



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**PRODUCCIÓN DE POLICARBONATO
DE LIMONENO**

por

Candela Rodríguez Gutiérrez
Celsa Alonso Arias
Marta Noval Rodríguez
Nuria Castaño Menéndez

Oviedo, Julio de 2023

RESUMEN

El policarbonato es un polímero que cuenta con una gran cantidad de aplicaciones en campos muy diversos, como la construcción, la automoción o la electrónica.

Actualmente, su proceso productivo principal involucra el uso de materias primas de origen fósil y, por lo tanto, no renovables. En concreto, se emplea bisfenol A y fosgeno, ambos potencialmente tóxicos y contaminantes.

El presente trabajo tiene como objetivo evaluar la posibilidad de producir policarbonato a partir de D-limoneno, un compuesto presente en la piel de las naranjas, y de CO₂. Esta vía, además de no depender de materias primas de origen fósil y no renovables, implica tanto el aprovechamiento de un residuo como la reducción de emisiones de un gas con efecto invernadero. Para ello, se concibe un proceso industrial que abarca desde el tratamiento de la piel de naranja para extraer el D-limoneno hasta la propia síntesis del policarbonato, intentando en todo momento conservar la sostenibilidad del proceso global.

Actualmente, el estado del arte de los procesos involucrados se encuentra poco avanzado. Como consecuencia, la rentabilidad del proceso puede llegar a resultar muy cuestionable. Este proyecto pretende presentar una idea original, identificar los puntos más comprometedores del proceso e intentar despertar interés científico que pueda resultar en nuevas investigaciones.

EXECUTIVE SUMMARY

Polycarbonate is a polymer that has a wide range of applications in various fields such as construction, electronics and automotive industry.

Currently, its main production process involves the use of non-renewable fossil-based raw materials. Specifically, bisphenol A and phosgene are used, both of which are potentially toxic and polluting.

The objective of this study is to evaluate the possibility of producing polycarbonate from D-limonene, a compound present in orange peels, and CO₂. This approach not only avoids the use of non-renewable fossil-based raw materials but also involves utilizing a waste product and reducing emissions of a greenhouse gas. To achieve this, we envision an industrial process that encompasses the treatment of orange peels to extract D-limonene and the synthesis of polycarbonate, while maintaining overall process sustainability.

Currently, the state-of-the-art in the involved processes is relatively undeveloped. Consequently, the profitability of the process can be highly questionable. This project aims to present an original idea, identify the most challenging aspects of the process, and stimulate scientific interest that could lead to further research.

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Conceptos básicos	2
1.1.1. Policarbonato: obtención, características, aplicaciones y problemática	2
1.1.2. Alternativas sostenibles para la obtención de policarbonato	4
1.2. Policarbonato de limoneno	5
1.2.1. Materias primas	6
1.2.2. Ventajas del policarbonato de limoneno	9
2. OBJETO	11
3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO	13
3.1. Localización de la planta	14
3.2. Potencial económico y tamaño de la planta	15
3.3. Planteamiento	16
3.1.1. Decisiones de partida	16
3.1.2. Descripción del proceso	18
3.4. Diagrama de bloques	22
4. BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA	23
4.1. Balances de materia	26
4.2. Balances de energía	29
5. DIAGRAMA DE FLUJO	33
6. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA DEL PROCESO	36
6.1. Análisis pinch: determinación de necesidades mínimas de servicios	37
6.2. Topología de la red de cambiadores de calor	39
6.3. Diseño de los intercambiadores de calor	40
7. CONSIDERACIONES DE SEGURIDAD E IMPACTO AMBIENTAL	46
7.1. Riesgos de productos químicos empleados	47
7.2. Riesgos de equipos, condiciones de operación y mantenimiento	50
7.3. Análisis detallado de riesgo y operabilidad (HAZOP)	54
7.4. Consideraciones de impacto ambiental	58
8. EVALUACIÓN ECONÓMICA	60

8.1. Inversión de capital	61
8.2. Costes de operación	62
9. CONCLUSIONES	64
10. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	67
11. ANEXO	70

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla I.	Propiedades del policarbonato (Kyriacos, 2017)	3
Tabla II.	Aplicaciones del policarbonato (Kyriacos, 2017)	3
Tabla III.	Aplicaciones actuales del D-limoneno	8
Tabla IV.	Propiedades del PCL sintetizado por Hauenstein et al. (2016)	9
Tabla V.	Coste de materias primas, valor del producto y margen de ganancia en M€/año	16
Tabla VI.	Balance de materia y energía para el Área I	24
Tabla VII.	Balance de materia y energía para el Área II y III	24
Tabla VIII.	Balance de materia y energía para el Área IV	25
Tabla IX.	Extracción de corrientes de las áreas I, II y III	38
Tabla X.	Temperatura del punto de pliegue y servicios de calefacción y refrigeración	38
Tabla XI.	Resultados obtenidos en la integración energética y diseño de los cambiadores de calor	44
Tabla XII.	Resultados obtenidos en la integración energética y diseño de los cambiadores de calor. Continuación	45
Tabla XIII.	Datos de seguridad relativos a los compuestos implicados en el proceso	47
Tabla XIV.	Características de peligrosidad de los compuestos tratados	48
Tabla XV.	Valores de referencia de exposición al ruido según el Real Decreto 286/2006	53
Tabla XVI.	Efectos de las vibraciones sobre la salud en función de la frecuencia de vibración	53
Tabla XVII.	Análisis HAZOP al reactor de epoxidación	55
Tabla XVIII.	Análisis HAZOP al reactor de epoxidación. Continuación	56
Tabla XIX.	Análisis HAZOP al reactor de epoxidación. Continuación	57
Tabla XX.	Coste de equipos del proceso por áreas implicadas	61
Tabla XXI.	Costes e inversión del proceso por áreas implicadas	61
Tabla XXII.	Costes de operación del proceso	62
Tabla XXIII.	Costes de operación del proceso. Continuación	63

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.	Fórmula química del policarbonato	2
Figura 2.	Policondensación interfacial	2
Figura 3.	Reacción química para la obtención de policarbonato a partir de xilosa	4
Figura 4.	Inversión estereoquímica de la timidina, impulsada por CO ₂ , para producir policarbonato	5
Figura 5.	Situación geográfica de CIMUSA (indicador naranja) y de la Central Térmica de Ciclo combinado de Cartagena, situada en el Polígono Industrial Valle de Escombreras (indicador azul)	14
Figura 6.	Localización de la planta de producción de PCL	15
Figura 7.	Diagrama de bloques del proceso	22
Figura 8.	Diagrama de flujo parte continua (Áreas I, II y III)	34
Figura 9.	Diagrama de flujo parte continua (Área IV)	35
Figura 10.	Curva compuesta global que resulta de la integración energética	39
Figura 11.	Topología de la red de cambiadores de calor	40
Figura 12.	Estimación de la inversión, basado en la entrega de equipos (Peters, Timmerhaus, West 2003)	71
Figura 13.	Requisitos de mano de obra por equipos (Peters, Timmerhaus, West 2003)	71
Figura 14.	Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas (Ulrich y Vasudevan, 2004)	72
Figura 15.	Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas (Ulrich y Vasudevan, 2004). Continuación	73
Figura 16.	Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas (Ulrich y Vasudevan, 2004). Continuación	74
Figura 17.	Tablas TEMA para la determinación del número de tubos real del intercambiador de calor	75

1. INTRODUCCIÓN

1.1. CONCEPTOS BÁSICOS

1.1.1. Policarbonato: obtención, características, aplicaciones y problemática

Actualmente, el plástico constituye, junto con la madera, el acero y el cemento, uno de los cuatro materiales más consumidos a nivel mundial. La mayor parte de los plásticos son sintetizados a partir de derivados del petróleo (en torno al 99%) y generan grandes emisiones de CO₂ en su proceso productivo. Con las tendencias actuales, se estima que para 2050 la industria plástica será responsable de un 16% del consumo global de petróleo y de un 15% de las emisiones totales de CO₂ (Zhou *et al.*, 2023). Como consecuencia, los bioplásticos han cobrado gran importancia y se presentan como una vía hacia el desarrollo sostenible. Son considerados bioplásticos a aquellos que en lugar de petróleo utilizan materias primas de origen biológico en su proceso de síntesis y/o son biodegradables

El policarbonato (Fig. 1) es uno de los polímeros más utilizados en la ingeniería debido a sus excelentes propiedades (Tabla I). Destaca especialmente por su elevada resistencia mecánica, estabilidad térmica, transparencia y ligereza, que lo hacen ideal para aplicaciones en sectores como la construcción, la automoción o la electrónica, entre otros (Tabla II). Además, se presenta como un material prometedor en sectores emergentes, siendo la principal elección a la hora de diseñar dispositivos 5G o contribuyendo a aumentar la ligereza de los coches eléctricos (Kyriacos, 2017).

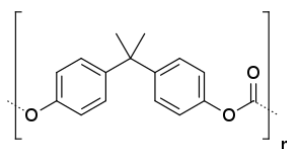


Fig. 1. Fórmula química del policarbonato

Actualmente, el policarbonato es obtenido mediante una reacción de policondensación entre el bisfenol A y el fosgeno, siguiendo la técnica de polimerización interfacial (Fig. 2). Este proceso involucra también grandes cantidades de diclorometano (CH₂Cl₂), empleado como disolvente, y agua (Zhou *et al.*, 2023; Kyriacos, 2017).

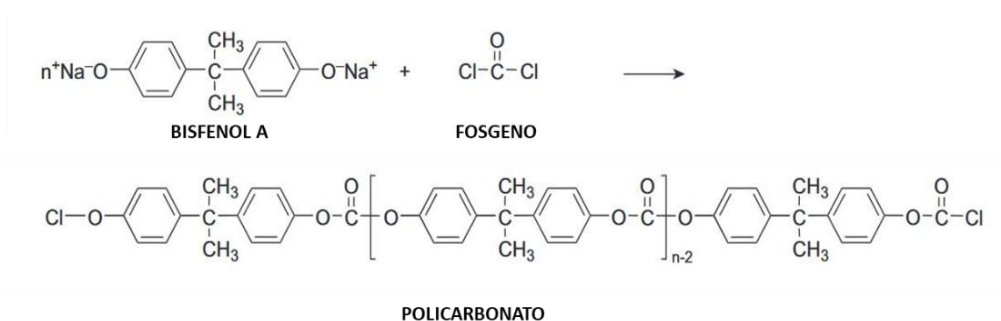


Fig. 2. Policondensación interfacial.

Tabla I. Propiedades del policarbonato (Kyriacos, 2017).

Propiedad	Unidades	Valor
<i>Propiedades físicas</i>		
Densidad	kg/m ³	1200
Dureza	Rockwell	75
Transparencia	%	89
<i>Propiedades mecánicas</i>		
Módulo de elasticidad a tracción	GPa	2,2
Alargamiento en el punto de fluencia	%	6
Alargamiento en el punto de rotura	%	50
Módulo de elasticidad a flexión	GPa	2,5
<i>Propiedades térmicas</i>		
Temperatura de transición vítrea (T _g)	°C	150
Calor específico	J/kg K	1180
Conductividad térmica	W/m K	0,19-0,22

Tabla II. Aplicaciones del policarbonato (Kyriacos, 2017).

Sector	Ejemplos	Ventajas
Construcción	Acrilamiento, invernaderos, marquesinas para autobuses y tranvías	Ligero, resistente transparente
Automoción	Semáforos, acrilamiento y focos de automoción	Ligero, resistente, resistente al agua, fácil de teñir de cualquier color
Electrónica	Cubiertas para baterías y relés, enchufes, interruptores	Moldeable, transparente, resistente a la oxidación, buen aislamiento eléctrico
Doméstico	Depósitos de agua para cafeteras, carcasas de aspiradoras, batidoras y herramientas eléctricas, secadores de pelo	Resistente al agua, buen aislamiento eléctrico
Seguridad	Gafas y cascos de seguridad, protectores de máquinas, cascos y armaduras antidisturbios	Transparente, resistente, ligero

El fosgeno (COCl_2) es producido por la combinación de cloro y monóxido de carbono, y se ha clasificado como altamente tóxico y contaminante (Von Zimmerman y Arnold, 2023). Con el objetivo de evitar su uso, a lo largo de los últimos años se ha potenciado otro método de obtención basado en la técnica de polimerización en fase fundida. Sin embargo, el bisfenol A se mantiene como la materia prima principal en ambos procesos (Kyriacos, 2017).

El problema del bisfenol A ($\text{C}_{15}\text{H}_{16}\text{O}_2$) no sólo escriba en su toxicidad, sino que, además, es obtenido a partir del petróleo, lo que lo convierte en una materia prima de origen no renovable (*Toxicidad del Bisfenol A: Revisión | Revista de Toxicología de AETOX*).

La síntesis del policarbonato, tal y como se ha expuesto, es llevada a cabo fundamentalmente a partir de materias primas no renovables y potencialmente dañinas tanto para el medio ambiente como para la salud. Es por ello que, dado su uso cada vez más creciente en numerosas aplicaciones, sea necesaria la búsqueda de alternativas más sostenibles.

1.1.2 Alternativas sostenibles para la obtención de policarbonato

La mayor parte de estudios centrados en encontrar alternativas sostenibles para la producción de policarbonatos se basan en procesos de copolimerización con CO_2 . Esto supone una gran ventaja, puesto que abre la posibilidad de contribuir a la reducción de emisiones de un gas con efecto invernadero.

En concreto, varios investigadores de la Universidad de Bath (Inglaterra, Reino Unido) han desarrollado un proceso de fabricación de policarbonatos a partir de xilosa y CO_2 (Fig. 3). Como resultado, se obtiene un material plástico con propiedades físicas muy similares a las de los plásticos convencionales, de origen renovable y potencialmente biodegradable. Así, es posible llevar a cabo su degradación mediante las bacterias presentes en el suelo, convirtiéndose de nuevo en dióxido de carbono y azúcar.

El proceso de fabricación de este tipo de policarbonatos es llevado a cabo a bajas presiones y a temperatura ambiente, lo que supone una reducción de los costes de operación. Además, implica una disminución en el uso de materias primas de origen fósil. Sin embargo, sigue requiriendo el uso del fosgeno.

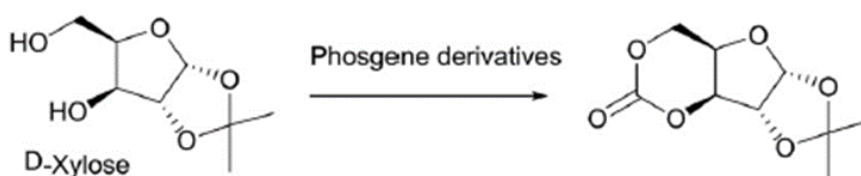


Fig. 3. Reacción química para la obtención de policarbonato a partir de xilosa.

Por otro lado, la compañía Asahi Kasei Corporation (Japón) ha desarrollado a escala industrial un proceso libre de fosgeno, produciendo en 2019 un total de 1,07 millones de toneladas de PC. Su síntesis requiere óxido de etileno, CO₂ y bisfenol A. No utilizar fosgeno es sin duda una ventaja medioambiental; sin embargo, emplear bisfenol A como materia prima reduce la sostenibilidad del proceso.

Otro estudio llevado a cabo en la Universidad de Bath sugiere la fabricación de policarbonatos a partir de la timidina, un nucleósido presente en el ADN, y CO₂. A pesar de que actualmente aún no se ha conseguido fabricar ningún policarbonato por esta vía, se presenta como una alternativa aparentemente interesante, puesto que posee la ventaja de no emplear ni fosgeno ni bisfenol A como materias primas, y, además, ser biocompatible. Esto último es debido a la presencia de la timidina en el ADN de los organismos; de esta manera, podría resultar útil su empleo en el campo de la medicina. La síntesis del policarbonato por esta ruta se lleva a cabo mediante la inversión estereoquímica de la timidina impulsada por CO₂, como se muestra en la Fig. 4.

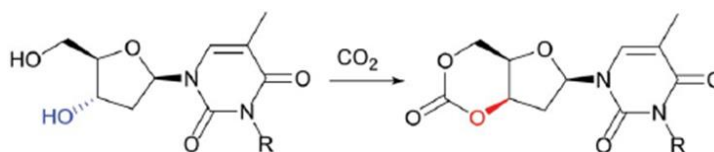


Fig. 4. Inversión estereoquímica de la timidina, impulsada por CO₂, para producir policarbonato.

1.2. POLICARBONATO DE LIMONENO (PCL)

En 2004, en la Universidad de Cornell (Nueva York), se desarrolló por primera vez un proceso eficiente para la copolimerización de óxido de limoneno y CO₂, obteniéndose un policarbonato conocido como policarbonato de limoneno (PCL) (Byrne *et al.*, 2004).

El óxido de limoneno es un epóxido obtenido a partir de D-limoneno, mediante una reacción de epoxidación. Por su parte, el D-limoneno es un estereoisómero del limoneno, cuya principal fuente de obtención es el aceite esencial que se encuentra en las pieles de los cítricos como el limón, la naranja, la mandarina, etc (Ciriminna *et al.* 2014).

Esta nueva vía de obtención no empleaba ni fosgeno ni bisfenol A y se mostró muy prometedora; por ello, varios estudios siguieron a la investigación de Byrne *et al.* (2004) con el objetivo de ampliar el conocimiento sobre el policarbonato de limoneno (Louisy *et al.*, 2022).

1.2.1 Materias primas

1.2.1.1 Piel de naranja

En las industrias frutícolas del sector de los cítricos se genera una gran cantidad de residuos tras el procesado de los mismos. La naranja representa el cítrico más producido en España y en el mundo, abarcando entre un 50 y un 60 % de la producción mundial de cítricos.

Aunque no todas las naranjas que se producen son sometidas a transformaciones industriales (p.e: jugos, licuados, mermeladas, etc.), se estima que entre un 40-50% de la producción total de éstas se destina a dichos procesos, obteniéndose residuos de los que posteriormente se extraen sustancias de elevado interés (FAOSTAT; Satari y Karimi, 2018; Sharma *et al.*, 2017). Concretamente, en la industria manufacturera de zumos de naranja la cantidad de residuos generados con respecto al total de fruta procesada alcanza porcentajes de hasta un 50-70% en peso. Las cáscaras constituyen el residuo principal y la cantidad producida dependerá del tratamiento al que haya sido sometida la fruta.

La naranja contiene una porción comestible de aproximadamente un 73% (FEN), por lo que la piel representa casi un 27%. La piel de la naranja tiene elevadas concentraciones de compuestos orgánicos, entre los que se encuentran los aceites esenciales, cuyo componente mayoritario es el limoneno. En ellas, se diferencian dos partes: el flavedo, que se corresponde con la zona externa y le proporciona su característico color naranja, constituyendo aproximadamente un 10% del peso total del fruto; y el albedo, capa interior blanca y esponjosa, que conforma entorno a un 17% del mismo (Bampidis y Robinson, 2006; Mahato *et al.*, 2018).

