min de fase líquida. Para el separador bifásico, ProMax calcula los parámetros siguiendo la ecuación de Souders-Brown, que se basa en el cálculo de la velocidad mínima del gas en el tanque, a partir del caudal volumétrico de alimentación.
- Para la columna de absorción, se tomará una fracción de inundación del 80%, valor típico aconsejado por ProMax. El relleno se establece que será del tipo aleatorio y estará formado por Anillos Pal metálicos de 2 pulgadas (5 cm). Para estimar la altura se consideran 2 metros por cada etapa.
- Para la columna de platos, se utilizarán platos perforados para mayor simplicidad en el cálculo con ProMax. Se elige una fracción de inundación del 80%, una separación de 0,6 metros (2 pies) entre platos y la altura del rebosadero se establece en 5 cm (Chien, Yu, & Lee, 2017). La altura de la columna se obtiene mediante la multiplicación del espaciamiento entre platos y el número de etapas a través de ProMax, mientras que el diámetro es calculado internamente por el simulador en función de la separación entre platos, la altura del rebosadero y la fracción de inundación. Para la estimación del coste se necesita el volumen de la columna, que se calculará con el diámetro medio y la altura de la columna. Se utiliza un coeficiente global de transferencia de calor de  $0,852 \text{ kW/m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$  para el condensador y  $0,568 \text{ kW/m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$  para el calderín. El condensador se refrigera con agua a  $25^\circ\text{C}$  y 1,012 bar. El calderín se calienta con vapor obtenido de refrigerar el reactor, a  $160^\circ\text{C}$  y 1,5 bar.

## 4.3. Resultados del tren de separación

En la Figura 34 se muestra la simulación en ProMax del tren de separación elegido.

La torre de absorción (DTWR) obtenida consta de 15 etapas y una alimentación de agua de 50 kmol/h para conseguir una recuperación de AA del 94%. Esta recuperación está por debajo de la que pretende el diseño inicial, pero se considera suficiente para poder establecer una estimación de costes.

Además, se ha conseguido obtener una corriente de AA casi al 100 % mol en el líquido de fondo de la columna de destilación (DTWR-101). Con este resultado se evita diseñar una segunda columna para separar el AA del ACE, como ocurre en el resto de diseños de trenes de separación para este proceso productivo (ver apartado 1.4.3). Este hecho se debe, en parte, a que el diseño óptimo de la etapa reactiva ofrece una alta selectividad relativa AA/ACE que reduce mucho la cantidad de subproductos. En cualquier caso, la cantidad de ácidos que no se consigue recuperar será contada como coste operativo en el estudio económico.

La recuperación de ácidos, que en este tren de separación es del 95,5 % mol, se podría mejorar, pero el alcance de este trabajo no permite la optimización de estos equipos.

La corriente de retiro de líquido del destilado con una pureza del 98,5 % mol de agua requiere un tratamiento previo a su vertido, pero no se considera en este trabajo. Lo mismo ocurre con la corriente de gas destilado.