En lo que se refiere al contenido en limoneno, este dependerá de una serie de factores como la variedad, la maduración o las condiciones de cultivo de las naranjas y el crecimiento de las mismas, entre otros. Se estima que, por término medio, la cáscara de naranja contiene alrededor de un 90% de limoneno en su aceite esencial. El contenido extraíble de aceite esencial de este cítrico se corresponde con aproximadamente un 1,5% del peso total de la fruta (Mercy Nisha Nithyalakshmi y Aadhithiya, 2015).

En cuanto a la naranja en España, esta cuenta con una previsión de producción para la campaña 2022/2023 de 3.010.642 toneladas. Acudiendo a los datos comentados anteriormente, se estima que se producirán unos 692.448 t de piel de naranja en la cosecha 2022/2023, pudiendo llegar a extraerse aproximadamente 10.387 t de aceite esencial, del que se obtendrían idealmente en torno a 9.348 t de limoneno.

Los motivos principales por los que se ha decidido acudir a las naranjas como fuente de residuos para la obtención de limoneno son, por un lado, por tratarse del cítrico con más

abundancia a nivel mundial, y, por otro lado, el elevado porcentaje de este compuesto presente en su aceite esencial.

1.2.1.2 Limoneno

El limoneno es un compuesto orgánico perteneciente a la familia de los terpenos, el cual posee dos estereoisómeros: D-limoneno y L-limoneno (Fig.6a). Los terpenos son metabolitos sintetizados fundamentalmente en las plantas y están formados por la unión de una o varias unidades de isopreno, un hidrocarburo con 5 átomos de carbono (Fig. 6b). Gracias a su naturaleza aromática, una de las principales funciones que desempeñan los terpenos en las plantas es la protección frente a insectos y animales herbívoros (Parrino *et al.*, 2018).

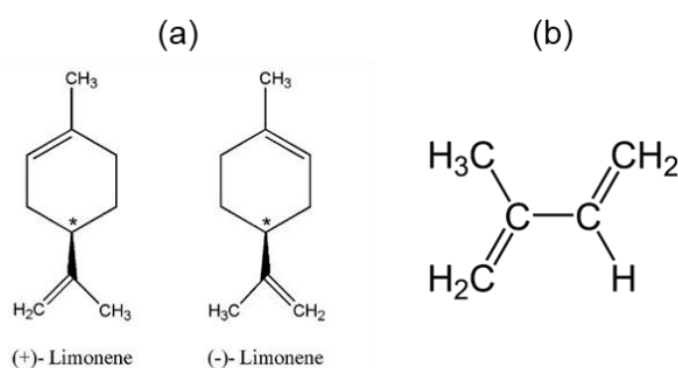


Fig. 6. (a) Estereoisómeros del limoneno (b) Fórmula química del isopreno

Dentro de la familia de los terpenos, estos pueden clasificarse según el número de unidades de isopreno que posean. El D-limoneno es concretamente un monoterpeno cíclico, lo que quiere decir que posee dos unidades de isopreno, cuya unión forma un anillo aromático.

Actualmente, el D-limoneno es obtenido fundamentalmente como subproducto en la elaboración de zumos a partir de cítricos. Encuentra aplicación en diversos sectores, tal y como puede verse en la Tabla III (Ciriminna *et al.*, 2014).

Además, sus propiedades estructurales (dos dobles enlaces, un centro quiral y un anillo aromático) hacen que este terpeno al ser sometido a reacciones de isomerización, adición o epoxidación presente una rápida conversión a intermediarios quirales o compuestos con estructuras de tipo benceno, haciendo del D-limoneno una sustancia que podría utilizarse como compuesto químico de base para fabricar productos de elevado valor añadido, como, por ejemplo, polímeros.

Tabla III. Aplicaciones actuales del D-limoneno

Sector	Aplicación
Alimenticio	Potenciador de sabor Suplemento dietético
Fragancias	Compuesto aromático
Bio-disolvente	Elaboración de productos de limpieza para uso industrial y doméstico Mejora en el rendimiento de la extracción de petróleo Disolvente alternativo a los derivados del petróleo que se utilizan en la química orgánica
Pesticidas naturales	Control de pulgas y garrapatas en animales domésticos, insecticidas en aerosol, larvicidas para mosquitos y repelentes de insectos.

1.2.1.3 CO₂

El dióxido de carbono (CO₂) es un gas incoloro, inodoro, no inflamable y ligeramente ácido. Aunque en condiciones normales se encuentra en fase gaseosa, es capaz de solidificarse y de licuarse cuando se disuelve en agua. A temperaturas superiores de 2000°C, se descompone produciendo humos tóxicos de monóxido de carbono (CO₂ (*Dióxido de carbono*) | *PRTR España*).

Actualmente, a nivel industrial el sector energético produce la mayor parte de emisiones de CO₂ a la atmósfera. Entre otras fuentes de emisión de CO₂ se encuentran las plantas de cemento, la industria química y la metalúrgica (CO₂ (*Dióxido de carbono*) | *PRTR España*). En el año 2022 se alcanzó un nuevo récord de emisiones a nivel mundial con 40.600 millones de toneladas.

En España las emisiones de CO₂ promedio producidas por una central térmica fueron de 0,95 tCO₂/MWh en 2020, constituyendo una de las mayores fuentes de emisión de este contaminante. Una forma de reducir las emisiones de CO₂ a la atmósfera es implantar un proceso de captura de CO₂. Hoy en día no existen muchas centrales con este sistema, al menos en España, pero el más desarrollado y utilizado hasta el momento es el proceso de captura de CO₂ postcombustión, donde la separación del contaminante tiene lugar tras producirse la combustión.

Con el objetivo de conseguir un proceso totalmente sostenible, se pretende que el CO₂ utilizado en la síntesis del PCL provenga de una central térmica con captura de CO₂.

1.2.2 Ventajas del policarbonato de limoneno

La principal ventaja del policarbonato de limoneno es la naturaleza renovable de sus materias primas. Esto supone un gran avance respecto al resto de policarbonatos, ya que convencionalmente se obtienen a partir de derivados del petróleo.

Investigaciones recientes han conseguido sintetizar este nuevo policarbonato consiguiendo interesantes propiedades térmicas (Hauenstein *et al.*, 2016), entre las que destaca su temperatura de transición vítrea; la cual se encuentra próxima a la del policarbonato convencional, tal y como se muestra en la Tabla IV. Esta propiedad resulta importante, puesto que favorece que los plásticos de policarbonato tengan temperaturas más altas de fusión y descomposición.

Tabla IV. Propiedades del PCL sintetizado por Hauenstein *et al.* (2016).

Propiedad	Unidades	Valor
<i>Propiedades generales</i>		
Densidad	kg/m ³	1080
Contenido en carbono	%	99+
Peso molecular	kDa	53,4
Dispersión		1,10
<i>Propiedades mecánicas</i>		
Módulo de Young	GPa	0,95
Elongación en el límite de ruptura	%	15
Módulo de flexión	MPa	55
<i>Propiedades térmicas</i>		
Temperatura de transición vítrea (T _g)	°C	130
<i>Propiedades ópticas</i>		
Transmisión	%	94
Turbidez	%	0,75
Transparencia	%	99,9

Respecto a las propiedades de tracción, sugieren un comportamiento mecánico intermedio entre el del poliestireno (PS) y el policarbonato de bisfenol A (BPA-PC). Otra ventaja de este tipo de policarbonatos es que cuentan con una resistencia al rayado y una dureza superior a los BPA-PC; sin embargo, presentan el inconveniente de tener una fragilidad muy baja (Hauenstein *et al.*, 2016).

Por último, la transparencia obtenida es más alta que la del BPA-PC; esto, combinado con una dureza también superior, hace pensar que el policarbonato de limoneno puede llegar a suponer una excelente alternativa a los policarbonatos convencionales (Hauenstein *et al.*, 2016).

2. OBJETO

El policarbonato es un polímero con interesantes propiedades físicas, químicas y mecánicas, que lo convierten en un material ideal en numerosas aplicaciones. Actualmente, la mayor parte del policarbonato se obtiene a partir del bisfenol A y el fosgeno, ambos tóxicos y contaminantes. Ante esta situación y la creciente preocupación por el medio ambiente y el agotamiento de los recursos fósiles, urge la necesidad de encontrar alternativas que entren dentro de los objetivos de sostenibilidad.

A lo largo de este trabajo, se desarrolla un proceso industrial para la obtención de policarbonato a partir de D-limoneno y dióxido de carbono, materias primas que resultan como residuo de otros procesos industriales.

El D-limoneno es un compuesto orgánico que proviene de la cáscara o piel de los cítricos -residuo en la producción de zumos y concentrados-, siendo la naranja el cítrico más abundante, con más de 75 millones de toneladas producidas anualmente en el mundo. España representa casi el 5% de la producción total de naranjas, colocándose como sexto productor mundial y primero de Europa. Por otro lado, el dióxido de carbono se obtiene directamente de una central térmica, que lo recoge mediante sistemas de captura de CO₂. El uso de estas nuevas materias primas, además de provenir de una fuente renovable, contribuye tanto al aprovechamiento de residuos como a la reducción de emisiones de un gas con efecto invernadero.

El proceso industrial propuesto consta de tres partes. En la primera parte se realiza el tratamiento de la materia prima, con el objetivo de extraer el D-limoneno de las cáscaras de naranja. En una segunda parte se procede a transformar el D-limoneno en óxido de limoneno, y finalmente, en la tercera etapa, se lleva a cabo la reacción de síntesis entre el CO₂ y el óxido de limoneno para obtener el policarbonato de limoneno (PCL).

Se plantea operar 273 días al año, concretamente de octubre a junio, ambos incluidos, coincidiendo con la temporada de recogida de naranjas en España. Esta nueva vía de síntesis carece de estudios a escala de planta piloto y, por lo tanto, se posee información limitada sobre la misma. Debido a esto, la planta industrial diseñada tendrá una capacidad pequeña, con una producción anual de 123 toneladas de PCL. La producción de policarbonato (PC) en España alcanzó en 2021 un total de 352.541 toneladas (Statista, 2022), por lo que el PCL producido podría sustituir aproximadamente a un 0,35% del PC.

Finalmente, para el correcto funcionamiento de una instalación industrial han de tenerse en cuenta una serie de consideraciones en materia de seguridad y medio ambiente. Con ese propósito se desarrolla un apartado de seguridad e impacto ambiental donde se evalúan los riesgos asociados a los productos químicos y equipos empleados, así como a las condiciones de operación, realizando para ello un análisis HAZOP.

3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

3.1. LOCALIZACIÓN DE LA PLANTA

La elección del emplazamiento de la planta es una decisión muy importante; por ello, requiere tener en cuenta una serie de factores que se encuentran relacionados con el proceso de producción que es llevado a cabo en ella, como son: la accesibilidad a las materias primas, para facilitar el suministro de las mismas; la cercanía a la red de carreteras, para la distribución del producto final; y el impacto que la planta pueda tener tanto para la población como para el medio ambiente, buscando que el emplazamiento garantice la seguridad de ambos (INSST).

Por todo lo expuesto anteriormente, se ha decidido localizar la planta en el polígono industrial Valle de Escombreras, situado en el municipio de Cartagena, Murcia (Fig. 5). Esta ubicación resulta de elevado interés debido a su cercanía a la central de ciclo combinado de Cartagena, de la que se obtendrá CO₂, una de las materias primas empleada en la reacción de síntesis final del proceso.

Otro aspecto a destacar sobre la ubicación escogida es su cercanía a la Red de Carreteras del Estado a través de la N-343, que conectará con el centro de distribución de otra de las materias primas, la piel de las naranjas, a través de la A-30. El suministro de las mismas correrá a cargo de CIMUSA, una empresa líder en producción de zumos y derivados de cítricos con una experiencia de más de 40 años y una superficie productiva de 7.500 m², que además protege la comercialización justa y respeta los derechos humanos y medioambientales del sector.



Fig. 5. Situación geográfica de CIMUSA (indicador naranja) y de la Central Térmica de Ciclo combinado de Cartagena, situada en el Polígono Industrial Valle de Escombreras (indicador azul).

La planta podrá ubicarse en la parcela nº51 de este mismo polígono, que actualmente se encuentra sin edificar, con una superficie total de 70.830 m² (Fig. 6).

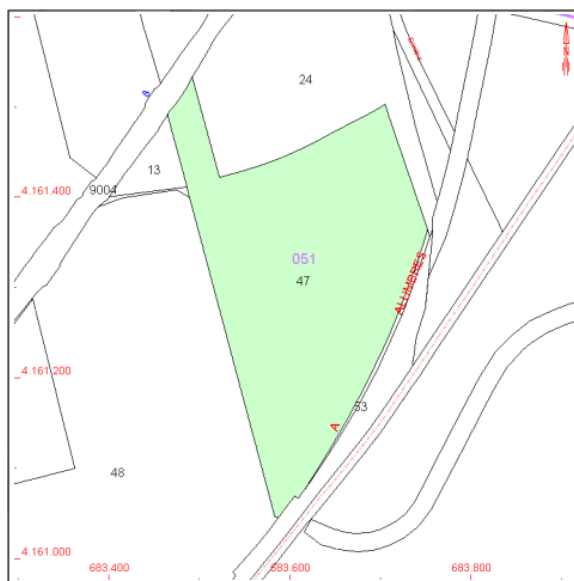


Fig. 6. Localización de la planta de producción de PCL

Se ha decidido ubicar la planta más cerca de la Central Térmica de Ciclo combinado por dos motivos principales: la disponibilidad de terreno suficiente y la dificultad y coste del transporte de CO₂ frente al de la piel de las naranjas.

3.2. POTENCIAL ECONÓMICO Y TAMAÑO DE LA PLANTA

Para hacer una primera evaluación del potencial económico y viabilidad de la planta puede calcularse el margen de ganancia. El margen de ganancia se define como la diferencia entre las ventas del producto y el coste de las materias primas y puede calcularse con la ecuación [1].

$$MG = \sum (\text{Pr o ductos} \cdot \text{Valor}) - \sum (\text{Materias primas} \cdot \text{Valor}) \quad [1]$$

Las materias primas empleadas en el proceso son la piel de las naranjas, de donde se extrae el D- limoneno, una disolución de H₂O₂ al 30% y el CO₂, que se utilizan como reactivos. Como disolventes, se utilizan acetonitrilo y tolueno. Por último, para la purificación del PCL se emplea metanol.

En primer lugar, se considera que la piel de naranja, puesto que supone un residuo para la fábrica de zumos CIMUSA, no tendrán ningún coste asociado. Esto se debe a que la fábrica en cuestión se estaría ahorrando los costes de gestión de este residuo. Por otro lado, se ha encontrado en la literatura que para el CO₂ capturado y la disolución de H₂O₂ es

adecuado considerar un valor de 30 €/t y 470 €/t, respectivamente (Durkin *et al.*, 2019). En el caso del acetonitrilo su precio se encuentra en torno a 1400 €/t, mientras que para el tolueno es de, aproximadamente, 380 €/t (*Actualización del Mercado de Tolueno y Xileno - The Plaza Group*, 2023); este último, semejante al de metanol, que se corresponde con 370 €/t.

La inminente mejora de las tecnologías de captura de carbono y el aumento de precio de los derechos de emisión de CO₂ hace prever una reducción de su coste en los próximos años (BBVA, 2020). Sin embargo, puede verse como la materia prima que influye más negativamente en la economía del proceso es el acetonitrilo. Por ello, encontrar una alternativa más barata al uso de este disolvente orgánico tendría un impacto muy positivo.

El PCL es un material que aún no se produce a escala industrial y, por lo tanto, no posee un valor en el mercado. Por ello, para el cálculo, se considera un precio similar al del policarbonato convencional; este, tal y como se ha podido comprobar, oscila entre 3.000 y 4.000 €/t.

Tabla V. Coste de materias primas, valor del producto y margen de ganancia en M€/año.

	Materia prima	t/año	€/t	€/año
Área I	Piel de las naranjas	3.635	0	0
	CO ₂	8,669	30	260,07
Áreas II y III	Disolución de H ₂ O ₂	112,5	470	52.875
	Acetonitrilo	217,5	1400	304.500
Área IV	CO ₂	53,09	30	1.593
	Tolueno	60,48	380	22.982
	Metanol	60.48	370	22.378
Total coste				404.588
	Producto	kg/año	€/kg	€/año
Área IV	PCL	123.327	3,5	431.644
Margen de ganancia				27.056

3.3. PLANTEAMIENTO

3.3.1. Decisiones de partida

Se desarrolla un proceso a escala industrial para la producción de policarbonato de limoneno (PCL) con el objetivo de obtener un producto que pueda emplearse como sustituto de los policarbonatos convencionales.

El policarbonato de limoneno se obtiene a partir de materias primas renovables como son el D-limoneno, recuperado del aceite esencial contenido en la piel de las naranjas; y el CO₂, recuperado gracias a procesos de captura que pueden incorporarse a las centrales térmicas.

El suministro de D-limoneno es limitado y su precio elevado. Este último, se prevé que aumente en los próximos años (Parrino *et al.*, 2018). Por ello, se opta por incorporar al proceso la extracción del aceite esencial contenido en la piel de las naranjas, con el objetivo de obtener una concentración de D-limoneno superior al 97%.

Este compuesto está presente en la piel de una gran variedad de cítricos; sin embargo, se escogen las naranjas debido a que España es una gran productora de este cítrico, lo que facilita su suministro. Además, el aceite esencial contenido en su piel es el que presenta un porcentaje de D-limoneno más elevado (Zema *et al.*, 2018).

El proceso que se propone es muy novedoso, del que se posee escasa información en la bibliografía y ningún estudio a escala de planta piloto. Esto hace que la instalación que se plantea sea para una producción limitada, lo suficiente como para poder llevar a cabo un diseño y evaluación económica preliminares.

CIMUSA procesa un total de 40.000 t de cítricos anuales. Se desconoce el porcentaje exacto de naranjas, pero dado que la producción global de las mismas abarca aproximadamente un 60% de la producción global de cítricos, se decide aplicar dicho porcentaje. Esto resulta en 24.000 t de naranjas procesadas anualmente. Tal y como se ha comentado anteriormente, la piel supone un 27% del peso total de la fruta; por ello, se considera que, de esas 24.000 t al año, se generan 6.480 t/año de piel residual, o lo que es lo mismo, 17,75 t/día.

El acopio de materias primas se lleva a cabo cada tres días, exceptuando la piel de naranja, el tolueno y el metanol. La piel de naranja se suministra diariamente, lo cual puede realizarse gracias a la cercanía existente con la fuente de suministro. Por su parte, el tolueno y el metanol se suministra cada 7 días. Estas decisiones se toman teniendo en cuenta el tamaño necesario para los depósitos de almacenamiento.