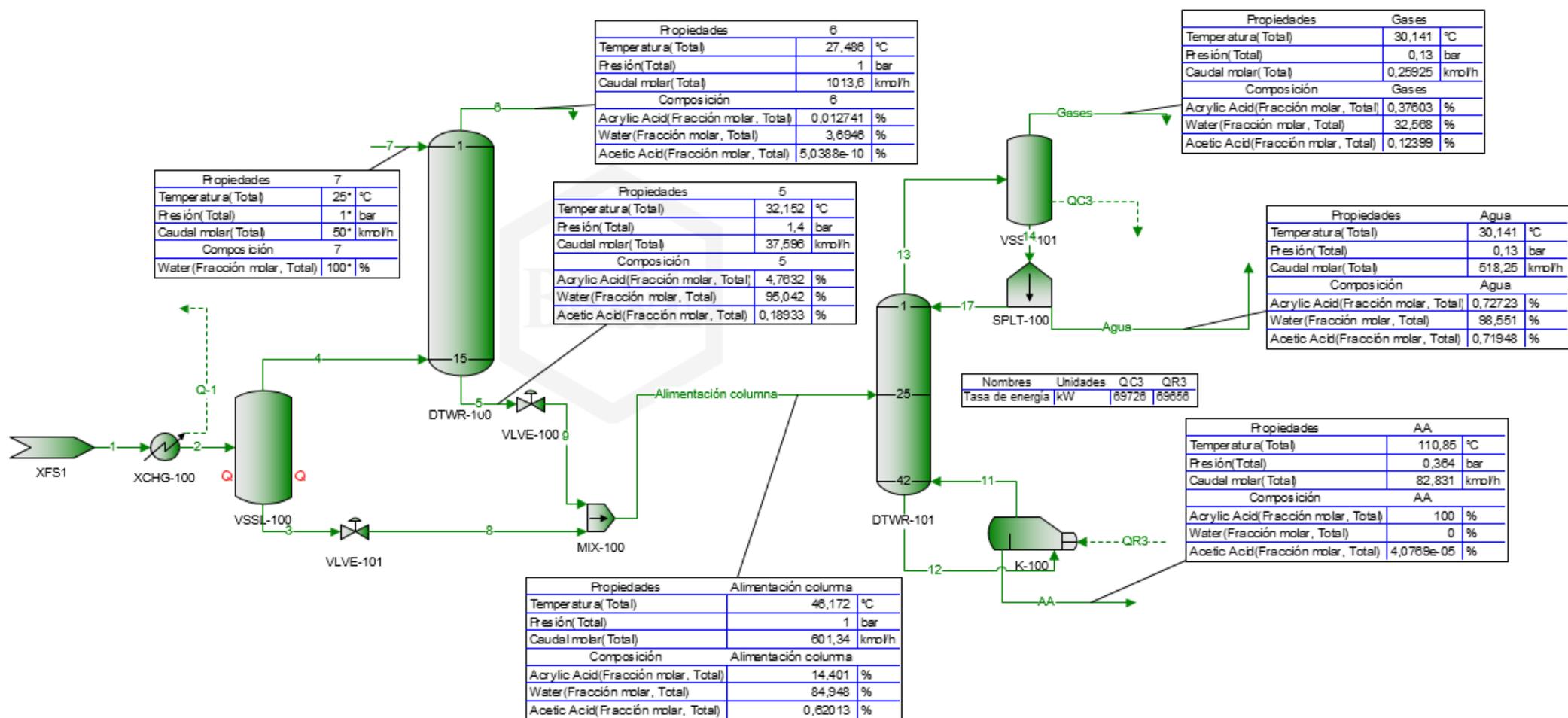


Figura 34. Diagrama de proceso del tren de separación diseñado

## 5. Estudio económico completo

Este estudio económico completo incluye el cálculo preliminar del capital de inversión y el coste de operación (costes fijos y variables).

### 5.1. Capital de inversión

Para hallar el valor del capital total de inversión se sigue el procedimiento que se detalla a continuación. Los pasos a seguir se esquetizan en la Figura 35.

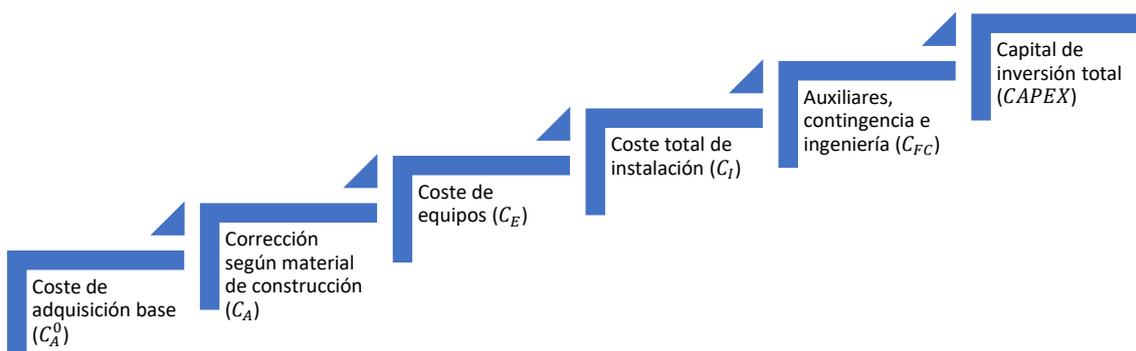


Figura 35. Esquema para la estimación del capital de inversión

1. Se obtiene el coste de adquisición base de cada equipo del proceso ( $C_{A,n}^0$ ) que refleja el coste de un equipo construido de acero al carbono y para trabajar en condiciones atmosféricas. Para calcular este coste en los equipos del tren de separación se hace uso de las constantes presentadas en la Tabla 13. Para los equipos de la etapa de reacción se estima en el apartado 3.3.4.
2. Con  $C_{A,n}^0$  calculado, se aplica la ecuación [3.3.25] con los valores de las constantes mostrados en la Tabla 14 para los equipos del tren de separación. Con ello se tiene el coste de adquisición de cada equipo ( $C_{A,n}$ ) que incluye los efectos del material utilizado en la construcción y la presión de diseño en el coste del equipo. Para los equipos de la etapa de reacción se estima en el apartado 3.3.4.
3. Una vez se tiene el coste de adquisición de cada equipo ( $C_{A,n}$ ), se utiliza el CEPCI de 2016 para actualizar el valor de los equipos reapplicando la ecuación [3.3.27]. De esta forma se obtiene el coste total de cada equipo ( $C_{E,n}$ ). Para los equipos de la etapa de reacción este paso ya se ha realizado en el apartado 3.3.4.

Tabla 13. Constantes para la curva de estimación del coste de adquisición base en etapas downstream (Turton, 1998)

Descripción del equipo	$K_1$	$K_2$	$K_3$	Capacidad, Unidades	Lim. inferior	Lim. superior
Columna de platos o empacada	3,4974	0,4485	0,1074	Volumen, m <sup>3</sup>	0,3	520
Intercambiador carcasa y tubos (condensador y calderín)	4,2768	-0,0495	0,1431	Area, m <sup>2</sup>	10	1.000
Tanque Flash	4,8509	-0,3973	0,1445	Volumen, m <sup>3</sup>	90	30.000

Tabla 14. Constantes para la curva de estimación del coste de adquisición en el tren de separación (Turton, 1998)

Descripción del equipo	$B_1$	$B_2$	$f_p$	$f_m$
Columna de platos o empacada	2,25	1,82	1	3,1
Intercambiador carcasa y tubos (condensador y calderín)	1,62	1,66	1	2,8
Tanque Flash	1,49	1,52	1	3,1

4. A partir de coste de un equipo ( $C_{E,n}$ ), según Hand (1958), se puede obtener el coste de instalación ( $C_{I,n}$ ) para equipo en una planta de fluidos, mediante la ecuación [5.1.1].

$$C_{I,n} = \sum C_{E,n}((1 + f_t)f_m + (f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_i)) \quad [5.1.1]$$

En esta fórmula se consideran los factores de instalación que corrigen el coste de cada equipo ( $n$ ), construidos en acero al carbono. Siguiendo bibliografía, se define el valor de estos factores para una planta que trabaja con fluidos (

Tabla 15).

Tabla 15. Factores de instalación utilizados en la estimación de costes (Fuente: Hand, 1958)

Factor	Valor	Descripción
$f_t$	0,8	factor de instalación para tuberías
$f_m$	1,3	factor de material para acero inoxidable serie 304
$f_{er}$	0,3	factor de instalación para montaje de equipos
$f_{el}$	0,2	factor de instalación para trabajos eléctricos
$f_i$	0,3	factor de instalación para instrumentación y control
$f_c$	0,3	factor de instalación para obras de ingeniería civil
$f_s$	0,2	factor de instalación para estructuras y edificios
$f_l$	0,1	factor de instalación para revestimiento, aislamiento o pintura

El factor de material ( $f_m$ ) en esta ecuación sólo afecta a las tuberías mediante el arreglo de la ecuación [5.1. 1], mostrado en la ecuación [5.1. 2].

$$C_{I,n} = \sum C_{E,n} (1 + f_t f_m + f_{er} + f_{el} + f_i + f_c + f_s + f_l) \quad [5.1. 2]$$

5. Una vez hallado el coste total de instalación de cada equipo de la planta ( $C_{I,n}$ ), se debe contemplar el factor de coste de Off Sites ( $OS$ ), coste de ingeniería ( $D\&E$ ) y coste de contingencia ( $X$ ) para calcular el Coste Fijo de Inversión para cada equipo ( $C_{FC,n}$ ).

$$C_{FC,n} = C_{I,n} (1 + OS) (1 + D\&E + X) \quad [5.1. 3]$$

El coste *Off-Site* o *Outside boundary limits* ( $OS$  u  $OSBL$ ) hace referencia a la inversión en equipamiento auxiliar necesario para operar la unidad diseñada pero no contemplado en el diseño particular del proceso. Esto puede ser generación de vapor, transformación de energía eléctrica, etc. El coste de ingeniería tiene en cuenta el coste del desarrollo y diseño del proceso. El coste de contingencia se considera como una parte necesaria de la inversión, destinada a afrontar posibles gastos imprevistos que suelen surgir basándose en experiencias pasadas.

$$OS = 0,3$$

$$D\&E = 0,3$$

$$X = 0,1$$

6. Finalmente, el  $CAPEX$  se obtiene sumando  $C_{FC,n}$  de todos los equipos que integran la planta.

$$CAPEX = \sum C_{FC,n} \quad [5.1. 4]$$

En la Tabla 16 se muestran los resultados del cálculo de los costes de inversión de la planta. El  $CAPEX$  necesario para poner en funcionamiento la planta es de 240.447.442 \$. El  $CAPEX$  requerido por la etapa de reacción es de 103.463.140 \$, mientras que para el

tren de separación se necesitan 136.984.302 \$. Cabe recalcar que el tren de separación no ha sido optimizado económicamente y presenta mucho margen de mejora.

Tabla 16. Cálculo de los costes de inversión de la planta completa

<b>Equipos (n)</b>	$C_{E,n}(\$)$	$C_{I,n}(\$)$	$C_{FC,n}(\$)$
<b>Tanques reactores</b>	5.881.576	20.232.620	36.823.369
<b>Intercambiador de calor</b>	7.153.057	24.606.515	44.783.857
<b>Compresores</b>	3.490.914	12.008.744	21.855.914
<b>Subtotal etapa reacción</b>	16.525.546	56.847.879	103.463.140
<b>Tanque flash</b>	340.423	1.171.055	2.131.319
<b>Torre absorción</b>	534.435	1.838.457	3.345.992
<b>Columna de destilación</b>	21.004.822	72.256.588	131.506.990
<b>Columna</b>	17.616.018	60.599.102	110.290.366
<b>Condensador</b>	1.844.488	6.345.040	11.547.972
<b>Calderín</b>	1.544.316	5.312.446	9.668.652
<b>Subtotal tren de separación</b>	21.879.680	75.266.100	136.984.302
<b>Total Planta</b>	38.405.227	132.113.979	<b>240.447.442</b>

## 5.2. Costes de operación

### 5.2.1. Costes variables

Los costes de operación incluirán el coste de operación de la etapa de reacción, ya calculado en el apartado 3.3.2, así como el coste de operación del tren de separación.

En el tren de separación (Figura 34) se consideran únicamente tres costes operacionales significativos: la corriente de agua introducida en el absorbedor de gases, el coste energético de refrigerar el condensador de la columna de destilación y el coste energético del vapor utilizado para calentar el calderín de la columna de destilación.

Los valores de coste energético para el calderín y condensador de la columna se han estimado haciendo uso del software *CAPCOST* (Turton, 1998). El cálculo se explica en el apartado 3.3.2. Los valores utilizados son 11,83 \$/GJ para el coste del vapor utilizado en el calderín a 160°C y 1,5 bar y 0,645 \$/GJ de coste energético de la refrigeración del condensador mediante agua corriente. El precio del agua utilizada es de 1,5 \$/m<sup>3</sup> de agua alimentada al absorbedor, que se toma como precio medio del agua corriente (OCU, 2016). Las ecuaciones utilizadas para calcular dicho coste se muestran en el Anexo A.