Una primera parte del proceso planteado consiste en la producción del reactivo de síntesis (óxido de limoneno) y opera en continuo; es decir, 24 horas al día durante 7 días a la semana. Sin embargo, la síntesis del PCL tiene lugar en discontinuo, realizándose una carga diaria con la cantidad de reactivo producida en 16 horas. Como consecuencia, es necesario incorporar un tanque pulmón que sea capaz de contener el óxido de limoneno obtenido en la primera parte del proceso.

La entrada total de reactivo al tanque pulmón en un día es, lógicamente, la cantidad producida de este en 24 horas de operación. La salida, por el contrario, es la cantidad de reactivo generada en 16 horas. Esto da lugar a una acumulación de óxido de limoneno y al consecuente llenado del tanque a no ser que se detenga la producción de reactivo.

Se diseña el proceso de tal forma que se lleven a cabo 3 ciclos de producción anuales. Cada ciclo se compone de dos meses donde todas las partes de la instalación se encuentran en operación (tanto la producción continua de óxido de limoneno como la etapa de síntesis discontinua de PCL) y un mes donde únicamente se encuentra en funcionamiento la síntesis discontinua del polímero. Este último mes del ciclo permite vaciar el tanque pulmón, que se habrá llenado tras dos meses de producción continua de reactivo, tal y como se ha explicado anteriormente.

Tres ciclos de producción de tres meses cada uno da lugar a 9 meses de producción anuales, que se harán coincidir con la temporada de recogida de naranjas en España; esta tiene lugar desde octubre hasta junio, ambos incluidos.

3.3.2. Descripción del proceso

El proceso propuesto se divide en tres etapas bien diferenciadas: una primera, que se centra en la extracción del D-limoneno de la materia prima; una segunda, donde el D-limoneno se convierte en óxido de limoneno mediante una reacción de epoxidación; y una tercera y última etapa, donde se lleva a cabo la síntesis del policarbonato de limoneno a través de una reacción de copolimerización con CO₂.

3.3.2.1. Extracción de D-limoneno de la piel de las naranjas

La primera etapa del proceso se corresponde con el tratamiento de la materia prima (Área I, véase 5.DIAGRAMA DE FLUJO). Para ello, se realiza una extracción sólido-fluido (conocida como lixiviación), empleando como disolvente CO₂ supercrítico.

Este método de extracción es seleccionado tras realizar una exhaustiva revisión literaria, donde se comparan las distintas técnicas de extracción de aceites esenciales que existen actualmente con el objetivo de elegir la que menos perjudique a la sostenibilidad del proceso. Una de las principales ventajas de la extracción con CO₂ supercrítico es la elevada pureza en D-limoneno del aceite esencial extraído, siendo innecesaria una posterior etapa de purificación.

En primer lugar, la piel de naranja se introduce en el extractor (E-I.1, véase 5.DIAGRAMA DE FLUJO). Durante el transcurso del proceso, el CO₂ en estado supercrítico atraviesa el equipo, produciéndose la extracción del aceite esencial. A la salida del extractor, el disolvente pierde intencionadamente las condiciones supercríticas, haciendo que disminuya

drásticamente la solubilidad del D-limoneno. Ambos compuestos son introducidos en un separador gas-líquido (S-I.1, véase 5.DIAGRAMA DE FLUJO), obteniendo como resultado una corriente gaseosa de CO₂, que es recirculada al proceso, y una corriente líquida de D-limoneno.

Al finalizar la extracción, el extractor ha de descargarse y volver a cargarse de nuevo. La naturaleza del proceso es, por tanto, discontinua. Sin embargo, se colocan dos extractores en paralelo, de forma que mientras uno se encuentra en carga y descarga de sólidos, el otro esté operando.

En esta primera etapa se genera una corriente sólida residual abundante, que consiste en la piel de las naranjas una vez se ha extraído el aceite esencial. Uno de los beneficios del tratamiento de extracción utilizado es que no se contamina la materia prima, lo que facilita el procesamiento posterior de las pieles. Teigiserova *et al.* (2022) sugieren que, tras haber extraído los aceites esenciales, la piel de las naranjas puede utilizarse como materia prima para producir pienso animal, sometiéndola previamente a un proceso de fermentación. Esto no se desarrollará en el presente trabajo, pero abre una nueva posibilidad hacia la valorización de la piel de las naranjas que permite cerrar su ciclo de vida sin recurrir a procesos poco sostenibles como la incineración o disposición en vertederos.

El producto principal del Área I es D-limoneno al 97%, que abandona el separador gas-líquido para ser introducido en la segunda parte del proceso.

3.3.2.2. Epoxidación de limoneno con H₂O₂ para la obtención de óxido de limoneno

Esta etapa se compone de las Áreas II y III y tiene como objetivo principal obtener óxido de limoneno (C₁₀H₁₆O), para lo cual se lleva a cabo una reacción química conocida como epoxidación. Las reacciones de epoxidación consisten en una transferencia de un átomo de oxígeno de un compuesto peroxi a un alqueno. El mecanismo de reacción comienza con la rotura de uno de los dobles enlaces del alqueno, formando un intermediario llamado oxirano. De esta manera, el átomo de oxígeno cedido por el peróxido se enlaza a los átomos de carbono que solían estar unidos por el doble enlace, dando lugar a un anillo de tres miembros con un átomo de oxígeno y dos átomos de carbono (Parker e Isaacs, 1959).

En este caso, se utiliza peróxido de hidrógeno (H₂O₂) como agente oxidante. Este compuesto cede un átomo de oxígeno al D-limoneno (C₁₀H₁₆), transformándolo en un epóxido conocido como óxido de limoneno (C₁₀H₁₆O). Este epóxido tiene un carbono que actúa como centro quiral debido a la presencia del átomo de oxígeno en su estructura, haciendo posible la existencia de dos estereoisómeros: el (4R,6S)-óxido de limoneno y el (4S,6R)-óxido de limoneno. Para la posterior etapa de síntesis es importante obtener la mayor cantidad de (4S,6R)-óxido de limoneno posible; por esta razón, se utiliza un catalizador de PW-Amberlita,

ya que, tal y como justifican Barrera et al. (2006), permite obtener tanto una alta selectividad de este epóxido (>90%) como elevadas conversiones (>80%).

La corriente de D-limoneno al 97% abandona la primera etapa y entra al reactor (R-II.1 en 5.DIAGRAMA DE FLU), donde se introduce una corriente que contiene una disolución de H₂O₂ al 30% y acetonitrilo (C₂H₃N). Este último actúa como disolvente. La reacción [1] tiene lugar en condiciones muy suaves, concretamente a una temperatura de 33°C y a una presión de 1 atm. Sin embargo, es una reacción exotérmica, haciendo que sea necesario un encamisado por el que circule un fluido refrigerante, permitiendo de esta manera el control de la temperatura.



A la salida del reactor se posee una corriente líquida formada por los productos de reacción (H₂O y óxido de limoneno), los reactivos que no hayan reaccionado (D-limoneno y H₂O₂) y el disolvente (acetonitrilo).

La siguiente área en esta etapa del proceso consiste en la separación de los componentes, para obtener así una corriente de salida con un alto contenido en óxido de limoneno. Para ello, se realiza una destilación multicomponente (D-III.1 en 5.DIAGRAMA DE FLU) donde se introduce la corriente que sale del reactor. Por cabezas se obtiene, fundamentalmente, H₂O₂, H₂O, C₂H₃N y gran parte del C₁₀H₁₆; por colas, el C₁₀H₁₆ restante y en torno a un 95% del C₁₀H₁₆O.

Con la intención de recuperar la mayor cantidad de componentes posible se recircula la corriente de destilado. Para evitar acumulación de sustancias en el proceso se realiza una purga.

El producto de las Áreas II y III, y por lo tanto flujo de entrada a la tercera y última etapa del proceso (Área IV en 5.DIAGRAMA DE FLUJO), se corresponde con el óxido de limoneno (C₁₀H₁₆O) obtenido en la corriente de residuo de la destilación, el cual posee una pureza superior al 98%.

3.3.2.3. Síntesis de policarbonato de limoneno (PCL) a partir de óxido de limoneno y CO₂

En esta última etapa se obtiene el producto final del proceso mediante una reacción de copolimerización, en la que intervienen el dióxido de carbono gas (CO₂) y el óxido de limoneno (C₁₀H₁₆O).

La síntesis de PCL (reacción [2]) consiste en una reacción bifásica de copolimerización, la cual es exotérmica. La copolimerización implica la unión de dos o más monómeros que tienen estructuras diferentes en la misma cadena polimérica. Este tipo de

reacción es muy utilizada en la producción de polímeros, ya que permite obtener polímeros con una gran variedad de propiedades.

Esta reacción [2] se lleva a cabo a 25 °C y a 10 bar de presión (R-IV.1 en 5.DIAGRAMA DE FLU). Su entalpía de reacción es de -110 kJ/mol (Durkin *et al.*, 2019). Las corrientes de entrada al equipo son el óxido de limoneno, el tolueno (C₆H₅CH₃) y el CO₂, que se burbujea sobre la mezcla líquida de C₁₀H₁₆O y tolueno (medio de reacción) para obtener un mejor contacto entre los reactivos. Como catalizador se utiliza el complejo *β-Diiminato de Zinc ((BDI)ZnOAc)*, soluble en la mezcla de óxido de limoneno y tolueno, permitiendo alcanzar conversiones superiores al 90% (Hauenstein *et al.*, 2016).



Del reactor se obtiene una mezcla líquida compuesta por el PCL, el óxido de limoneno y el CO₂ sin reaccionar, el tolueno y el catalizador. Esta mezcla se lleva a un separador bifásico donde se retira el CO₂ en fase gas, con una elevada pureza, y se recircula al reactor.

Posteriormente el PCL se precipita utilizando un exceso de metanol. Este metanol, además, reactiva el catalizador. En esta parte del proceso se supone una completa precipitación del PCL, por lo que la mezcla líquida resultante contiene metanol, tolueno, catalizador, óxido de limoneno y CO₂ disuelto. La mezcla líquida que sale del precipitador podría llevarse a una etapa de separación y recuperación de componentes, con el objetivo de reutilizar la mayor cantidad de compuestos posible; sin embargo, no se aborda en el presente trabajo. El producto del Área IV es, en definitiva, el producto del proceso global: policarbonato de limoneno.

3.4. DIAGRAMA DE BLOQUES

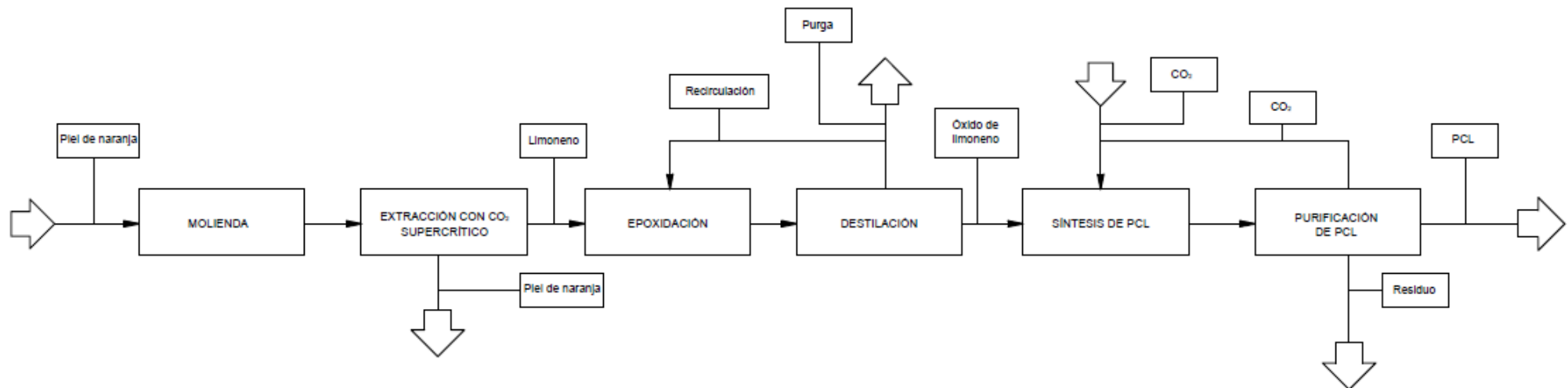


Fig. 7. Diagrama de bloques del proceso.

4. BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

Tabla VI. Balance de materia y energía para el Área I.

ÁREA I: OBTENCIÓN DE LIMONENO													
Compuesto		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Flujo másico (kg/h)	Piel de naranja	554,8	554,8	531,2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Flujo molar (mol/h)	CO ₂	0	0	0	314.512	314.512	314.512	314.512	31.512	314.512	314.512	314.512	0
	C ₁₀ H ₁₆	183,3	183,3	10,24	173,0	173,0	0	0	0	0	0	0	173,0
T (K)		298,2	298,2	308,0	308,0	293,2	293,2	273,2	273,2	273,2	278,2	308,0	293,2
p (kPa)		101,3	101,3	101,3	12.800	5.715	5.715	5.715	5.715	5.715	12.800	12.800	5.715
*H (KJ/mol)		-	-	-	0	0	0	-7,519	-7,519	-7,519	-6,997	0	0

*La entalpía se calcula tomando como estado de referencia H₄=0.

Tabla VII. Balance de materia y energía para el Área II y III.

ÁREA II y III: EPOXIDACIÓN Y SEPARACIÓN. OBTENCIÓN DE ÓXIDO DE LIMONENO																
Compuesto		12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26
Flujo molar (mol/h)	C ₁₀ H ₁₆	173,0	173,0	173,0	191,3	28,69	28,69	26,09	7,827	18,26	18,26	0	0	0	0	2,603
	H ₂ O ₂	0	0	0	381,5	218,9	218,9	218,9	65,68	153,3	153,3	228,3	0	228,3	228,3	0
	H ₂ O	0	0	0	3.732	3.894	3.894	3.894	1.168	2.726	2.726	1.006	0	1.006	1.006	0
	C ₂ H ₃ N	0	0	0	4.063	4.063	4.063	4.063	1.219	2.844	2.844	0	1.219	1.219	1.219	0
	C ₁₀ H ₁₆ O	0	0	0	5,897	168,5	168,5	8,424	2,527	5,897	5,897	0	0	0	0	160,1
T (K)		293,15	296,9	306,2	306,2	306,2	350,2	350,2	350,2	350,2	306,2	298,2	298,2	298,2	306,2	479,3
p (kPa)		5.715	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3
*H (KJ/mol)		-0,298	-0,298	1,967	0,684	0,689	4,747	4,579	4,579	4,579	0,665	0	0	0	0,642	52,01

*La entalpía se calcula tomando como estado de referencia 25°C y 101,315 kPa.

Tabla VIII. Balance de materia y energía para el Área IV.

ÁREA IV: SÍNTESIS DE POLICARBONATO DE LIMONENO (PCL)									
Compuesto		27	28	29	30	31	32	33	34
Flujo molar (mol/lote)	CO ₂	0	0	0	572.357	572.357	572.357	574.662	574.662
	C ₁₀ H ₁₆	41,64	0	41,64	41,64	0	0	0	0
	C ₁₀ H ₁₆ O	2.561	0	2.561	256,1	0	0	0	0
	C ₆ H ₅ CH	0	2.404	2.404	2.404	0	0	0	0
	CH ₃ OH	0	0	0	0	0	0	0	0
	PCL	0	0	0	2.305	0	0	0	0
T (K)		298,2	298,2	298,2	298,2	298,2	450,2	298,2	450,2
P (kPa)		101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	202,6	202,6	10.000
H (kJ/mol)		0	0	0	0	0	2,698	-3,389	4,232
Compuesto		35	36	37	38	39	40	41	
Flujo molar (mol/lote)	CO ₂	574.662	0	0	0	0	0	0	
	C ₁₀ H ₁₆	0	41.64	41.64	41.64	0	0	0	
	C ₁₀ H ₁₆ O	0	256,1	256,1	256,1	0	0	0	
	C ₆ H ₅ CH	0	2.404	2.404	2.404	0	0	0	
	CH ₃ OH	0	0	6.914	6.914	0	6.915	6.915	
	PCL	0	2.305	2.305	0	2.305	0	0	
T (K)		298,2	298,2	298,2	298,2	298,2	298,2	298,2	
p (kPa)		10.000	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	
*H (kJ/mol)		-1,855	0	0	0	0	0	0	

*La entalpía se calcula tomando como estado de referencia 25°C y 101,315 kPa.

4.1. BALANCES DE MATERIA

El balance de materia del proceso consiste en realizar balances de materia globales y locales, tanto a compuestos concretos como a corrientes totales. En todos los casos ha de cumplirse el principio de conservación de masa:

$$(\text{Masa})_{\text{ENTRADA}} = (\text{Masa})_{\text{SALIDA}} + (\text{Masa})_{\text{ACUMULACIÓN}}$$

Cuando el balance se realiza en moles, la cantidad a la entrada no tienen por qué ser igual a la cantidad de salida. En el caso de que haya reacción química, ha de cumplirse el siguiente principio:

$$(\text{Mol})_{\text{ENTRADA}} - (\text{Mol})_{\text{SALIDA}} + (\text{Mol})_{\text{GENERACIÓN}} - (\text{Mol})_{\text{CONSUMO}} = (\text{Mol})_{\text{ACUMULACIÓN}}$$

Puesto que el balance se realiza en estado estacionario, se eliminan los términos de acumulación, que toman un valor de 0.

A continuación, se procede a explicar el procedimiento seguido. Para un mejor seguimiento del mismo, se recomienda acudir al diagrama de flujo que se presenta en el apartado 5.

En el Área I el balance de materia es sencillo, tal y como puede verse en la Tabla VI, dado que únicamente hay $\text{C}_{10}\text{H}_{16}$ y CO_2 . Además, el CO_2 se recircula completamente.

En el Área II y III el balance es algo más complejo, puesto que hay una reacción química, una destilación y una recirculación con purga (con fracción de purga igual a F_P). Inicialmente, se han de establecer una serie de condiciones:

1. La conversión alcanzada en el reactor R-II.1 con respecto al $\text{C}_{10}\text{H}_{16}$ es del 85% (Barrera *et al.*, 2009).
2. Por cada mol de $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}$ alimentado al reactor, se introducen 2 mol de H_2O_2 y 21,24 mol de $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$ (Barrera *et al.*, 2009).
3. La disolución de H_2O_2 en agua está al 30% en peso.
4. La recuperación de $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}$ en la columna de destilación D-III.1 se corresponde aproximadamente con un 95% (en moles).
5. Prácticamente toda la cantidad de H_2O_2 , H_2O y $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$ abandona la columna por el destilado; es decir, se desprecia la cantidad de estos compuestos presentes en el residuo.

A continuación, se muestran las ecuaciones que resultan de los distintos balances realizados a las Áreas II y III (véase 5. DIAGRAMA DE FLUJO). El subíndice hace referencia al compuesto involucrado en el balance y, entre paréntesis, se hace referencia a la corriente según el número asignado a esta en el diagrama de flujo.