Se tendrá en cuenta también como coste variable la cantidad de producto (AA y ACE) que no se consigue separar y, por lo tanto, no se puede vender. Haciendo uso de la tasa de recuperación de los productos que ofrece el tren de separación, que es del 95,5 % para el AA y del 0% para el ACE, se concluye que este coste será de un 4,5% del valor de AA y de un 100% del valor de ACE.

Tabla 17. Listado de costes variables

<b>Equipo</b>	<b>Coste (M\$/año)</b>
Coste PP (M\$/año)	48,65
Coste Vapor (M\$/año)	1,84
Coste Compresión (M\$/año)	2,01
<b>Subtotal etapa reacción</b>	<b>52,50</b>
Coste agua	0,01
Coste energético vapor	23,73
Coste enerético agua	0,32
Pérdidas de AA	5,40
Pérdidas de ACE	2,69
<b>Subtotal tren de separación</b>	<b>32,16</b>
<b>Total</b>	<b>84,66</b>

### 5.2.2. Costes fijos

Los costes fijos son aquellos que no varían ante cambios en el volumen de producción de una empresa.

- **Mantenimiento y mano de obra.** Se calculan como un porcentaje anual de la inversión Inside Boundary Limits (ISBL), que en este trabajo representa el coste total de adquisición e instalación de equipos ( $C_I$ ). El valor del porcentaje está entre el 3 y el 5% para plantas que operan con fluidos. En este trabajo, el valor asciende a 3.963.419 \$.
- **Amortización.** Para financiar el proyecto se realizan pagos regulares de intereses y amortización del capital que son costes fijos para un proyecto.

Se transforma estas cantidades a cantidades anuales para comparar la magnitud de la inversión con el flujo de ingresos. Esta cuota anual ( $C_{RF}$ ) es la fracción de capital que se debe pagar cada año para reembolsar la inversión inicial. Para obtenerla, se aplica la siguiente fórmula en la que  $n$  son los años de amortización e  $i$  el interés del dinero.

$$C_{RF} = \frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1} \quad [5.2. 1]$$

Considerando un interés anual del 4,566% (Instituto de Crédito Oficial, 2020) y un periodo de amortización de 10 años, la tasa anual de recuperación de la inversión ( $C_{RF}$ ) es de 0,1268. Para obtener el coste de amortización anual ( $C_{CAPEX}$ ) se multiplica el CAPEX total por la tasa anual de recuperación ( $C_{RF}$ ).

$$C_{CAPEX} \left( \frac{\$}{\text{año}} \right) = 240.447.442 \cdot 0,1268 = 30.488.736 \quad [5.2. 2]$$

### 5.3. Análisis de rentabilidad

El balance total será la suma de ingresos provenientes de la venta de los productos generados en la etapa de reacción menos los costes fijos y variables.

Tabla 18. Balance económico del proceso completo

Concepto	(M\$/año)
Ingresos	
Valor AA	120,15
Valor ACE	2,69
Total	122,84
Costes	
Variables	84,66
Fijos	
Mant. Y Mano de obra	3,96
Amortización	30,49
<b>Beneficio anual</b>	<b>3,73</b>

La rentabilidad se define como la relación entre el beneficio obtenido a partir de una operación y el capital total invertido para ponerla en marcha. Tras el estudio económico, se concluye que la rentabilidad del proceso diseñado es de 1,55 % anual del capital invertido. Este valor hace viable la realización de la inversión al ser positivo, aunque presenta margen de mejora.

$$Rentabilidad \left( \frac{\%}{año} \right) = \frac{Beneficio\ anual}{CAPEX} = \frac{3,73}{240,45} = 1,55 \frac{\%}{año} \quad [5.3. 1]$$

## 6. Conclusiones

En primer lugar, en este trabajo se ha podido comprobar la dificultad que tiene llevar a cabo la optimización paramétrica de un proceso químico, a través de simuladores de procesos. Tras una revisión bibliográfica y la elección de las condiciones de partida, se ha podido obtener una mejora en el beneficio económico del 6,8% en la etapa reactiva. Con ello se puede concluir que se ha cumplido el objetivo de realizar este tipo de optimización.

Por otra parte, el estudio económico del proceso completo muestra una rentabilidad muy ajustada (1,55 % anual). Este parámetro pone de manifiesto la importancia del trabajo de optimización previo de la etapa reactiva y la necesidad de llevar a cabo este tipo de análisis en la totalidad del proceso, ya que su impacto positivo en la economía del proceso es vital para su viabilidad real. Además, se ha comprobado que el diseño óptimo en la etapa de reacción ha simplificado el diseño posterior del tren de separación. Esto podría no suceder y, por lo tanto, queda patente la necesidad de realizar estudios que abarquen el proceso completo.

En definitiva, este trabajo cumple con el objetivo de reunir y aplicar los conocimientos y habilidades adquiridas a lo largo del grado, pero sobre todo ha servido para ampliarlos en campos en los que no se había incidido previamente.

# Bibliografía

- Air Liquide Engineering & Construction. (n.d.). *Producción de ácido acrílico de grado éster*. Retrieved mayo 8, 2020, from Tecnologías en productos petroquímicos: <https://www.engineering-airliquide.com/es/acido-acrilico-tecnologia-lurgi-nippon-kayaku>
- Banco de España. (2020). Retrieved abril 24, 2020, from Boletín Estadístico. Tipos de cambio e índices de competitividad: <https://www.bde.es/webbde/es/estadis/infoest/bolest20.html>
- Brian Research & Engineering, LLC. (2020). *ProMax 5.0*. Retrieved from <https://www.bre.com/ProMax-New.aspx>
- Chien, I. L., Yu, B. Y., & Lee, H. Y. (2017). Process Simulation and Design of Acrylic Acid Production. In D. C. Foo, N. Chemmangattuvalappil, D. K. Ng, R. Elyas, C.-L. Chen, R. D. Elms, . . . C. H. Chong, *Chemical Engineering Process Simulation* (pp. 279-309). Elsevier.
- Costa López, José. (1984). *Curso de Ingeniería Química*. Reverté.
- Endesa. (2020, Abril 24). Retrieved from One Luz+Gas Endesa: <https://www.endesa.com/es/luz-y-gas/luz-gas/tarifa-one-luz-gas>
- European Chemicals Agency. (2002). *European Union Risk Assessment Report, Acrylic Acid*. Retrieved from <https://echa.europa.eu/documents/10162/05ecf0b5-6529-44e1-870f-5644a8f9cb19>
- Gazprom. (2017, diciembre 1). *Russia's largest acrylic acid plant put into commercial operation*. Retrieved from News and events: [www.gazprom.com/press/news/2017/december/article384432/](http://www.gazprom.com/press/news/2017/december/article384432/)
- Hall, S. (2017). *Rules of Thumbs for Chemical Engineers* (Sexta ed.). Elsevier.
- ICIS.com. (2008). *Acrylic Acid Uses and Market Data*. Retrieved abril 2020, from <https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/11/01/9074870/acrylic-acid-uses-and-market-data>
- ICIS.com. (2020, abril). *Indicative Chemical Prices*. Retrieved from <https://www.icis.com/explore/chemicals/channel-info-chemicals-a-z>
- Instituto de Crédito Oficial. (2020). [www.ico.es](http://www.ico.es). Retrieved 12 05, 2020, from ICO Empresas y Emprendedores: [ico.es](http://ico.es)
- Intratec Solutions. (2016, febrero 1). *ACRYLIC ACID PRODUCTION VIA PROPYLENE OXIDATION*. [www.chemengonline.com](http://www.chemengonline.com). Retrieved from <https://www.chemengonline.com/acrylic-acid-production-via-propylene-oxidation-intratec-solutions/>

- Lin, M. M. (2001). Selective oxidation of propane to acrylic acid with molecular oxygen. *207(1-2)*, 1-16.
- Luyben, W. L. (2007). *Chemical Reactor Design and Control*.
- Luyben, W. L. (2016). Economic trade-offs in acrylic acid reactor design. *Computers & Chemical Engineering*, *93*, 118-127.
- Martínez Sifuentes, V.H. (2000). *Simulación de procesos en Ingeniería Química*. Plaza y Valdes.
- Organización de Consumidores y Usuarios (OCU). (2016). *Precio del agua: más cara en Barcelona y Murcia*. Retrieved abril 24, 2020, from [www.ocu.org/alimentacion/agua/informe/el-precio-del-agua](http://www.ocu.org/alimentacion/agua/informe/el-precio-del-agua)
- Shimizu, N. (1979). *Process for producing acrylic acid from propylene*.
- Speight, J. G. (2002). *Chemical and Process Design Handbook*. Mc Graw-Hill.
- Storch de Gracia y Asensio, J. M., & García Martín, T. (2008). *Seguridad industrial en plantas químicas y energéticas: fundamentos, evaluación de riesgos y diseño* (Segunda ed.). Madrid: Díaz de Santos.
- Suo, X., Zhang, H., Ye, Q., Dai, X., Yu, H., & Li, R. (2015). Design and control of an improved acrylic acid process. *Chemical Engineering Research and Design*, *104*, 346-356.
- Tullo, A. H. (2017, enero 16). Arkema to modernize acrylic acid plant. *Chemical & Engineering News*, *95(3)*, 10. Retrieved from Chemical & Engineering News.
- Turton, R. (1998). *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes* (5<sup>a</sup> ed.). Prentice Hall.

# Anexos

## Anexo A. Ecuaciones para la estimación del coste de operación del tren de separación

**Condensador:**

$$coste\_operación_{condensador} \left( \frac{\$}{año} \right) = Q_c \left( \frac{kWh}{año} \right) \cdot coste\_energético_{agua} \left( \frac{\$}{kWh} \right)$$

[A. 1]

**Calderín:**

$$coste\_operación_{calderín} \left( \frac{\$}{año} \right) = Q_c \left( \frac{kWh}{año} \right) \cdot coste\_energético_{vapor} \left( \frac{\$}{kWh} \right)$$

[A. 2]

**Torre de absorción:**

$$coste_{operación_{agua}} \left( \frac{\$}{año} \right) = caudal_{agua} \left( \frac{m^3}{año} \right) \cdot coste_{agua} \left( \frac{\$}{m^3} \right)$$

[A. 3]