Balance en moles al C₁₀H₁₆ en las áreas II y III.

$$n_{C_{10}H_{16}}(15) = n_{C_{10}H_{16}}(14) + [n_{C_{10}H_{16}}(15) \cdot (1 - X_{C_{10}H_{16}}) - n_{C_{10}H_{16}}(26)] \cdot (1 - F_P) \quad [1]$$

Balance de materia en moles al C₁₀H₁₆O en las áreas II y III.

$$n_{C_{10}H_{16}O}(15) = [n_{C_{10}H_{16}O}(15) + n_{C_{10}H_{16}}(15) \cdot X_{C_{10}H_{16}}] - n_{C_{10}H_{16}O}(26) \quad [2]$$

Balance de materia en moles al H₂O₂ en las áreas II y III.

$$n_{H_2O_2}(15) = n_{H_2O_2}(25) + [n_{H_2O_2}(15) - n_{C_{10}H_{16}}(15) \cdot X_{C_{10}H_{16}}] \cdot (1 - F_P) \quad [3]$$

Balance de materia en moles al H₂O en las áreas II y III.

$$n_{H_2O}(15) = n_{H_2O}(25) + [n_{H_2O}(15) + n_{C_{10}H_{16}}(15) \cdot X_{C_{10}H_{16}}] \cdot (1 - F_P) \quad [4]$$

Balance de materia en moles al C₂H₃N a las áreas II y III.

$$n_{C_2H_3N}(15) = n_{C_2H_3N}(25) + n_{C_2H_3N}(15) \cdot (1 - F_P) \quad [5]$$

Balance de materia en masa total a las áreas II y III.

$$m_T(22) + m_T(23) + m_T(14) = m_T(19) + m_T(26) \quad [6]$$

Donde:

$$m_T(22) = n_{H_2O_2}(22) \cdot Pm(H_2O_2) + n_{H_2O}(22) \cdot Pm(H_2O)$$

$$m_T(23) = n_{C_2H_3N}(23) \cdot Pm(C_2H_3N)$$

$$m_T(26) = n_{C_{10}H_{16}}(26) \cdot Pm(C_{10}H_{16}) + n_{C_{10}H_{16}O}(26) \cdot Pm(C_{10}H_{16}O)$$

$$m_T(19) = n_{C_2H_3N}(19) \cdot Pm(C_2H_3N) + n_{H_2O_2}(19) \cdot Pm(H_2O_2) + n_{C_{10}H_{16}}(19) \cdot Pm(C_{10}H_{16}) \\ + n_{C_{10}H_{16}O}(19) \cdot Pm(C_{10}H_{16}O)$$

En las ecuaciones se reconocen un total de 11 incógnitas, las cuales se listan a continuación:

- $n_i(15)$, es decir, 5 incógnitas
- $n_i(25)$, es decir, 3 incógnitas

- n_i (26), es decir, 2 incógnitas
- F_P (fracción de purga)

Puesto que se poseen 6 ecuaciones, para resolver el sistema es necesario encontrar 5 relaciones adicionales. Sin embargo, únicamente se encuentran 4, las cuales se muestran en las ecuaciones [7], [8], [9], y [10].

De la condición número 2:

$$n_{C_2H_3N}(15) = 21,24 \cdot n_{C_{10}H_{16}}(15) \quad [7]$$

$$n_{H_2O_2}(15) = 2 \cdot n_{C_{10}H_{16}}(15) \quad [8]$$

De la condición número 3:

$$n_{H_2O}(22) = 0,7 \cdot [n_{H_2O_2}(22) \cdot \frac{Pm(H_2O_2)}{0,3}] \quad [9]$$

De la condición número 4:

$$n_{C_{10}H_{16}O}(26) = 0,95 \cdot [n_{C_{10}H_{16}O}(15) + n_{C_{10}H_{16}}(15) \cdot X_{C_{10}H_{16}}] \quad [10]$$

Se posee un grado de libertad, por lo que se establece una fracción de purga (f_P) inicial de 0,15 (en tanto por uno). Con este valor se observó que las cantidades de acetonitrilo y agua que entraban en la columna de destilación eran muy elevadas. Esto implicaría unos requerimientos energéticos de la columna de destilación muy altos, puesto que habría que evaporar una cantidad muy grande de ambos compuestos. Como consecuencia, se decide aumentar la fracción de purga hasta un valor que permita tanto tener unas cantidades de agua y acetonitrilo más razonables a la entrada de la columna de destilación como no desperdiciar un volumen elevado ni de disolvente (C_2H_3N) ni de reactivo ($C_{10}H_{16}$). Finalmente, se opta por una fracción de purga de 0,3 (en tanto por uno).

En el Área IV el balance es más sencillo, aunque haya reacción química y recirculación de CO_2 . Esto se debe fundamentalmente a que no se recirculan compuestos inertes y, por lo tanto, no hace falta incluir una purga. Las únicas condiciones que hay que establecer son la relación molar que ha de haber entre el óxido de limoneno y el CO_2 a la entrada del reactor, la cual se corresponde con 224,4 moles de CO_2 por cada mol de $C_{10}H_{16}O$, y la conversión alcanzada en el reactor R-IV.1 (véase 5.DIAGRAMA DE FLUJO), pudiendo considerarse un 90%.

Conociendo ambas, basta con evaluar los nodos y hacer un balance al reactor R-IV.1 tanto al óxido de limoneno como al dióxido de carbono.

Balance de materia en moles al C₁₀H₁₆O en el área IV.

$$n_{\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}}(30) = n_{\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}}(29) \cdot (1 - X_{\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}}) \quad [11]$$

Balance de materia en moles al CO₂ en el área IV.

$$n_{\text{CO}_2}(30) = n_{\text{CO}_2}(35) - n_{\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}}(30) \cdot X_{\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}} \quad [12]$$

4.2. BALANCES DE ENERGÍA

La energía puede manifestarse de muchas maneras y transmitirse de diversas formas. Suele medirse en J, J/Kg o W (J/s). El *principio de conservación de la energía* establece que esta ni se crea ni se destruye, únicamente se transforma. La aplicación de este principio permite deducir la siguiente expresión:

$$\begin{array}{ccccccc} \text{(Cantidad de} & & \text{(Cantidad de} & & \text{(Cantidad de} & & \text{(Cantidad de} \\ \text{energía} & & \text{energía} & & \text{energía} & & \text{energía} \\ \text{acumulada} & = & \text{recibida del} & - & \text{liberada al} & + & \text{generada en} \\ \text{en el} & & \text{exterior por el} & & \text{exterior por el} & & \text{el interior del} \\ \text{sistema)} & & \text{sistema)} & & \text{sistema)} & & \text{sistema)} \end{array}$$

O lo que es lo mismo:

$$[A] = [E] - [S] + [G]$$

El flujo de energía cinética (K) se corresponde con la energía que posee un cuerpo cuando este se encuentra en movimiento; esta depende directamente del caudal másico y de la velocidad de circulación.

$$K = \frac{1}{2} \dot{m} V_e^2 \quad [13]$$

Por otro lado, la energía potencial consiste en la energía que posee un cuerpo en función de su posición con respecto al campo gravitatorio; esta depende directamente de la altura del cuerpo.

$$\phi = m g z \quad [14]$$

La energía interna (U) es la medida macroscópica de las energías de las moléculas y átomos de un sistema. Para un cuerpo, será la suma de las energías cinética y potencial

asociada a las partículas que constituyen dicho cuerpo. Esta es función de la temperatura, composición y estado de agregación, y suele relacionarse con la entalpía (H).

El calor (Q) y el trabajo (W) son otras formas de energía que se consideran energía en tránsito; su aporte a un sistema constituye una manera de aumentar alguna de las anteriores. La transmisión de calor se producirá por diferencia de temperaturas, y siempre del foco caliente al foco frío. El trabajo, por su parte, es la energía debido a la acción de fuerzas mecánicas.

Como conclusión de todo lo anteriormente comentado, se identifican diversos procesos con los que un sistema intercambia energía con los alrededores: transferencia de materia, transmisión de calor y trabajo de eje. Para realizar balances macroscópicos de energía, generalmente se utiliza la *ecuación de la conservación de energía* en régimen estacionario (ecuación [15]).

$$g(z_E - z_S) + (H_E - H_S) + \frac{1}{2}(V_{e,E}^2 - V_{e,S}^2) + Q + W_{eje} = 0 \quad [15]$$

Esta ecuación muestra que, en estado estacionario, todas las formas de energía han de compensarse, de tal manera que el contenido global de energía de un sistema no se vea alterado, siendo la suma neta de todas las variaciones igual a 0.

Con frecuencia, en los reactores químicos, las variaciones de energía potencial y cinética pueden considerarse despreciables frente a la variación de entalpía y frente al calor y trabajo intercambiados con los alrededores. Para simplificar los cálculos, el balance de energía al proceso se reducirá a un balance entálpico; en él, todos los intercambios de trabajo y calor se traducen en una modificación de la entalpía del sistema.

La entalpía puede expresarse en función de la temperatura y la presión, tal y como se muestra en la ecuación [16]. Esta es una propiedad de la cual no se pueden calcular valores absolutos, únicamente variaciones; por ello, es necesario establecer un estado de referencia.

$$H = U(T) + PV \quad [16]$$

Cuando hay una variación de temperatura a presión constante, el cambio de entalpía puede calcularse a través de la ecuación [17].

$$H = H_{T_{ref}} + \int_{T_{ref}}^T c_p(T) dT \quad [17]$$

El calor específico a presión constante (c_p) depende de la temperatura. Puede expresarse en forma de un polinomio de tercer grado (ecuación [18]), en función de unas constantes (a, b, c y d) que se encuentran tabuladas para los diferentes compuestos.

$$c_p = a + bT + cT^2 + dT^3 \quad [18]$$

Por el contrario, cuando se produce un cambio de presión a temperatura constante, el cambio de entalpía puede calcularse a través de la ecuación [19].

$$H = H_{P_{ref}} + V\Delta P \quad [19]$$

Por otro lado, cuando una sustancia experimenta una vaporización o una condensación (es decir, un cambio de fase), tiene lugar una liberación o consumo de energía, respectivamente. Esta magnitud está definida para cada compuesto y se conoce como variación de entalpía de vaporización ($\Delta H_{vap} = -\Delta H_{cond}$). Generalmente, se encuentra tabulada para condiciones estándar (25°C y 1 atm); con el objetivo de estimar su valor a otras condiciones de presión y temperatura se utilizan las ecuaciones [20] y [21], respectivamente. La ecuación [20] se conoce como ecuación de Clausius-Clapeyron.

$$\ln(P) = \frac{-\Delta H_{vap}}{RT} + C \quad [20]$$

$$\Delta H_{vap,T} = \Delta H_{vap}^{\circ} + \int_{T_{ref}}^T c_p(T) dT \quad [21]$$

Estas ecuaciones serán las que se apliquen en los diferentes puntos del proceso en los que tenga lugar una variación, bien de temperatura, de fase o de presión, sobre las condiciones de referencia.

Se hacen, a su vez, una serie de consideraciones con el objetivo de simplificar los cálculos:

- La entalpía total de la mezcla es la suma de las entalpías de cada compuesto.
- No se tiene en cuenta la variación de entalpía que tiene lugar al mezclar y disolver distintas sustancias.
- No se tiene en cuenta el intercambio de calor con el ambiente por diferencia de temperatura que tengan lugar cuando el fluido circula por las tuberías de la instalación.
- No se tiene en cuenta el trabajo ejercido por agitación en los reactores.

En el proceso se cuentan con varios equipos que realizan trabajo sobre el sistema, como bombas y compresores.

Las bombas de impulsión comunican energía al fluido con el objetivo de vencer las pérdidas energéticas debidas a la fricción ocasionada por la circulación del fluido en la tubería, para ello suministran energía en forma de presión. Esta variación de energía no se encuentra reflejada en las tablas, esto se debe a que la presión que se muestra para cada corriente hace referencia a la presión requerida en el equipo al que se dirigen. En la práctica, la corriente a la salida de la bomba poseerá una presión mayor que a la entrada, la cual irá disminuyendo a medida que se pierde energía por fricción.

Las bombas que llevan a cabo una función de compresión, así como los compresores, realizan un trabajo sobre el fluido, aumentando su presión hasta la presión requerida en el siguiente equipo. Estas variaciones de presión si se reflejan en las tablas, con su consecuente aumento de la entalpía. Tal y como se deduce de todo lo explicado anteriormente, puesto que las compresiones son consideradas isotérmicas:

$$W_{\text{compresión}} = H - H_{P_{\text{ref}}} = V\Delta P \quad [22]$$

Por otro lado, existen varios puntos donde es llevado a cabo un aumento o disminución de la temperatura de las corrientes, a presión constante. Este aporte o retirada de calor viene dado bien por otra corriente del proceso o bien por servicios auxiliares. Como consecuencia, se produce una variación de entalpía:

$$Q = H - H_{T_{\text{ref}}} = \int_{T_{\text{ref}}}^T c_p(T) dT \quad [23]$$

Finalmente, en los reactores se produce una variación de entalpía asociada a la reacción; esta variación de entalpía se conoce como entalpía de reacción. En este caso, son reacciones exotérmicas (entalpía de reacción negativa) y por lo tanto se libera calor. Esto produciría un aumento de la temperatura; sin embargo, ambos reactores se encuentran refrigerados para que la reacción se lleve a cabo en condiciones isotérmicas. Todo el calor liberado será absorbido por el sistema de refrigeración, de forma que la temperatura de la corriente de salida sea la misma que la temperatura de la corriente de entrada.

5. DIAGRAMA DE FLUJO

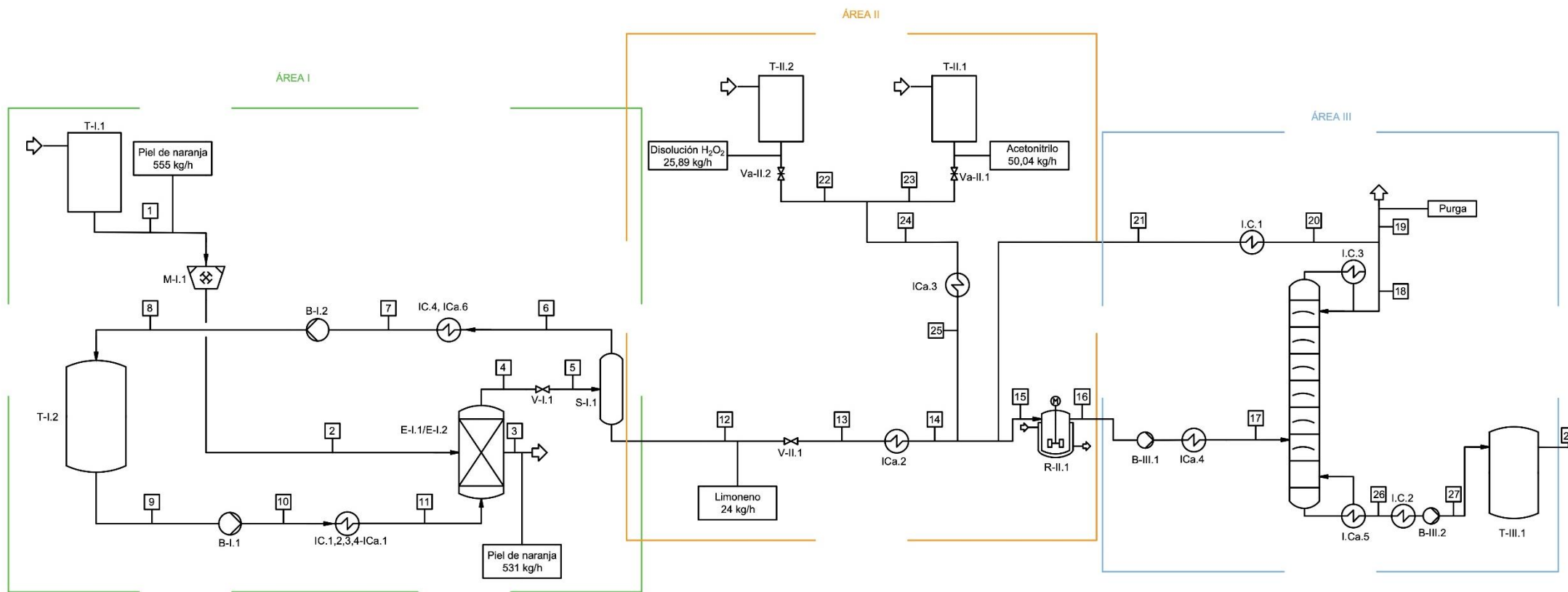


Fig. 8. Diagrama de flujo parte continua (Áreas I, II y III).

6. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA DEL PROCESO

6.1. ANÁLISIS *PINCH*: DETERMINACIÓN DE NECESIDADES MÍNIMAS DE SERVICIOS

La integración energética es un pilar fundamental a la hora de concebir un proceso industrial sostenible. Su objetivo principal es aprovechar la energía de las corrientes calientes en calentar las corrientes frías, minimizando las necesidades de servicios externos de calefacción y refrigeración.

Para llevar a cabo la integración energética se aplicará el algoritmo *pinch*. Este algoritmo se basa en el principio de que, si existiera algún punto de la integración en el que el gradiente de temperatura de las corrientes fuera 0, no habría transferencia de calor. Este punto, se conocería como punto *pinch* o punto de pliegue. En la práctica, se establece un ΔT_{\min} , de tal forma que en el punto de pliegue la diferencia de temperatura entre la corriente caliente y la corriente fría sea de dicho valor. La zona del pinch es la más crítica del proceso; esto se debe a que, al ser ΔT baja, la transmisión de calor será más lenta y serán necesarios cambiadores de mayor área.

Un menor valor de ΔT_{\min} da lugar a una mayor recuperación energética; es decir, menos costes en servicios auxiliares pero una gran inversión en intercambiadores de calor de mayor tamaño. Un valor de ΔT_{\min} más elevado reduce los costes de los intercambiadores de calor, pero aumenta las necesidades de servicios auxiliares de calefacción y/o refrigeración. La elección del ΔT_{\min} es, por lo tanto, muy relevante. En la industria química suele optarse por fijar un valor de $\Delta T_{\min}=10$ (Kemp, 2007), por lo que se escoge dicho valor.

En este proceso hay tres áreas operando en continuo y una cuarta, donde tiene lugar la síntesis de PCL, que opera en discontinuo. Como consecuencia, no se incluye el área IV en la integración energética. Tampoco puede hacerse de manera independiente, puesto que únicamente posee una corriente que ha de enfriarse y una refrigeración del reactor R-IV.1.

El primer paso consiste en identificar las corrientes del proceso que experimentan una variación de temperatura, lo cual se muestra en la Tabla IX. En esta tabla puede observarse, para cada corriente, las temperaturas de entrada (T_e) y salida (T_s), la variación de entalpía que experimentan al calentarse o enfriarse (ΔH) y el CP ($CP=c_p \cdot w$, donde c_p es el calor específico a presión constante en kJ/kg K y w es el flujo másico en kg/s). El valor de este último se calcula como el cociente entre la variación de entalpía y la variación de temperatura, y hace referencia al producto del flujo másico por el calor específico de la corriente. Estos datos se extraen de la Tabla VI, Tabla VII y Tabla VIII, las cuales se corresponden con los balances de materia y energía del proceso.