# Anexo B. Fichas de Seguridad Química

## Fichas Internacionales de Seguridad Química

**ACIDO ACRILICO**

ICSC: 0688

 <p style="text-align: center;"> <b>ACIDO ACRILICO</b>                  Acido 2-propenoico                  Acido etilencarboxílico                  Acido acroleico  <math>C_3H_4O_2/CH_2=CHCOOH</math>                  Masa molecular: 72.07             </p> <p>                 N° CAS 79-10-7                  N° RTECS AS4375000                  N° ICSC 0688                  N° NU 2218 (inhibido)                  N° CE 607-081-00-8             </p> 			
TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
<b>INCENDIO</b>	Inflamable. Muchas reacciones pueden producir incendio o explosión. Desprende humos tóxicos en caso de incendio.	Evitar llama abierta, NO producir chispas y NO fumar.	Pulverización con agua, espuma resistente al alcohol, polvos, dióxido de carbono.
<b>EXPLOSION</b>	Por encima de 54°C: pueden formarse mezclas explosivas vapor/aire.	Por encima de 54°C: sistema cerrado, ventilación y equipo eléctrico a prueba de explosiones. Los vapores quedarán sin inhibidor pudiéndose polimerizarse en las instalaciones de extracción o ventilación con riesgo de avería.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones por pulverización con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.
<b>EXPOSICION</b>		¡HIGIENE ESTRICTA!	
• <b>INHALACION</b>	Tos, dolor de garganta, secreción nasal, sensación de quemazón, dificultad respiratoria.	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo, posición de semiincorporado y someter a atención médica.
• <b>PIEL</b>	¡PUEDE ABSORBERSE! Enrojecimiento, ampollas, dolor.	Guantes protectores, traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas, aclarar la piel con agua abundante o ducharse y solicitar atención médica.
• <b>OJOS</b>	Enrojecimiento, dolor, quemaduras profundas graves, pérdida de visión.	Pantalla facial o protección ocular combinada con la protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después consultar a un médico.
• <b>INGESTION</b>	Graves quemaduras en labios, boca y garganta, calambres abdominales, diarrea, pérdida de conocimiento, shock.	No comer, beber ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca, NO provocar el vómito y someter a atención médica.
<b>DERRAMAS Y FUGAS</b>		<b>ALMACENAMIENTO</b>	<b>ENVASADO Y ETIQUETADO</b>

<p>Evacuar la zona de peligro, consultar a un experto si se produce un derrame importante ventilación; recoger en la medida de lo posible el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes herméticos etiquetados; absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte y trasladar a lugar seguro. NO verter en el alcantarillado. (Protección personal adicional: traje de protección completa incluyendo equipo autónomo de respiración).</p>	<p>A prueba de incendio. Separado de alimentos y piensos; separado oxidantes fuertes, bases fuertes, ácidos fuertes. Mantener en la oscuridad; mantener en una habitación bien ventilada. NO permitir su congelación. Almacenar solamente si está estabilizado (Véanse Notas).</p>	<p>NO transportar con alimentos y piensos. Puede almacenarse sólo en recipientes de vidrio, acero inoxidable, aluminio o recubiertos de polietileno  símbolo C  símbolo N  R: 10-21/22-35-50  S: (1/2)-26-36/37/39-45-61  Nota: D  Clasificación de Peligros NU: 8  Grupo de Envasado NU: II  CE:</p> 
<b>VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE</b>		
<p>IC SC: 0688 <span style="float: right;">Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas (CCE, IPCS, 1994)</span></p>		

## Fichas Internacionales de Seguridad Química

### ACIDO ACRILICO

IC SC: 0688

<b>D A T O S I M P O R T A N T E S</b>	<p><b>ESTADO FISICO; ASPECTO</b> Líquido incoloro, con olor característico.</p> <p><b>PELIGROS FISICOS</b> El vapor es más denso que el aire. El vapor forma mezclas explosivas con el aire.</p> <p><b>PELIGROS QUIMICOS</b> La sustancia se polimeriza fácilmente debido al calentamiento intenso, bajo la influencia de la luz, oxígeno, agentes oxidantes tales como peróxidos u otros activadores (ácidos, sales de hierro) con peligro de incendio o explosión. Durante un calentamiento intenso se producen humos tóxicos. La sustancia es moderadamente ácida. Reacciona violentamente con oxidantes originando riesgo de incendio y explosión; reacciona violentamente con bases fuertes y aminas. Ataca muchos metales, incluyendo níquel y cobre.</p> <p><b>LIMITES DE EXPOSICION</b> TLV (como TVMA): 2 ppm; 5.9 mg/m<sup>3</sup> (plc) (ACGIH 1990-1991)</p>	<p><b>VIAS DE EXPOSICION</b> La sustancia se puede absorber por inhalación, a través de la piel y por ingestión.</p> <p><b>RIESGO DE INHALACION</b></p> <p><b>EFFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION</b> Corrosivo. La sustancia es corrosiva de los ojos, la piel y el tracto respiratorio. Corrosivo por ingestión. La inhalación de la sustancia puede originar edema pulmonar (véanse Notas). La exposición puede producir pérdida de conocimiento. Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata.</p> <p><b>EFFECTOS DE EXPOSICION PROLONGADA O REPETIDA</b></p>
<b>PROPIEDADES FISICAS</b>	<p>Punto de ebullición: 141°C  Punto de fusión: 14°C  Densidad relativa (agua = 1): 1.05  Solubilidad en agua: Miscible  Presión de vapor, Pa a 20°C: 413</p>	<p>Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.5  Punto de inflamación: 54°C (o.c.)°C  Temperatura de autoignición: 360°C  Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 2.9-8  Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 0.36 (estimado)</p>
<b>DATOS AMBIENTALES</b>		
<b>NOTAS</b>		