Tabla IX. Extracción de corrientes de las áreas I, II y III.

Número	Área	Corriente	T_e (°C)	T_s (°C)	ΔH (kW)	CP (kW/K)
1	I	6 a 7	20	0	656,9	32,84
2		10 a 11	5	34,85	611,3	20,48
3	II	13 a 14	23,8	33	0,109	0,012
4		24 a 25	25	33	0,436	0,055
5		20 a 21	77	33	6,242	0,142
6	III	16 a 17	33	77	9,443	0,215
7		Condensador D-III.1	77	76	338,9	338,9
8		Calderín D-III.1	206	207	368,1	368,06
9		26 a 27	206	25	2,351	0,013

Posteriormente, se lleva a cabo lo que se conoce como “cascada de energía”. El principal objetivo es determinar los servicios mínimos de refrigeración y calefacción, así como la temperatura a la que se encuentra el punto de pliegue (T_{pinch}), los resultados se muestran en la Tabla X. Todo ello puede representarse gráficamente a partir de la curva compuesta global, la cual se muestra en la Fig. 10.

Tabla X. Temperatura del punto de pliegue y servicios de calefacción y refrigeración.

T_{pinch} (°C)	15
Servicios de calefacción (kW)	539,5
Servicios de refrigeración (kW)	554,5

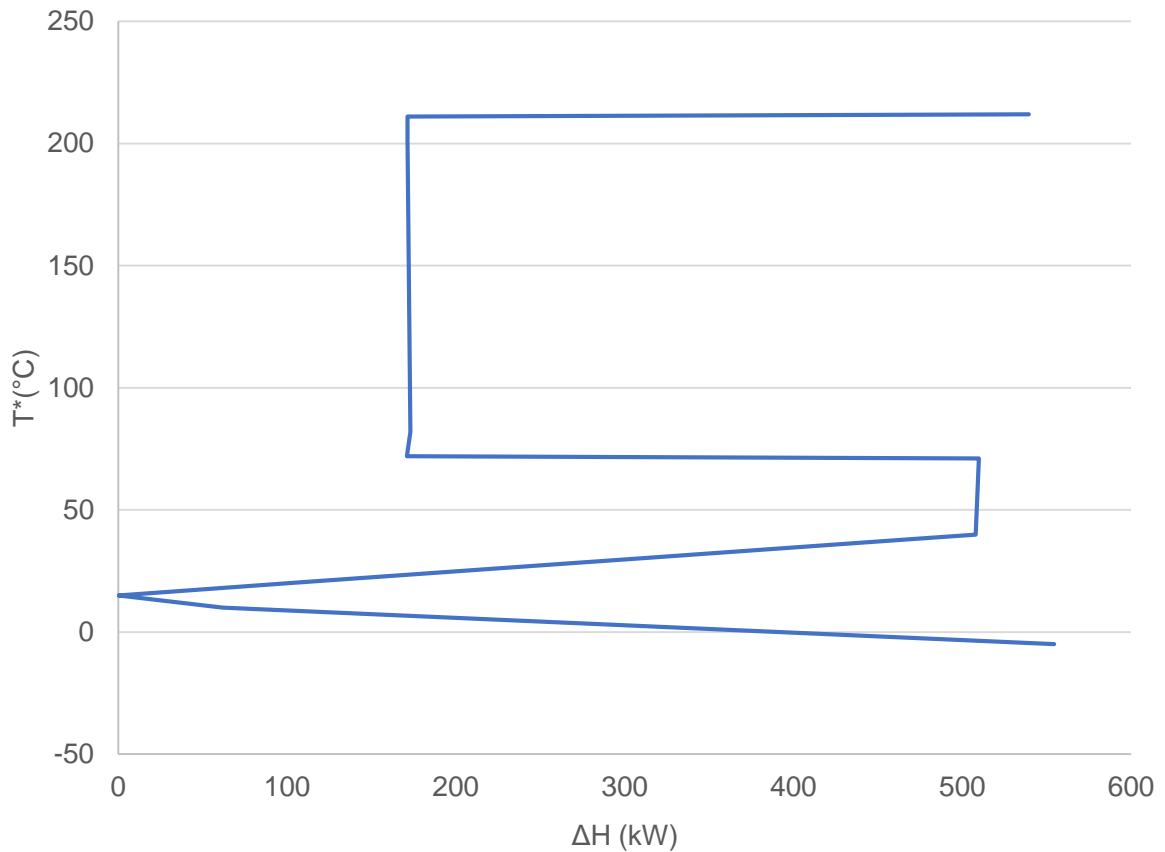


Fig. 10. Curva compuesta global que resulta de la integración energética.

6.2. TOPOLOGÍA DE LA RED DE CAMBIADORES DE CALOR

La topología de la red de cambiadores de calor se realiza con el objetivo de determinar el número mínimo de equipos, al mismo tiempo que se maximiza el calor intercambiado entre las corrientes del proceso.

El punto de pliegue delimita dos regiones térmicamente independientes: por encima del pinch y por debajo del pinch. Por encima del pinch únicamente puede haber servicios de calefacción, mientras que por debajo del pinch sólo pueden concebirse servicios de refrigeración. Además, entre ambas zonas no debe existir intercambio de calor.

El proceso que se lleva a cabo consiste en realizar un emparejamiento de corrientes tanto por encima como por debajo del pinch, aplicando una serie de reglas:

- Se comienza por la zona más restrictiva: desde el pinch hacia fuera.
- Los emparejamientos factibles entre corrientes que pasan por el pinch han de cumplir el criterio de los CP. Este consiste en que, por encima del pinch, el CP de la corriente fría ha de ser mayor que el CP de la corriente caliente, de forma

que se cumpla el ΔT_{\min} ; lo cual, por debajo del pinch, se cumple cuando el CP de la corriente caliente es mayor que el de la corriente fría.

- Ha de maximizarse el calor intercambiado en cada emparejamiento
- Cuando se emparejan corrientes lejos del pinch, se relaja el criterio de los CP; es decir, hay más flexibilidad. Igualmente, ha de comprobarse que se cumple la diferencia de temperatura mínima en ambos extremos del cambiador.

La topología que resulta tras aplicar este procedimiento se muestra en la Fig. 11.

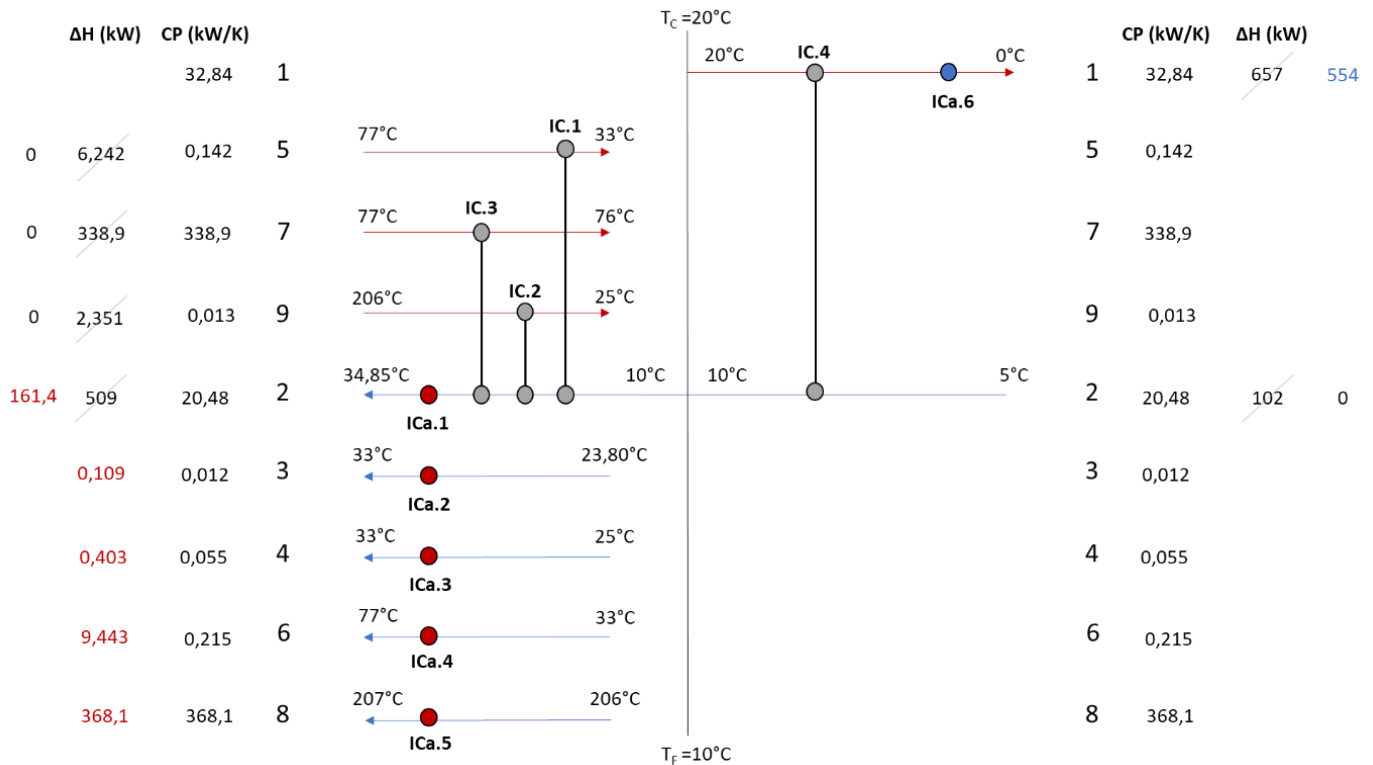


Fig. 11. Topología de la red de cambiadores de calor.

6.3. DISEÑO DE LOS INTERCAMBIADORES DE CALOR

La integración energética resulta en un total de 10 intercambiadores de calor. En 4 de ellos intervienen únicamente corrientes del proceso (IC.1, IC.2, IC.3 e IC.4), mientras que en los 6 restantes (ICa.1, ICa.2, ICa.3, ICa.4, ICa.5 e ICa.6) son necesarios servicios auxiliares. Para cubrir dichos servicios se acude a vapor de agua saturado (ICa.1, ICa.2, ICa.3 e ICa.4), a vapor de agua a alta presión (ICa.5) y a amoníaco criogénico (ICa.6). En la Tabla XI se muestran los resultados.

A continuación, se aborda el diseño de los intercambiadores de calor. Para ello, ha de decidirse el tipo de intercambiador de calor más adecuado, así como el número, arreglo y longitud de los tubos. Estos últimos determinarán el área de intercambio.

La ecuación general de diseño (ecuación [24]) de un intercambiador de calor relaciona el flujo de calor (Q) con el coeficiente global de transmisión de calor (U), el área de intercambio (A) y la diferencia de temperaturas entre el fluido caliente y el fluido frío (ΔT).

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T \quad [24]$$

Se utilizarán intercambiadores de carcasa y tubos con una disposición de flujo en contracorriente, dado que esto resulta en una transmisión de calor más eficiente (Incropera y De Witt, 1999). Los cambiadores pueden ser de paso simple o de paso múltiple; empleándose estos últimos para áreas de intercambio superiores a 15 m^2 (Incropera y De Witt, 1999).

Para determinar los coeficientes globales de transmisión de calor (U) se acuden a la tablas de la Fig. 14 , Fig. 15 y Fig. 16; estas pueden encontrarse en el Anexo. Para un diseño más riguroso, los coeficientes deberían de calcularse a partir de los coeficientes individuales de transmisión de calor, tanto del fluido que circula por el interior de los tubos como del fluido que circula por la carcasa. Sin embargo, se decide llevar a cabo un diseño preliminar realizando una estimación del valor de U para cada uno de los cambiadores, en base a lo observado en las tablas anteriormente mencionadas.

Puesto que se trabaja a contracorriente, el gradiente de temperatura entre el fluido frío y el fluido caliente se calcula mediante la ecuación [25], a partir de las temperaturas de entrada y salida del fluido caliente ($T_{h,i}$ y $T_{h,o}$, respectivamente) y del fluido frío ($T_{c,i}$ y $T_{c,o}$, respectivamente).

$$\Delta T = \Delta T_{Lm} = \frac{(T_{h,o} - T_{c,i}) - (T_{h,i} - T_{c,o})}{\ln\left(\frac{T_{h,o} - T_{c,i}}{T_{h,i} - T_{c,o}}\right)} \quad [25]$$

Por otro lado, cuando se trabaja con intercambiadores de paso múltiple, es necesario ajustar el valor de ΔT_{Lm} mediante un factor de corrección (F) comprendido entre 0 y 1. Cuando se trata de un intercambiador de calor de 2 pasos (1:2), dicho factor de corrección puede calcularse recurriendo a las ecuaciones [26], [27] y [28].

En estas ecuaciones se distinguen los parámetros R y S . Para el cálculo de los mismos es necesario definir qué fluido circula por la carcasa (T) y qué fluido circula por los tubos (t). Por lo general, los fluidos más corrosivos, a mayor presión o con mayor tendencia al

ensuciamiento se hacen circular por los tubos; esto se debe a que son más sencillos de limpiar que la carcasa e implican, además, una menor inversión económica en caso de ser sustituidos. Como resultado, salvo en el ICa.6, es más adecuado que sea el fluido frío el que circule por el interior de los tubos, debido a su corrosividad.

$$F = \frac{\sqrt{(R^2 + 1)} \ln \left[\frac{1 - S}{1 - R \cdot S} \right]}{(R - 1) \ln \left[\frac{2 - S[R + 1 - \sqrt{(R^2 + 1)}]}{2 - S[R + 1 + \sqrt{(R^2 + 1)}]} \right]} \quad [26]$$

$$R = \frac{T_i - T_o}{t_o - t_i} \quad [27]$$

$$S = \frac{t_o - t_i}{T_i - t_i} \quad [28]$$

Una vez conocidos Q, U y $F \cdot \Delta T$, puede obtenerse el valor del área de intercambio teórica. A partir de dicha área, se calcula el número de tubos teóricos necesarios (ecuación [29]). Para los tubos ha de considerarse primero una longitud y un diámetro. En cuanto a la longitud, las más comunes son: 1,83, 2,44, 3,66, 4,88, 6,10 y 7,32 metros (Towler y Sinnott, 2008). Por otro lado, los diámetros más comunes se encuentran comprendidos entre 1/8 in y 1 in (Incropera y De Witt, 1999).

$$N_{\text{tubos teóricos}} = \frac{A_{\text{teórica}}}{\pi D_{\text{tubo}} L_{\text{tubo}}} \quad [29]$$

Las dimensiones de la carcasa, así como el número de tubos y la dimensión y disposición de los mismos (cuadrada o triangular) se encuentran normalizadas por las normas TEMA. Por ello, una vez calculado el número de tubos teóricos se acude a estas normas y se selecciona el número inmediatamente superior. Por último, se calcula el área de intercambio real. La tabla de las normas TEMA utilizada se recoge en el Anexo (Fig. 17).

Se escoge un arreglo triangular para los tubos, por ser el más común al obtenerse un intercambio de área mayor (Incropera y De Witt, 1999). En cuanto a la distancia entre tubos (pitch) se elige 1 ¼ in.

Tras realizar los cálculos, cuyos resultados se recogen en la Tabla XI, se observa que hay dos intercambiadores de calor (ICa.2 e ICa.3) cuyas áreas son demasiado pequeñas. Esto se debe al escaso flujo volumétrico tratado en las corrientes involucradas, así como a una necesidad de aumento de temperatura pequeña. Como consecuencia, se decide no incluir dichos cambiadores en el proceso y se considera que las corrientes en cuestión (13 y 24, según el diagrama de flujo del apartado 5) alcanzan la temperatura deseada (33°C) al mezclarse con la corriente de recirculación, cuyo flujo volumétrico es mucho más elevado. No

obstante, se han conservado los símbolos correspondientes a dichos cambiadores en el diagrama de flujo para hacer referencia a la variación de temperatura y entalpía correspondientes (véase 5.DIAGRAMA DE FLUJO).

Tabla XI. Resultados obtenidos en la integración energética y diseño de los cambiadores de calor.

Cambiadores		IC.1	IC.2	IC.3	IC.4	ICa.1	ICa.2	ICa.3	ICa.4	ICa.5	ICa.6
Q (kW)		6,242	2,351	338,9	102,0	161,4	0,109	0,436	9,443	368,1	554,5
Fluido caliente	Corriente	5	9	7	1	Vapor de agua saturado				Vapor de agua a alta presión	1
	T_{in} (°C)	77	206,0	77,00	20,00	100,0	100,0	100,0	100,0	250,0	16,88
	T_{out} (°C)	33	25,00	76,00	16,88	99,00	99,00	99,00	99,00	249,0	0
Fluido frío	Corriente	2	2	2	2	2	3	4	6	9	NH ₃
	T_{in} (°C)	10	10,30	10,42	5	26,97	23,80	25,00	33,00	206,0	-33,50
	T_{out} (°C)	10,30	10,42	26,97	10	34,85	33	33,00	77,00	207,0	-32,50
DISEÑO											
U (W/m²°C)		100	100	100	50	500	800	800	800	800	100
ΔT_{Im}		41,04	69,88	57,46	10,91	68,53	71,02	70,44	40,79	42,00	40,93
Paso		"1:1"	"1:1"	"1:2"	"1:2"	"1:1"	"1:1"	"1:1"	"1:1"	"1:1"	"1:2"
R		0,007	0,001	16,548	1,604	7,882	9,200	8,000	44,000	1,000	0,059
S		0,660	0,925	0,020	0,312	0,015	0,015	0,015	0,043	0,023	0,342
F		1,00	1,00	0,998	0,92	1,00	1,00	1,00	1,00	1	0,998
ΔT_{Im} · F		-	-	57,34	10,04	68,53	71,02	70,44	40,79	42	40,85
A_{teórica} (m²)		1,521	0,336	59,10	203,9	4,71	0,002	0,008	0,29	10,95	135,8
L_{tubos}		1,83	1,83	6,1	7,32	1,83	-	-	1,83	2,44	7,32
D_{tubos, nominal} (in)		"1/4"	"1/8"	"1"	"1"	"1"	-	-	"1/8"	"1"	"1"
D_{tubos, interno} (mm)		0,00922	0,00584	0,02664	0,02664	0,02664	-	-	0,00584	0,02664	0,02664
N_{tubos, teóricos}		28,693	10,018	115,8	332,9	30,76	0,052	0,210	8,619	53,64	221,6

Tabla XII. Resultados obtenidos en la integración energética y diseño de los cambiadores de calor. Continuación.

Pitch	"1 1/4"	"1 1/4"	"1 1/4"	"1 1/4"	"1 1/4"	-	-	"1 1/4"	"1 1/4"	"1 1/4"
N_{tubos, reales}	32	21	118	334	32	-	-	21	55	232
D_{carcasa (in)}	10	8	17	27	10	-	-	8	12	23
A_{tubo (m²)}	0,053	0,034	0,511	0,613	0,153	-	-	0,034	0,204	0,613
A_{real (m²)}	1,696	0,705	60,24	204,6	4,901	-	-	0,705	11,23	142,1

7. CONSIDERACIONES DE SEGURIDAD E IMPACTO AMBIENTAL

7.1. RIESGOS DE LOS PRODUCTOS QUÍMICOS EMPLEADOS

Se lleva a cabo un análisis de los riesgos y peligros asociados a los compuestos químicos involucrados en el proceso con el fin de mitigar el impacto que estos suponen tanto para el medio ambiente como para la salud y seguridad de las personas. De esta manera, se establecen una serie de medidas correctivas y límites de seguridad. En la

Tabla XIV se recogen las características de peligrosidad de los compuestos tratados.

A la vista de los resultados expuestos en la Tabla XI, se concluye con que las características que se repiten con mayor frecuencia en los compuestos empleados en el proceso son inflamabilidad ($C_{10}H_{16}$, $C_{10}H_{16}O$, CH_3CN , CH_3OH , $C_6H_5CH_3$) y peligrosidad, tanto para la salud (H_2O_2 , $C_{10}H_{16}$, $C_{10}H_{16}O$, CH_3CN , CH_3OH , $C_6H_5CH_3$) como para el medio ambiente (H_2O_2 , $C_{10}H_{16}$, $C_{10}H_{16}O$, $C_6H_5CH_3$). Otras características por destacar son la toxicidad aguda, propia de compuestos como el CH_3CN , el CH_3OH o el H_2O_2 , que además también presenta carácter explosivo, junto con el $C_{10}H_{16}$, y comburente. En cuanto al H_2O , no se han considerado características de peligrosidad. Asimismo, se trabaja con un gas presurizado, como es el CO_2 .

Tabla XIII. Datos de seguridad relativos a los compuestos implicados en el proceso.

Compuesto	TLV-TWA (ppm)	LII (% Volumen)	LSI (% Volumen)	T _{autoignición} (°C)
H_2O	-	-	-	-
H_2O_2	1	-	-	-
$C_{10}H_{16}$	30*	Sin datos disponibles	Sin datos disponibles	237
$C_{10}H_{16}O$	Sin datos disponibles	Sin datos disponibles	Sin datos disponibles	245
CH_3CN	20	4,4	16	524
CO_2	5000	-	-	-
CH_3OH	200	6,0	50	440
$C_6H_5CH_3$	20	1,1	7,1	480
PLC	Sin datos disponibles	Sin datos disponibles	Sin datos disponibles	Sin datos disponibles

*Dato correspondiente al VLA-ED.

Tabla XIV. Características de peligrosidad de los compuestos tratados.

Compuesto	Inflamable	Toxicidad aguda	Explosivo	Comburente	Gas presurizado	Peligro para la salud	Peligro para el medio ambiente
H ₂ O	-	-	-	-	-	-	-
H ₂ O ₂		X	X	X		X	X
C ₁₀ H ₁₆	X		X			X	X
C ₁₀ H ₁₆ O	X					X	X
CH ₃ CN	X	X				X	
CO ₂					X		
CH ₃ OH	X	X				X	
C ₆ H ₅ CH ₃	X					X	X
PCL			No se dispone de datos técnicos				

Existen también límites para el control de la toxicidad, que se denominan *Threshold Limit Value-Time Weighted* (TLV-TWA) y Valor Límite Ambiental-Exposición Diaria (VLA-ED), correspondiéndose ambos con las condiciones a las cuales se cree, basándose en los conocimientos sobre la seguridad y salud en el trabajo actuales, que los trabajadores pueden estar expuestos una jornada de 8 horas diarias y 40 horas semanales, durante toda su vida laboral, sin sufrir efectos adversos para su salud. La diferencia entre TLV-TWA y VLA-ED radica en la institución que los establece. En el caso de los TLV-TWA, la institución que los establece es la ACGIH (*American Conference of Governmental Industrial Hygienist*) mientras que los VLA-ED son establecidos en España por el INSHT (Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo)

Además de cumplir con los límites de seguridad (inflamabilidad y toxicidad) se han de establecer una serie de medidas de prevención como el control o eliminación de las posibles fuentes de ignición, cuyo control resulta complicado debido a la amplia variedad existente. Algunas de las fuentes de ignición más comunes son las zonas calientes, llamas abiertas, chispas o electricidad estática. Asimismo, es importante destacar la necesidad de trabajar, a ser posible, en espacios cerrados, disminuyendo así la posibilidad de que se formen mezclas indeseables entre los compuestos tratados y el aire que puedan desencadenar en explosiones.

Para evitar el contacto directo de las sustancias del sistema con el organismo, existe la obligación de suministro, por parte del responsable, y de requerimiento y utilización por parte del trabajador, de equipos de protección individual (EPI). Los EPI, se corresponden a cualquier equipo, incluido cualquier complemento o accesorio, destinado a ser llevado o sujetado por el trabajador para que le proteja de uno o varios riesgos que puedan amenazar su seguridad y salud en el trabajo. La utilización de estos equipos solo resultará efectiva cuando sean correctamente adecuados, tanto al riesgo del que haya que protegerse, como a la persona que lo utilice, y deben estar homologados para garantizar que cumplen en su totalidad con la función que tienen asignada, además de contar con una serie de instrucciones sobre su uso y mantenimiento. Entre los EPI más adecuados al proceso descrito en este proyecto se encuentran: cascos, mascarillas, gafas de seguridad, tapones, orejeras, calzado antideslizante y guantes.

El empleo de EPI contribuye a la protección de la salud de los trabajadores, sin embargo, no garantiza su seguridad. Esta se encuentra en el resto de medios organizativos entre los que se encuentran la ventilación, las redes de protección, formación de los trabajadores etc.

La ventilación constituye uno de los métodos de control de contaminantes en el medio más importantes. Resulta preferible la ventilación localizada frente a la general, ya que esta no permite que el contaminante se extienda y, además, la cantidad de aire requerida para este tipo de ventilación es menor, al igual que el coste asociado a ella.

7.2. RIESGOS DE LOS EQUIPOS, CONDICIONES DE OPERACIÓN Y MANTENIMIENTO

Todos los equipos que intervienen en el proceso desarrollado en este proyecto poseen un riesgo intrínseco, que puede verse agudizado por desviaciones en sus variables de operación. Estas variables, deben controlarse minuciosamente para evitar la pérdida de control del proceso, la cual puede desembocar en graves consecuencias la propiedad, las personas y el medio ambiente.

A pesar de que existen numerosas variables que pueden verse modificadas, se estudiarán en profundidad y aplicadas al sistema estudiado, aquellas que puedan afectar en mayor medida.

7.2.1. Temperaturas elevadas.

Las etapas del proceso que se ven más afectadas, y, por tanto, corren mayor riesgo de perder el control del sistema frente a cambios de temperatura, son las dos reacciones químicas, tanto la de epoxidación del d-limoneno empleando H_2O_2 como agente oxidante, como la síntesis del PCL. Dado que ambas reacciones son altamente exotérmicas, cabe la posibilidad de que, ante un aumento no demasiado grande de la temperatura, la velocidad de reacción aumente de tal forma que se supere un valor crítico, dando lugar al fenómeno conocido como *runaway* o explosión térmica.

Además, ambas reacciones se llevan a cabo en condiciones isotérmicas y temperaturas moderadas (33°C y 25°C) por lo que un aumento de estas, y, por tanto, una desviación las condiciones de operación, modificaría no solo el sistema, impidiendo la obtención de los productos con las características deseadas (pureza, composición, conversión...), sino que también podría provocar una explosión debido al sobrecalentamiento del H_2O_2 , con el cual no se recomienda superar los 100°C de temperatura de trabajo.

Ante esto, resulta necesaria la implementación de un sistema de control con alarma, capaz de responder a variaciones de temperatura, devolviendo su valor al de consigna, o lo que es lo mismo, al establecido como valor de operación. Para ello se debe disponer de un sistema de intercambio de calor con capacidad de refrigeración suficiente como para evitar la acumulación de calor en el reactor y por tanto el aumento de temperatura en el mismo.

Asimismo, se debe realizar una inspección y mantenimiento adecuados de los equipos de impulsión de fluido refrigerante (válvulas).

7.2.2. Sobrepresión y pérdidas de contención.

Continuando con lo explicado anteriormente, otro aspecto a controlar es la presión del sistema, que se encuentra íntimamente relacionada con la temperatura, ya que un aumento de esta última conlleva un aumento repentino y rápido de la presión. Si esta presión supera la de diseño, es probable la ruptura del equipo, dando lugar a efectos como la onda de presión, debido a la expansión del contenido presurizado del reactor, así como el vertido o emisión de dicho contenido y la fragmentación del recipiente que ocasiona proyectiles.

Las pérdidas de contención suponen una de las principales causas de accidentes en la industria química, resultando un peligro grave, a pesar de que las sustancias emitidas no sean inflamables, o, de serlo, que no se llegue a producir su inflamación.

En relación con el sistema desarrollado, este punto cobra mayor importancia en el caso del reactor de síntesis del PCL, ya que es la etapa del proceso que se lleva a cabo a mayor presión.

Se consideran una serie de acciones correctoras y sistemas de control de presión con alarma para reducir la probabilidad de que se produzca la causa que desencadena en una pérdida de contención, producto de una sobrepresión en el equipo. Entre estas acciones se encuentran, la instalación de sistemas redundantes, sistemas de refrigeración de emergencia, así como el empleo de diques, que evitan la propagación del contenido derramado, una vez ocurre la pérdida de contención. Para el control de la presión en el sistema, se deben instalar sistemas de alivio como válvulas, discos de ruptura y paneles de explosión.

7.2.3. Incendios y explosiones.

Una explosión tiene lugar cuando en un determinado punto se genera una sobrepresión lo suficientemente grande como para dar lugar a una onda de choque que viaja a gran velocidad e impacta fuertemente con uno o varios cuerpos. En algunos casos, las explosiones también están ligadas a los incendios. Un incendio es un fenómeno destructivo en el que se produce fuego descontrolado, fruto de una reacción de combustión entre un combustible y un comburente; este se caracteriza por la liberación de calor, radiación y gases.

En cuanto a las explosiones, pueden distinguir dos tipos principales: las explosiones confinadas y las no confinadas, resultando las primeras más peligrosas, ya que la energía presenta mayor dificultad para disiparse, provocando así una sobrepresión superior. De esta forma, puede llegar un momento en el que se sobrepase la resistencia mecánica del recipiente, dando lugar a una explosión.

Como medidas de prevención frente a estos fenómenos se debe evitar el material combustible o tenerlo en pequeñas cantidades, disminuir la carga térmica del local y evitar fuentes de ignición como llamas abiertas, chispas eléctricas o superficies calientes entre otras.

En el caso de que el incendio se produzca, se evitará su propagación mediante barreras resistentes al fuego y paredes gruesas que eviten que se derrumbe la instalación, así como puertas cortafuego y cubetos, siendo estas últimas barreras físicas que impiden que un líquido derramado se distribuya sin control.

Lo ideal es detectar los incendios en las etapas iniciales, ya que, en ellas, resulta más sencilla su extinción. Para ello existen detectores humanos y automáticos, que avisan frente a aumentos bruscos de temperatura, presencia de humos, emisión de radiación etc.

En el sistema estudiado, existen ciertos equipos susceptibles a este tipo de fenómenos, como los reactores involucrados tanto en la reacción de epoxidación como en la de síntesis de PCL. En la primera de ellas se emplea el H_2O_2 , que presenta carácter explosivo y comburente, por lo que podría dar lugar a incendios, en contacto con un combustible, y también a explosiones. En cuanto a la segunda reacción, en ella se trabaja a presión elevada, por lo que, de producirse una fuga, se liberaría una gran cantidad del contenido del reactor, formado por compuestos peligrosos como el $C_6H_5CH_3$ de carácter inflamable.

7.2.4. Ruidos y vibraciones.

El ruido producido por la actividad de una planta industrial puede suponer un riesgo para sus trabajadores, llegando a perder capacidad auditiva o, incluso, a desarrollar hipoacusia. Sin embargo, existen otros efectos adversos debidos a la exposición al ruido, como la disminución de la capacidad de concentración, molestias, y efectos extra-auditivos (aumento de la frecuencia respiratoria, trastornos del sueño, irritabilidad, etc.) Las medidas preventivas pueden actuar sobre el foco, sobre el medio y sobre el receptor.

Las medidas aplicadas sobre el foco se corresponden con un buen mantenimiento de los equipos, así como su lubricación; mientras que las medidas sobre el medio consisten en aislar de forma total o parcial la fuente de ruido de los trabajadores (empleo de cabinas insonorizadas o pantallas acústicas). Por último, si se desea actuar sobre el receptor, se debe suministrar a los trabajadores equipos de protección individual (tapones, bandas de protección auditiva, orejeras), reducir el tiempo de exposición y realizar los controles médicos correspondientes.

Los equipos asociados a la generación de altos niveles de ruido deben mantenerse alejados de los trabajadores y de la sala de control. Algunos de estos equipos son los sistemas de alivio de seguridad, las bombas y los compresores.

Para el control del nivel de exposición al ruido (nivel de ruido diario equivalente: LAeq,d y nivel de pico: Lpico) en el lugar de trabajo, se emplean aparatos como sonómetros. Una vez obtenidos estos niveles, se comparan con los establecidos por el Real Decreto 286/2006, siendo estos los indicados en la Tabla XV.

Tabla XV. Valores de referencia de exposición al ruido según el Real Decreto 286/2006.

Valores inferiores de exposición que dan lugar a una acción	Valores superiores de exposición que dan lugar a una acción	Valores límite de exposición
LAeq,d: 80 dB (A)	LAeq,d: 85 dB (A)	L'Aeq,d: 87 dB (A)
LAeq,d: 135 dB (C)	LAeq,d: 137 dB (C)	L'Aeq,d: 140 dB (C)
		L'=L – Atenuación protector auditivo

Otro efecto adverso para la salud de los trabajadores y que, también provoca ruido, son las vibraciones. Estas son producto del movimiento oscilante de las estructuras sólidas con respecto a una posición de referencia. En función de la frecuencia de las vibraciones, las consecuencias sobre la salud son diferentes, como puede observarse en la Tabla XVI.

Tabla XVI. Efectos de las vibraciones sobre la salud en función de la frecuencia de vibración.

Frecuencia (Hz)	Efecto sobre la salud
Menor 1Hz	Pérdida de equilibrio, mareos o vómitos
Entre 1 y 80 Hz	Lumbalgias, hernias, pinzamientos, pérdida del equilibrio
Entre 20 y 1500 Hz	Lesiones óseas y trastornos de sensibilidad

Las medidas preventivas ante este fenómeno son el empleo de equipos que no vibren, el mantenimiento e inspección regular de la instalación, así como el aislamiento y amortiguamiento adecuado de los equipos, mediante la utilización de sustancias que absorban la vibración o no la transmitan, como, por ejemplo, el *Silent block*, una pieza de goma o caucho destinada a tal fin.

7.3. ANÁLISIS DETALLADO DE RIESGO Y OPERABILIDAD (HAZOP)

Se lleva a cabo un análisis HAZOP (Hazard and Operability Study) con el objetivo de identificar los posibles riesgos que pueden producirse a causa de la desviación de alguna de las variables del proceso con respecto a los parámetros normales de operación, así como sus consecuencias sobre el sistema.

Asimismo, se proponen una serie de medidas correctoras para evitar su aparición y minimizar los efectos en caso de que estas desviaciones lleguen a producirse.

Se realiza el análisis al reactor de epoxidación, siendo este uno de los equipos con mayor riesgo asociado puesto que la reacción que tiene lugar en él es altamente exotérmica e implica el uso de compuestos de carácter explosivo como el H_2O_2 . Los resultados obtenidos se recogen en la Tabla XVII.

Tabla XVII. Análisis HAZOP al reactor de epoxidación.

Palabra guía	Perturbación	Posibles causas	Consecuencias	Acción correctora
MÁS	Temperatura	Fallo sistema refrigeración Exceso de flujo alimentado	Aumento de velocidad de reacción y posterior pérdida de control (runaway) Explosión	Sistema de control de alta temperatura con detección por alarma. Instalación de sistema de refrigeración de emergencia.
MENOS	Temperatura	Aumento de flujo refrigeración Defecto de flujo alimentado	Disminución del rendimiento de reacción (menor conversión) Reacción más lenta	Sistema de control de baja temperatura con detección por alarma.
MÁS	Presión	Fallo en la válvula de salida Fallo sistema refrigeración (Aumento de temperatura) Exceso de flujo alimentado	Acumulación de producto Peligro de explosión	Incorporación de sistemas de alivio de presión (válvulas de seguridad y discos de ruptura) Instalación de medidor de alta presión con detección por alarma.

Tabla XVIII. Análisis HAZOP al reactor de epoxidación. Continuación.

Palabra guía	Perturbación	Causas	Consecuencias	Acción correctora
MENOS	Presión	Defecto de flujo alimentado	Disminución del rendimiento de reacción (menor conversión)	Instalación de medidor de baja presión con detección por alarma.
MÁS	Agitación	Fallo en el agitador (motor) Fallo en el diseño de agitación	Erosión de las paredes del equipo y dispositivos Pérdida de eficacia del catalizador (fragmentación de las partículas) Contaminación del producto final (necesidad de equipos de separación)	Sistema de control de velocidad de agitación con detección por alarma. Revisión y mantenimiento del equipo.
MENOS	Agitación	Fallo en el agitador (motor) Fallo en el diseño de agitación	Disminución del rendimiento de la reacción Peligro de sedimentación de las partículas de catalizador (regiones estancas)	Sistema de control de velocidad de agitación con detección por alarma. Revisión y mantenimiento del equipo.

Tabla XIX. Análisis HAZOP al reactor de epoxidación. Continuación.

Palabra guía	Perturbación	Causas	Consecuencias	Acción correctora
NO	Agitación	Fallo en el agitador (motor) Fallo en el diseño de agitación	Sedimentación de catalizador (regiones estancas) Rendimiento de reacción nulo	Sistema de control de velocidad de agitación con detección por alarma.
MÁS	Refrigeración	Aumento del flujo de refrigeración. Válvula completamente abierta.	Disminución de temperatura Disminución de la velocidad de reacción (menor conversión)	Sistema de control de flujo con detección por alarma. Revisión y mantenimiento del equipo.
MENOS	Refrigeración	Disminución del flujo de refrigeración. Válvula parcialmente cerrada.	Aumento de temperatura	Sistema de control de flujo con detección por alarma. Revisión y mantenimiento del equipo.