## Fichas Internacionales de Seguridad Química

**ACIDO ACETICO**

ICSC: 0363

 <p style="text-align: center;"> <b>MINISTERIO DE TRABAJO Y ASUNTOS SOCIALES ESPAÑA</b>  <b>ACIDO ACETICO</b>                  Acido etanoico  <math>CH_3COOH/C_2H_4O_2</math>                  Masa molecular: 60.1             </p>				
N° CAS 64-19-7 N° RTECS AF1340000 N° ICSC 0363 N° NU 2789 N° CE 607-002-00-6(>90%)				
TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMERO S AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS	
<b>INCENDIO</b>	Inflamable. El calentamiento intenso puede producir aumento de la presión con riesgo de estallido.	Evitar llama abierta, NO producir chispas y NO fumar.	Pulverización con agua, espuma resistente al alcohol, dióxido de carbono. Los bomberos deberían emplear indumentaria de protección completa incluyendo equipo autónomo de respiración.	
<b>EXPLOSION</b>	Por encima de 39°C: pueden formarse mezclas explosivas vapor/aire.	Por encima de 39°C: sistema cerrado, ventilación y equipo eléctrico a prueba de explosiones.	En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones por pulverización con agua.	
<b>EXPOSICION</b>		<b>¡EVITAR TODO CONTACTO!</b>		
<b>• INHALACION</b>	Dolor de garganta, tos, jadeo, dificultad respiratoria. (síntomas de efectos no inmediatos: véanse Notas).	Ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo, posición de semincorporado y someter a atención médica.	
<b>• PIEL</b>	Enrojecimiento, dolor, graves quemaduras cutáneas.	Guantes protectores, traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas, aclarar la piel con agua abundante o ducharse y solicitar atención médica.	
<b>• OJOS</b>	Dolor, enrojecimiento, visión borrosa, quemaduras profundas graves.	Pantalla facial.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después consultar a un médico.	
<b>• INGESTION</b>	Dolor de garganta, sensación de quemazón del tracto digestivo, dolor abdominal, vómitos, diarrea.	No comer, beber ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca, NO provocar el vómito y someter a atención médica.	
DERRAMAS Y FUGAS	ALMACENAMIENTO	ENVASADO Y ETIQUETADO		
Recoger el líquido procedente de una fuga en recipientes herméticos, neutralizar con precaución el líquido derramado con carbonato sódico, sólo bajo la responsabilidad de un experto o eliminar el residuo con agua abundante (protección personal adicional: traje de protección completa incluyendo equipo autónomo de respiración).	A prueba de incendio. Separado de oxidantes, bases. Mantener en lugar frío; mantener en una habitación bien ventilada. Separado de alimentos y piensos.	NO transportar con alimentos y piensos. símbolo C R: 10-35 S: 2-23-26 Clasificación de Peligros NU: 8 Grupo de Envasado NU: II EC:		
<b>VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE</b>				
				

ICSC: 0363

Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión de las Comunidades Europeas © CCE, IPCS, 1994

## Fichas Internacionales de Seguridad Química

ACIDO ACETICO

ICSC: 0363

D A T O S I M P O R T A N T E S	<b>ESTADO FISICO; ASPECTO</b> Líquido incoloro, con olor acre.	<b>VÍAS DE EXPOSICIÓN</b> La sustancia se puede absorber por Inhalación del vapor y por Ingestión.
	<b>PELIGROS FÍSICOS</b>	<b>RIESGO DE INHALACIÓN</b> En la evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire.
	<b>PELIGROS QUÍMICOS</b> La sustancia es moderadamente ácida. Reacciona violentamente con oxidantes tales como trióxido de cromo y permanganato potásico. Reacciona violentamente con bases fuertes. Ataca muchos metales formando gas combustible (Hidrógeno).	<b>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN DE CORTA DURACIÓN</b> Corrosivo. La sustancia es muy corrosiva para los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La inhalación del vapor puede originar edema pulmonar (véanse Notas). Corrosivo por Ingestión.
	<b>LÍMITES DE EXPOSICIÓN</b> TLV: 10 ppm; 25 mg/m <sup>3</sup> (como TWA); 15 ppm; 37 mg/m <sup>3</sup> (como STEL) (ACGIH 1990-1991)	<b>EFFECTOS DE EXPOSICIÓN PROLONGADA O REPETIDA</b> El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis.
<b>PROPIEDADES FÍSICAS</b>	Punto de ebullición: 118°C Punto de fusión: 16°C Densidad relativa (agua = 1): 1.05 Solubilidad en agua: miscible Presión de vapor, kPa a 20°C: 1.6	Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.07 Punto de inflamación: 39°C Temperatura de autoignición: 427°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 4.0-17 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.31 - 0.17
<b>DATOS AMBIENTALES</b>		
<b>NOTAS</b>		
Los síntomas del edema pulmonar no se ponen de manifiesto a menudo hasta pasadas algunas horas y se agravan por el esfuerzo físico. Reposo y vigilancia médica son por ello imprescindibles. Debe considerarse la inmediata administración de un spray adecuado por un médico o persona por él autorizada. Tarjeta de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-614		
<b>INFORMACIÓN ADICIONAL</b>		
FISQ: 1-011 ACIDO ACETICO		
ICSC: 0363	ACIDO ACETICO	
© CCE, IPCS, 1994		
<b>NOTA LEGAL IMPORTANTE:</b>	Ni la CCE ni la IPCS ni sus representantes son responsables del posible uso de esta información. Esta ficha contiene la opinión colectiva del Comité Internacional de Expertos del IPCS y es independiente de requisitos legales. La versión española incluye el etiquetado asignado por la clasificación europea, actualizado a la vigésima adaptación de la Directiva 67/548/CEE traspuesta a la legislación española por el Real Decreto 363/95 (BOE 5.6.95).	