7.4. CONSIDERACIONES DE IMPACTO AMBIENTAL

Resulta necesario realizar un estudio de los efectos medioambientales que pueden darse como resultado de la actividad de la planta. Para ello, se consideran los efluentes líquidos, mayoritarios en este proceso, emisiones gaseosas y residuos sólidos finales.

7.4.1. Efluentes líquidos.

Los efluentes líquidos producidos en este proceso proceden de las corrientes de purga, y se componen en su mayoría de agua, ya que aparecen como resultado de purificaciones a partir de columnas de destilación.

A pesar de tratarse de corrientes líquidas donde el agua se encuentra siempre presente, antes de darles una nueva utilidad a dichas corrientes, como puede ser su uso para calefacción o refrigeración, o incluso verterlas al medio ambiente, deben llevarse a cabo una serie de controles y tratamientos.

En el caso de que se decida verter estos efluentes al medio, se debe realizar un control estricto de la temperatura, ya que la solubilidad del oxígeno en agua es inversamente proporcional a este factor (T) disminuyendo ante un aumento de esta. Esto puede provocar consecuencias negativas para el medio acuático.

En las destilaciones llevadas a cabo en el área II del proceso, donde se sintetiza el óxido de limoneno a partir de limoneno y peróxido de hidrógeno, resultan dos corrientes de purga, una para cada una de las dos columnas de destilación empleadas.

La primera de ellas contiene H_2O , H_2O_2 y acetonitrilo, empleado como disolvente en la reacción llevada a cabo en esta área.

En cuanto al H_2O_2 , este compuesto se trata de un líquido inestable, que se descompone en O_2 y agua aumentando la temperatura del medio. Esta descomposición es catalizada por iones metálicos muy comunes y presentes en el agua, como el Fe^{3+} o el Cu^{2+} . Además, puede producir una combustión de forma espontánea cuando entra en contacto con materia orgánica.

Por último, en la actualidad, no se han encontrado efectos negativos significativos sobre el medio ambiente causados por el acetonitrilo.

La segunda purga está compuesta por limoneno y óxido de limoneno. Ambos compuestos resultan altamente tóxicos para los organismos acuáticos, ya que puede producirse su bioacumulación en peces.

7.4.2. Emisiones gaseosas.

Uno de los objetivos que se plantea en este proceso, es desarrollar un sistema libre de emisiones gaseosas. Fundamentalmente se trabaja con CO₂, pero se ha diseñado el proceso de tal forma que todas las corrientes que lo poseen son recirculadas en su totalidad, de manera que este nunca pasa al medio.

7.4.3. Residuos sólidos.

Dado que la extracción supercrítica con CO₂, llevada a cabo en el área I del proceso, presenta la ventaja de no contaminar la materia prima, las **pieles de naranja** obtenidas como residuo de este proceso, pueden destinarse a otros fines, entre ellos, la producción de pienso animal (*Teigiserova et al., 2022*). De esta manera, se evita recurrir a procesos que no resultan indicados desde el punto de vista de la sostenibilidad, como la incineración o la disposición en vertederos.

Los **catalizadores sólidos** empleados, aunque se regeneran fácilmente con disolventes como la acetona, se acaban desactivando y necesitan ser sustituidos por otros nuevos para garantizar un buen rendimiento del proceso. Estos catalizadores contienen metales de transición (W, Zn) y, de acuerdo con la *Decisión de la Comisión 2014/955/UE*, se clasifican como residuos peligroso.

8. EVALUACIÓN ECONÓMICA

8.1. INVERSIÓN DE CAPITAL

Las tablas y gráficas utilizadas para el cálculo de costes de cada equipo del proceso se encuentran en el Anexo.

Tabla XX. Coste de equipos del proceso por áreas implicadas.

	Coste (€)
Área I	1.397.988
Área II	160.081
Área III	128.760
Área IV	5.193.177
TOTAL	6.880.008

Tabla XXI. Costes e inversión del proceso por áreas implicadas.

	Área I	Área II	Área III	Área IV
	M€	M€	M€	M€
Costes directos				
Coste de equipos	1,39	0,16	0,13	5,19
Entrega	0,13	0,02	0,01	0,51
Equipo recibido	1,53	0,18	0,14	5,71
Instalación	0,60	0,08	0,07	2,68
Instrumentación y control	0,40	0,06	0,05	2,05
Tuberías	0,48	0,12	0,10	3,88
Sistemas eléctricos	0,15	0,02	0,02	0,63
Edificios	0,45	0,03	0,02	1,03
Mejoras del terreno	0,18	0,02	0,01	0,57
Instalaciones de servicio	0,850	0,12	0,10	3,99
TOTAL	6,04	0,79	0,64	25,76
Costes indirectos				
Ingeniería y supervisión	0,49	0,06	0,05	1,88
Gastos de construcción	0,52	0,07	0,06	2,34
Gastos legales	0,06	0,01	0,006	0,22
Contratistas	0,29	0,04	0,03	1,26
Contingencia	0,57	0,08	0,06	2,51
TOTAL	1,94	0,25	0,20	8,23
Inversión				
Inversión capital fijo (FCI)	7,98	1,05	0,84	33,98
Inversión capital circulante (WC)	1,15	0,16	0,13	5,08
TOTAL (TCI)	9,13	1,20	0,97	39,07

8.2. COSTES DE OPERACIÓN

Tabla XXII. Costes de operación del proceso.

Materias primas					
		Cantidad (t/año)		M€/año	
Área I	CO ₂	8,669			0,0003
Área II	H ₂ O ₂	112,5			0,0530
	CH ₃ CN	217,5			0,4350
Área IV	CH ₃ OH	60,48			0,0222
	C ₆ H ₅ OH	60,48			0,0230
	CO ₂	53,09			0,0016
				TOTAL	0,5349
Servicios					
		Unidades	Cantidades	€/unidad	M€/año
	Agua	kg/año	5890,30	0,000074	4·10 ⁻⁷
	NH ₃	kg/año	6324864	0,54	3,433
	Vapor de agua saturado	kg/año	1198248,96	0,004	0,005
	Vapor de alta presión	kg/año	3357912	0,027	0,092
	Electricidad	kWh/año	15.339.858	0,041	0,635
				TOTAL	0,535
Mano de obra					
Equipos		Nº equipos	Operarios/equipo/turno	€/hora	M€/año
Área I	Molino	1	0,5		
	Extractor	1	0,5		
	Separador	1	0,5	30,98	
	Bombas	2	0,5		
	Cambiadores	3	1		
TOTAL		8	3		0,538
Área II	Reactor continuo	1	0,5	30,98	
	Cambiadores	4	0,5		
	TOTAL	5	1		0,179
Área III	Columna	1	0,5		
	Bombas	2	0,5	30,98	
	Cambiadores	4	0,5		
TOTAL		7	1,5		0,359

Tabla XXIII. Costes de operación del proceso. Continuación.

Hidrociclón	1	0,5	
Bombas	1	0,5	
Compresores	2	0,2	
Reactor	3	1	
Cambiadores	1	0,5	
TOTAL	6	2,2	0,406
			TOTAL 1,482
Otros costes			
			M€/año
Mantenimiento y reparaciones			0,449
Supervisión			0,222
Cargos de laboratorio			1,122
Suministros de operación			0,168
Gastos generales			2,154
Administración			0,431
			TOTAL 4,546
COSTE TOTAL ANUAL			7,092

Tal y como puede verse, los costes de operación anuales superan los 7 M€. En el proceso productivo planteado se generan 123.327 kg de PCL al año; esto implica que, para cubrir costes, el policarbonato de limoneno debería de tener un valor de 57,51 €/kg. Actualmente, el policarbonato convencional (PC) puede encontrarse en el mercado a un precio que oscila entre los 3-4 €/kg, lo cual hace pensar que el PCL producido por esta vía no podría introducirse en el mercado a un precio competitivo.

9. CONCLUSIONES

A continuación, se exponen algunas de las conclusiones más importantes que se extraen tras el diseño del proceso.

En primer lugar, se posee una disponibilidad de D-limoneno escasa. Por un lado, el rendimiento del proceso de extracción llevado a cabo en el Área I es del 4,27%; es decir, por cada 100 kg de piel de naranja, únicamente pueden extraerse 4,27 kg de D-limoneno. Esto significa que, para poder tener un flujo de D-limoneno que permita obtener una producción elevada de policarbonato, se necesita tratar una gran cantidad de piel de naranja. En el proceso propuesto, se estima que se está gestionando el 75% de la piel de naranja residual producida en CIMUSA, por lo que una única proveedora de materia prima no sería suficiente. Es por ello que la primera conclusión que se extrae es que el D-limoneno obtenido a partir de la piel de las naranjas no sería capaz de satisfacer la demanda de policarbonato.

Sin embargo, la naranja no es el único cítrico que posee D-limoneno en su aceite esencial. En un futuro, sería adecuado considerar utilizar como materia prima la piel de distintos cítricos y estudiar cuál es la técnica de extracción óptima, de tal manera que se extraiga la mayor cantidad de D-limoneno posible; esto último se debe a que el rendimiento de las distintas técnicas depende en gran medida del cítrico procesado.

En cuanto a la síntesis del óxido de limoneno, la proporción de disolvente empleado con respecto a los reaccionantes es muy elevada. Esto perjudica negativamente a la economía del proceso, puesto que el acetonitrilo posee un precio elevado, suponiendo el 75% del coste asociado a las materias primas. Una solución a esta problemática pasaría por encontrar un medio de reacción más económico.

Por otro lado, a pesar de que el peróxido de hidrógeno, empleado como agente oxidante, posee la ventaja de generar agua como único subproducto de la reacción, también presenta el inconveniente de ser corrosivo, explosivo y comburente. Esto último implica la utilización de materiales de construcción más costosos para los equipos, así como una mayor inversión en control y seguridad.

Además, la etapa de purificación del óxido de limoneno no se encuentra optimizada por falta de información sobre los compuestos con los que se trabaja, especialmente sobre el óxido de limoneno. Esto hace que se requiera una columna de destilación de un gran tamaño en comparación con el caudal que circula por la misma, así como un elevado consumo energético. Conocer más acerca de la naturaleza del óxido de limoneno podría ayudar a desarrollar un método de purificación más adecuado.

Finalmente, las mayores dificultades se han encontrado en la etapa de síntesis del policarbonato de limoneno. La polimerización de óxido de limoneno con CO₂ no se encuentra

actualmente lo suficientemente estudiada como para poder concebir un proceso a escala industrial. Por un lado, la cinética resulta muy compleja, dificultando mucho el diseño del reactor. Como se verá más adelante, esto ha hecho que se recurra a un cambio de escala para el diseño del reactor, lo que hace que se requiera un elevado tiempo de reacción. Otro de los inconvenientes es la utilización de un catalizador homogéneo, siendo necesario operar en discontinuo. Por lo tanto, la mayor labor de investigación debería realizarse en el Área IV del proceso descrito, que se corresponde con la síntesis del policarbonato de limoneno.

La idea que se presenta, pese a no ser viable actualmente, constituye una vía para la sustitución de materias primas no renovables en la producción de policarbonato, que podría llegar a implementarse con el suficiente trabajo de investigación en los puntos comentados anteriormente.

10. BIBLIOGRAFÍA

Actualización del Mercado de Tolueno y Xileno - The Plaza Group, 2023. En línea. Disponible en: <https://theplazagr.com/es/actualizacion-del-mercado-de-tolueno-y-xileno-17/>

BAMPIDIS, V. A., P. H. ROBINSON, 2006. Citrus by-products as ruminant feeds: A review. En línea. *Animal Feed Science and Technology*, vol 128, pp. 175-217. ISSN 0377-8401.

BBVA, 2020. Capturar, almacenar y usar CO₂: un negocio a futuro. En línea. BBVA NOTICIAS. Disponible en: <https://www.bbva.com/es/capturar-almacenar-y-usar-co2-un-negocio-a-futuro/>

BYRNE C., S. D. ALLEN, E. B. LOBKOVSKY y G. COATES, 2004. Alternating Copolymerization of Limonene Oxide and Carbon Dioxide. En línea. *Journal of the American Chemical Society*, vol. 37, nº 37, pp. 11404-11405. ISSN 0002-7863.

CIRIMINNA, R., M. LOMELI-RODRIGUEZ, P. DEMMA CARÀ, J. LOPEZ-SANCHEZ y M. PAGLIARO, 2014. Limonene: a versatile chemical of the bioeconomy. En línea. *Chem. Commun*, vol. 50, nº 97, pp. 15273-15466. ISSN 1359-7345.

CO₂ (Dióxido de carbono). PRTR España, [s. f.]. En línea. Disponible en: <https://prtr-es.es/co2-dioxido-de-carbono,15590,11,2007.html>

DURKIN, A., I. TAPTYGIN, Q. KONG, M. F. GUNAM RESUL, A. REHMAN, A. M. L. FERNÁNDEZ, A. P. HARVEY, N. SHAH y M. GUO, 2019. Scale-up and Sustainability Evaluation of Biopolymer Production from Citrus Waste Offering Carbon Capture and Utilisation Pathway. En línea. *ChemistryOpen*, vol. 8, nº 6, p. 668–688.

Food and Agriculture Organization of the United Nations. FAOSTAT statistical database. [Rome]: FAO.

Fundación Española de la Nutrición, [s.f.]. FEN. Orange, *Citrus sinensis*.

HAUENSTEIN, O., M. REITER, S. AGARWAL, B. RIEGER y A. GREINER, 2016. Bio-based polycarbonate from limonene oxide and CO₂ with high molecular weight, excellent thermal resistance, hardness and transparency. En línea. *Green Chemistry*, vol. 18, nº 3, pp. 760-770.

INCROPERA F. P. y D. P. DE WITT, 1999. *Fundamentos de transferencia de calor*. 4th ed. Pearson Education.

Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo, [s. f.] - INSST - Portal INSST - INSST. Portal INSST. Disponible en: <https://www.insst.es/>.

KEMP, I. C., 2007. *Pinch Analysis and Process Integration*. Butterworth-Heinemann. ISBN 9780750682602.

KYRIACOS, D., 2017. Chapter 17 – Polycarbonates. En: M. GILBERT, ed. *Brydson's Plastics Materials*. En línea. Butterworth-Heinemann, pp. 457-485. ISBN 9780323358248.

LOUISY, E., V. KHODYRIEVA, S. OLIVERO, V. MICHELET y A. MIJA, 2022. Use of Limonene Epoxides and Derivatives as Promising Monomers for Biobased Polymers. En línea. *ChemPlusChem*, vol. 87, nº 8, p. e202200190.

MAHATO N., K. SHARMA, M. SINHA y M. H. CHO, 2018. Citrus Waste derived nutra-/pharmaceuticals for health benefits: Current trends and future perspectives. En línea. *Journal of Functional Foods*, vol 40, pp. 307-316. ISSN 1756-4646.

MERCY NISHA P. J., B. NITHYALAKSHMI y R. AADHITHIYA LAKSHMI, 2015. Extraction of Orange Oil by Improved Steam Distillation and its Characterization Studies. En línea. International Journal of Engineering Technology, Management and Applied Sciences, vol 3, nº 2. ISSN 2349-4476.

PARKER, R. E., N. S. ISAACS, 1959. Mechanisms of Epoxide Reactions. Chemical Reviews, Vol. 59, nº 4, pp. 737–799. ISSN 1520-6890.

PARRINO, F., A. FIDALGO, L. PALMISANO, L. M. ILHARCO, M. PAGLIARO y R. CIRIMINNA, 2018. Polymers of Limonene Oxide and Carbon Dioxide: Polycarbonates of the Solar Economy. En línea. ACS Omega, vol. 3, nº 5, pp. 4884-4890. ISSN 2470-1343.

PETERS M. S., K. D. TIMMERHAUS y R. E. WEST, 2003. Plant design and economics for chemical engineers. 5th ed. McGraw-Hill chemical engineering series. ISBN 9780072392661.

SATARI, B. y K. KARIMI, 2018. Citrus processing wastes: Environmental impacts, recent advances, and future perspectives in total valorization. En línea. Resources, Conservation & Recycling, vol. 129, pp. 153-167. ISSN 0921-3449.

SHARMA K., N. MAHATO, M. H. CHO, R. L. YONG, 2017. Converting citrus wastes into value-added products: Economic and environmently friendly approaches. Nutrition, vol 34, pp. 29-46. ISSN 0899-9007.

TEIGEISEROVA, D. A., L. HAMELIN, L. TIRUTA-BARNA, A. AHMADI y M. THOMSEN, 2022. Circular bioeconomy: Life cycle assessment of scaled-up cascading production from orange peel waste under current and future electricity mixes. En línea. Science of The Total Environment, vol. 812, p. 152574. ISSN 0048-9697.

TOWLER, G. P. y R. K. SINNOTT, 2008. Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design. Butterworth-Heinemann. ISBN 9780750684231.

Toxicidad del Bisfenol A: Revisión, [no date]. Revista de Toxicología de AETOX. Disponible en: <http://rev.aetox.es/wp/index.php/32-2-13/>

ULRICH, G. D. y P. T. VASUDEVAN, 2004. Chemical Engineering Process Design and Economics: A Practical Guide. 2nd ed. Process Publishing.

Volumen de producción de plásticos en formas primarias en España en 2021, por segmento, 2022. Statista. [s. f.]. Disponible en: <https://es.statista.com/estadisticas/898414/volumen-de-plasticos-en-formas-primarias-producidos-en-espana-por-segmento>

VON ZIMMERMAN, M. A. y T. C. ARNOLD, 2023. Phosgene Toxicity. En línea. StatPearls Publishing.

ZEMA, D. A., P. S. CALABRÓ, A. FOLINO, V. TAMBURINO, G. ZAPPIA y S. M. ZIMBONE, 2018. Valorisation of citrus processing waste: A review. Waste Management, vol. 80, pp. 252-273.

ZHOU, X., Y. ZHAI, K. REN, Z. CHENG y X. SHEN, 2023. Life cycle assessment of polycarbonate production: Proposed optimization toward sustainability. En línea. Resources, Conservation and Recycling, vol. 189, p.106765. ISSN 0921-3449.

11. ANEXO

	Percent of delivered-equipment cost for		
	Solid processing plant ²	Solid-fluid processing plant ³	Fluid processing plant ⁴
Direct costs			
Purchased equipment delivered (including fabricated equipment, process machinery, pumps, and compressors)	100	100	100
Purchased-equipment installation	45	39	47
Instrumentation and controls (installed)	18	26	36
Piping (installed)	16	31	68
Electrical systems (installed)	10	10	11
Buildings (including services)	25	29	18
Yard improvements	15	12	10
Service facilities (installed)	40	55	70
Total direct plant cost	269	302	360
Indirect costs			
Engineering and supervision	33	32	33
Construction expenses	39	34	41
Legal expenses	4	4	4
Contractor's fee	17	19	22
Contingency	35	37	44
Total indirect plant cost	128	126	144
Fixed-capital investment	397	428	504
Working capital (15% of total capital investment)	70	75	89
Total capital investment	467	503	593

Fig. 12. Estimación de la inversión, basado en la entrega de equipos (Peters, Timmerhaus, West 2003)

Type of equipment	Workers/unit/shift
Blowers and compressors	0.1–0.2
Centrifugal separator	0.25–0.50
Crystallizer, mechanical	0.16
Dryer, rotary	0.5
Dryer, spray	1.0
Dryer, tray	0.5
Evaporator	0.25
Filter, vacuum	0.125–0.25
Filter, plate and frame	1.0
Filter, rotary and belt	0.1
Heat exchangers	0.1
Process vessels, towers (including auxiliary pumps and exchangers)	0.2–0.5
Reactor, batch	1.0
Reactor, continuous	0.5

Fig. 13. Requisitos de mano de obra por equipos (Peters, Timmerhaus, West 2003).