© INSHT

## Fichas Internacionales de Seguridad Química

**PROPILENO**

ICSC: 0559

 <p style="text-align: center;"> <b>MINISTERIO DE TRABAJO Y ASUNTOS SOCIALES ESPAÑA</b>                  Metiletileno                  Propeno                  Metiletano (botella)  <math>C_3H_6 / CH_2CHCH_3</math>                  Masa molecular: 42.1             </p>	 <p style="font-size: small;">INSTITUTO NACIONAL DE SEGURIDAD E HIGIENE EN EL TRABAJO</p>
<p>Nº CAS 115-07-1                  Nº RTECS UC6740000                  Nº ICSC 0559                  Nº NU 1077                  Nº CE 601-011-00-9</p>	

TIPOS DE PELIGRO/ EXPOSICION	PELIGROS/ SINTOMAS AGUDOS	PREVENCION	PRIMEROS AUXILIOS/ LUCHA CONTRA INCENDIOS
<b>INCENDIO</b>	Extremadamente inflamable.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar.	Cortar el suministro; si no es posible y no existe riesgo para el entorno próximo, dejar que el incendio se extinga por sí mismo; en otros casos apagar con polvo, dióxido de carbono.
<b>EXPLOSION</b>	Las mezclas gas/aire son explosivas.	Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Evitar la generación de cargas electrostáticas (por ejemplo, mediante conexión a tierra) si aparece en estado líquido.	En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua pero NO en contacto directo con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.
<b>EXPOSICION</b>			
<b>• INHALACION</b>	Somnolencia. Sofocación (Véanse Notas).	Ventilación.	Aire limpio, reposo. Respiración artificial si estuviera indicada. Proporcionar asistencia médica.
<b>• PIEL</b>	EN CONTACTO CON LÍQUIDO: CONGELACION.	Guantes aislantes del frío.	EN CASO DE CONGELACION: aclarar con agua abundante, NO quitar la ropa. Proporcionar asistencia médica.
<b>• OJOS</b>	Véase Piel.	Gafas ajustadas de seguridad, o pantalla facial.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
<b>• INGESTION</b>		No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	

<b>DERRAMES Y FUGAS</b>	<b>ALMACENAMIENTO</b>	<b>ENVASADO Y ETIQUETADO</b>

Evacuar la zona de peligro. Consultar a un experto. Ventilar. Eliminar todas las fuentes de ignición. NO verter NUNCA chorros de agua sobre el líquido. (Protección personal adicional: traje de protección completo incluyendo equipo autónomo de respiración).	A prueba de incendio. Mantener en lugar fresco.	NU (transporte): Clasificación de Peligros NU: 2.1 CE: símbolo F+ R: 12 S: 2-9-16-33	
<b>VEASE AL DORSO INFORMACION IMPORTANTE</b>			
<b>ICSC: 0559</b>		Preparada en el Contexto de Cooperación entre el IPCS y la Comisión Europea © CE, IPCS, 2003	

## Fichas Internacionales de Seguridad Química

### PROPILENO

**ICSC: 0559**

<b>D A T O S I M P O R T A N T E S</b>	<b>ESTADO FISICO; ASPECTO</b> Gas licuado comprimido incoloro.	<b>VIAS DE EXPOSICION</b> La sustancia se puede absorber por inhalación.
	<b>PELIGROS FISICOS</b> El gas es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante. y puede acumularse en las zonas más bajas produciendo una deficiencia de oxígeno. Como resultado del flujo, agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.	<b>RIESGO DE INHALACION</b> Al producirse pérdidas en zonas confinadas este gas puede originar asfixia por disminución del contenido de oxígeno del aire.
	<b>PELIGROS QUIMICOS</b> Reacciona violentamente con oxidantes originando peligro de incendio y explosión.	<b>EFFECTOS DE EXPOSICION DE CORTA DURACION</b> La evaporación rápida del líquido puede producir congelación. La sustancia puede causar efectos en el sistema nervioso central. La exposición podría causar disminución de la consciencia. Véanse Notas.
	<b>LIMITES DE EXPOSICION</b> TLV: A4 (ACGIH 2003) MAK no establecido.	
<b>PROPIEDADES FISICAS</b>	Punto de ebullición: -48°C Punto de fusión: -185°C Densidad relativa (agua = 1): 0.5 Solubilidad en agua: escasa Presión de vapor, kPa a 25°C: 1158	Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.5 Punto de inflamación: gas inflamable Temperatura de autoignición: 460°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 2.4-10.3 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 1.77
<b>DATOS AMBIENTALES</b>		
<b>NOTAS</b>		
Altas concentraciones en el aire producen una deficiencia de oxígeno con riesgo de pérdida de conocimiento o muerte. Comprobar el contenido de oxígeno antes de entrar en la zona. Con el fin de evitar la fuga de gas en estado líquido, girar la botella que tenga un escape manteniendo arriba el punto de escape.		
Ficha de emergencia de transporte (Transport Emergency Card): TEC (R)-137. Código NFPA: H 1; F 4; R 1;		
<b>INFORMACION ADICIONAL</b>		