TABLE 4-15a TYPICAL OVERALL HEAT TRANSFER COEFFICIENTS U FOR VARIOUS TYPES OF SERVICE ($J/m^2 \cdot s \cdot K$)
Shell and Tube Heat Exchangers^a (gases and single-phase liquids on the cold side)

Hot Side	Cold Side									
	Gases (single-phase)					Liquids (single-phase)				
	Air, N ₂ , etc. ^b (P [bara])	Ammonia ^b (P [bara])	Flue gases (1 atm)	H ₂ -containing gas mixtures ^b (P [bara])	Hydrocarbon Gases ^b (P [bara])	Alcohols (light)	Asphalt	Chlorinated Hydro- carbons	Caustic Soda (10-30% solutions)	Ethanol amine (MEA or DEA) (10 to 25% solutions)
Gases (single-phase)										
Air, N ₂ , etc. (1 atm)	40P ^{0.5}	60P ^{0.5}	20-35	60P ^{0.5} x 2.5 ^x	90P ^{0.5}	90-120	20-40	80-110	90-120	90-120
Air, N ₂ , etc. (10-20 barg)	90P ^{0.5}	130P ^{0.5}	30-70	120P ^{0.5} x 2.5 ^x	200P ^{0.5}	300-400	80-120	250-350	300-400	350-450
Ammonia (1 atm)	50P ^{0.5}	70P ^{0.5}	25-50	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	100P ^{0.5}	100-130	30-40	90-120	100-130	110-140
Flue gases (1 atm)	25P ^{0.5}	40P ^{0.5}	15-30	25P ^{0.5} x 2.5 ^x	60P ^{0.5}	70-110	20-30	60-100	70-110	80-110
H ₂ -containing gas mixtures (1 atm) ^b	40P ^{0.5} x 2.5 ^x	60P ^{0.5} x 2.5 ^x	30 x 2.5 ^x	100P ^{0.5} x 2.5 ^x	90P ^{0.5} x 2.5 ^x	100 x 2.5 ^x	30 x 2.5 ^x	100 x 2.5 ^x	100 x 2.5 ^x	110 x 2.5 ^x
Hydrocarbon Gases (10-20 barg)	80P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-90	120P ^{0.5} x 2.5 ^x	180P ^{0.5}	120-150	40-90	120-150	120-180	130-160
Liquids (single-phase)										
Alcohols (light)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	140-180	450-500	500-600	600-700
Asphalt	50P ^{0.5}	70P ^{0.5}	40-60	50P ^{0.5} x 2.5 ^x	100P ^{0.5}	50-80	20-40	40-70	50-80	60-90
Caustic Soda (10-30% solutions)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-700	160-200	450-650	500-700	600-800
Chlorinated Hydrocarbons	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	140-170	450-550	500-600	600-700
Ethanol amine (MEA or DEA) (10 to 25% solutions)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	180P ^{0.5}	550-650	160-200	500-600	550-650	700-800
Fuel Oil (heavy)	60P ^{0.5}	90P ^{0.5}	50-70	60P ^{0.5} x 2.5 ^x	130P ^{0.5}	80-120	60-80	80-120	80-160	90-170
Fuel Oil (light)	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	160P ^{0.5}	450-550	80-100	400-500	450-550	550-650
Gasoline	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	70-100	90P ^{0.5} x 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	130-160	450-550	500-600	600-700
Heat-Transfer Oil	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	160P ^{0.5}	350-450	120-140	300-400	350-450	500-600
Jet Fuels or Kerosene	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	70-100	80P ^{0.5} x 2.5 ^x	180P ^{0.5}	450-550	100-150	400-500	450-550	550-650
Organics (low-viscosity)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	180P ^{0.5}	450-550	100-150	400-500	450-550	550-650
Organics (high-viscosity)	60P ^{0.5}	90P ^{0.5}	50-70	60P ^{0.5} x 2.5 ^x	130P ^{0.5}	100-150	60-150	80-120	100-150	110-160
Trichloroethylene	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	100-140	400-500	500-600	600-700
Water and Brines	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	70-110	90P ^{0.5} x 2.5 ^x	200P ^{0.5}	600-700	100-160	550-650	600-700	800-900
Condensing Vapors										
Alcohols (light)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} x 2.5 ^x	220P ^{0.5}	700-800	180-200	650-750	700-800	800-900
Gasoline	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} x 2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	190-210	550-650	600-700	700-800
Heat-Transfer Oil	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	100P ^{0.5} x 2.5 ^x	170P ^{0.5}	600-700	180-200	550-650	600-700	700-800
Hydrocarbons (heavy)	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	50-80	90P ^{0.5} x 2.5 ^x	130P ^{0.5}	500-600	140-160	450-550	500-600	600-700
Hydrocarbons (light)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} x 2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	130-180	550-650	600-700	700-800
Hydrocarbons (light) with inert gas	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-80	70P ^{0.5} x 2.5 ^x	120P ^{0.5}	250-600	80-110	200-500	200-600	300-700
Jet Fuels or Kerosene	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	90P ^{0.5} x 2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	190-210	550-650	600-700	700-800
Organic Solvents	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	90P ^{0.5} x 2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-800	200-220	500-700	600-800	700-800
Organic Solvents with Inert Gas	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-80	60P ^{0.5} x 2.5 ^x	120P ^{0.5}	200-600	100-200	150-500	200-600	300-700
Water (steam)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	110P ^{0.5} x 2.5 ^x	210P ^{0.5}	800-1000	220-260	700-900	800-1000	900-1100

Fig. 14. Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas (Ulrich y Vasudevan, 2004).

TABLE 4-15a TYPICAL OVERALL HEAT TRANSFER COEFFICIENTS U FOR VARIOUS TYPES OF SERVICE (J/m^2s-K)
Shell and Tube Heat Exchangers^a (gases and single-phase liquids on the cold side)

Hot Side	Cold Side									
	Gases (single-phase)					Liquids (single-phase)				
	Air, N ₂ , etc. ^b (P [bara])	Ammonia ^b (P [bara])	Flue gases (1 atm)	H ₂ -containing gas mixtures ^b (P [bara])	Hydrocarbon Gases ^b (P [bara])	Alcohols (light)	Asphalt	Chlorinated Hydro- carbons	Caustic Soda (10-30% solutions)	Ethanol amine (MEA or DEA) (10 to 25% solutions)
Gases (single-phase)										
Air, N ₂ , etc. (1 atm)	40P ^{0.5}	60P ^{0.5}	20-35	60P ^{0.5} x2.5 ^x	90P ^{0.5}	90-120	20-40	80-110	90-120	90-120
Air, N ₂ , etc. (10 - 20 barg)	90P ^{0.5}	130P ^{0.5}	30-70	120P ^{0.5} x2.5 ^x	200P ^{0.5}	300-400	80-120	250-350	300-400	350-450
Ammonia (1 atm)	50P ^{0.5}	70P ^{0.5}	25-50	70P ^{0.5} x2.5 ^x	100P ^{0.5}	100-130	30-40	90-120	100-130	110-140
Flue gases (1 atm)	25P ^{0.5}	40P ^{0.5}	15-30	25P ^{0.5} x2.5 ^x	60P ^{0.5}	70-110	20-30	60-100	70-110	80-110
H ₂ -containing gas mixtures (1 atm) ^b	40P ^{0.5} x2.5 ^x	60P ^{0.5} x2.5 ^x	30x2.5 ^x	100P ^{0.5} x2.5 ^x	90P ^{0.5} x2.5 ^x	100x2.5 ^x	30x2.5 ^x	100x2.5 ^x	100x2.5 ^x	110x2.5 ^x
Hydrocarbon Gases (10-20 barg)	80P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-90	120P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	120-150	40-90	120-150	120-180	130-160
Liquids (single-phase)										
Alcohols (light)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	140-180	450-500	500-600	600-700
Asphalt	50P ^{0.5}	70P ^{0.5}	40-60	50P ^{0.5} x2.5 ^x	100P ^{0.5}	50-80	20-40	40-70	50-80	60-90
Caustic Soda (10-30% solutions)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-700	160-200	450-650	500-700	600-800
Chlorinated Hydrocarbons	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	140-170	450-550	500-600	600-700
Ethanol amine (MEA or DEA) (10 to 25% solutions)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	550-650	160-200	500-600	550-650	700-800
Fuel Oil (heavy)	60P ^{0.5}	90P ^{0.5}	50-70	60P ^{0.5} x2.5 ^x	130P ^{0.5}	80-120	60-80	80-120	80-160	90-170
Fuel Oil (light)	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	160P ^{0.5}	450-550	80-100	400-500	450-550	550-650
Gasoline	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	70-100	90P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	130-160	450-550	500-600	600-700
Heat-Transfer Oil	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	160P ^{0.5}	350-450	120-140	300-400	350-450	500-600
Jet Fuels or Kerosene	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	70-100	80P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	450-550	100-150	400-500	450-550	550-650
Organics (low-viscosity)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	450-550	100-150	400-500	450-550	550-650
Organics (high-viscosity)	60P ^{0.5}	90P ^{0.5}	50-70	60P ^{0.5} x2.5 ^x	130P ^{0.5}	100-150	60-150	80-120	100-150	110-160
Trichloroethylene	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	100-140	400-500	500-600	600-700
Water and Brines	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	70-110	90P ^{0.5} x2.5 ^x	200P ^{0.5}	600-700	100-160	550-650	600-700	800-900
Condensing Vapors										
Alcohols (light)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} x2.5 ^x	220P ^{0.5}	700-800	180-200	650-750	700-800	800-900
Gasoline	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} x2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	190-210	550-650	600-700	700-800
Heat-Transfer Oil	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	100P ^{0.5} x2.5 ^x	170P ^{0.5}	600-700	180-200	550-650	600-700	700-800
Hydrocarbons (heavy)	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	50-80	90P ^{0.5} x2.5 ^x	130P ^{0.5}	500-600	140-160	450-550	500-600	600-700
Hydrocarbons (light)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} x2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	130-180	550-650	600-700	700-800
Hydrocarbons (light) with inert gas	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-80	70P ^{0.5} x2.5 ^x	120P ^{0.5}	250-600	80-110	200-500	200-600	300-700
Jet Fuels or Kerosene	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	90P ^{0.5} x2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	190-210	550-650	600-700	700-800
Organic Solvents	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	90P ^{0.5} x2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-800	200-220	500-700	600-800	700-800
Organic Solvents with Inert Gas	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-80	60P ^{0.5} x2.5 ^x	120P ^{0.5}	200-600	100-200	150-500	200-600	300-700
Water (steam)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	110P ^{0.5} x2.5 ^x	210P ^{0.5}	800-1000	220-260	700-900	800-1000	900-1100

Fig. 15. Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas (Ulrich y Vasudevan, 2004). Continuación.

Boiling Liquids									
Chlorinated Hydrocarbons	Chlorine	Ethanol amine (MEA or DEA)	Gasoline	Jet Fuels or Kerosene	Organics		Propane, Butane, etc.	Trichloroethylene	Water and Brines
					Low-viscosity	High-viscosity			
90-120	100-130	100-130	100-130	90-120	80-120	60-80	100-130	90-120	100-130
300-400	350-450	350-450	350-450	300-400	350-400	150-200	350-450	300-400	450-600
100-130	110-140	110-140	110-140	100-130	100-130	90-120	110-140	100-130	110-150
70-110	80-120	80-120	80-120	70-110	70-110	50-70	80-120	70-110	90-120
100x2.5 ^x	110x2.5 ^x	110x2.5 ^x	110x2.5 ^x	100x2.5 ^x	100x2.5 ^x	70x2.5 ^x	110x2.5 ^x	100x2.5 ^x	120x2.5 ^x
120-150	130-160	130-160	130-160	120-150	120-150	100-130	130-160	120-150	140-170
500-600	550-650	550-650	550-650	500-600	500-600	150-200	550-650	500-600	650-750
60-100	70-110	70-110	70-110	60-100	60-100	50-70	70-110	60-100	70-110
500-700	550-750	550-750	550-750	500-700	500-700	200-240	550-750	500-700	600-800
500-600	600-700	600-700	600-700	570-850	500-600	150-200	600-700	500-600	650-750
600-900	700-1000	790-1140	700-1000	600-900	600-900	200-240	700-1000	600-900	800-1100
100-160	120-180	130-190	120-180	100-160	100-160	70-90	120-180	100-160	140-200
400-500	450-500	450-500	450-500	400-500	400-500	90-120	450-500	400-500	450-550
450-550	500-550	500-550	500-550	450-650	450-550	140-170	500-550	450-550	500-600
250-350	350-450	350-450	350-450	250-350	250-350	120-150	350-450	250-350	400-500
350-400	400-450	400-450	400-450	350-400	350-400	130-160	400-450	350-400	400-500
350-550	400-550	400-550	400-550	350-550	350-450	140-170	400-550	350-550	400-600
120-180	130-190	130-190	130-190	120-180	110-170	60-150	130-190	120-180	140-200
400-500	650-750	650-750	650-750	350-450	550-650	140-170	650-750	400-500	700-800
850-950	900-1000	900-1100	900-1000	700-800	650-750	200-300	900-1000	850-950	1000-1200
750-850	800-900	800-900	800-900	750-850	700-750	300-350	800-900	750-850	900-1200
600-700	650-750	650-750	650-750	600-700	550-600	300-350	650-750	600-700	700-800
550-650	600-650	600-650	600-650	550-650	500-550	250-300	600-650	550-650	650-700
450-500	500-550	500-550	500-550	450-500	400-450	200-250	500-550	450-500	550-600
600-700	650-750	650-750	650-750	600-700	500-550	300-350	650-750	600-700	750-800
200-600	250-650	250-650	250-650	200-600	150-500	100-300	250-650	200-600	300-700
600-700	650-750	650-750	650-750	600-700	550-650	250-300	650-750	600-700	750-800
600-800	650-850	650-850	650-850	600-800	550-750	300-350	650-850	600-800	700-900
200-600	350-650	350-650	350-650	200-600	200-550	100-300	350-650	200-600	300-700
800-1000	1200-1400	1200-1400	1200-1400	800-1000	800-840	300-350	1200-1400	800-1000	1300-1500

Fig. 16. Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas (Ulrich y Vasudevan, 2004). Continuación.

Disposición de los tubos en los cambiadores de coraza y tubos.

Arreglo triangular.

Diámetro interno de la coraza en pulgadas	Tubos de 1 pulgada de diámetro exterior en arreglo triangular con distancia entre ejes de 1 1/4 de pulgada					Diámetro interno de la coraza en pulgadas	Tubos de 1 1/4 de pulgada de diámetro exterior en arreglo triangular con distancia entre ejes de 1 9/16 de pulgada				
	"Tramos de tubos"						"Tramos de tubos"				
	1-Paso	2-Pasos	4-Pasos	6-Pasos	8-Pasos		1-Paso	2-Pasos	4-Pasos	6-Pasos	8-Pasos
8	21	16	16	14		10	20	18	14		
10	32	32	26	24		12	32	30	26	22	20
12	55	52	48	46	44	13 1/4	38	36	32	28	26
13	68	66	58	54	50	15 1/4	54	51	45	42	38
15	91	86	80	74	72	17 1/4	69	66	62	58	54
17	131	118	106	104	94	19 1/4	95	91	86	78	69
19	163	152	140	136	128	21 1/4	117	112	105	101	95
21	199	188	170	164	160	23 1/4	140	136	130	123	117
23	241	232	212	212	202	25	170	164	155	156	140
25	294	282	256	252	242	27	202	196	185	179	170
27	349	334	302	296	286	29	235	228	217	212	202
29	397	376	338	334	316	31	275	270	255	245	235
31	472	454	430	424	400	33	315	305	297	288	275
33	538	522	486	470	454	35	357	348	335	327	315
35	608	592	562	546	532	37	407	390	380	374	357
37	674	664	632	614	598	39	449	436	425	419	407
39	766	736	700	688	672						

Fig. 17. Tablas TEMA para la determinación del número de tubos real del intercambiador de calor.



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**ÁREA I: EXTRACCIÓN DE
D-LIMONENO DE LA PIEL DE
NARANJA**

por

Celsa Alonso Arias

Oviedo, Julio de 2023

ÍNDICE

I.1. INTRODUCCIÓN	76
I.2. DIAGRAMA DE FLUJO	78
I.3. DISEÑO DEL PROCESO	80
I.3.1. Selección del método de extracción	81
I.3.2. Extracción con CO₂ supercrítico	82
I.3.2.1. Marco teórico	84
I.3.2.2. Condiciones de operación en el extractor	89
I.3.2.3. Descripción del proceso global	97
I.3.3. Diseño de equipos	98
I.3.3.1. Molino (M-I.1)	98
I.3.3.2. Extractor (E-I.1/E-I.2)	99
I.3.3.3. Válvula de expansión (V-I.1)	100
I.3.3.4. Separador gas-líquido (S-I.1)	101
I.3.3.5. Depósito de CO ₂ (T-I.2)	102
I.3.3.6. Sistema de tuberías	103
I.3.3.7. Bombas para la compresión e impulsión de fluidos (B-I.1 y B-I.2)	104
I.3.3.8. Depósito de almacenamiento de piel de naranja (T-I.1)	105
I.4. DISEÑO MECÁNICO	106
I.5. ANÁLISIS DE COSTES	110
I.6. BIBLIOGRAFÍA	112
I.7. ANEXO	116
I.A. Símbolos	117
I.B. Cálculos	119
I.B.1. Determinación del mecanismo limitante de solubilidad	119
I.B.2. Diseño y dimensionado de equipos	120
I.B.3. Diseño mecánico	141
I.B.4. Determinación de costes	145

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla I.1.	Métodos de extracción, convencionales y no convencionales	82
Tabla I.2.	Condiciones óptimas de operación determinadas experimentalmente a escala de laboratorio	93
Tabla I.3.	Condiciones de operación de la extracción de aceite esencial de naranja con CO ₂ supercrítico	94
Tabla I.4.	Parámetros que condicionan la cinética de la extracción, según el modelo de Sovová, determinados experimentalmente (Mira et al. 1999)	95
Tabla I.5.	Parámetros del proceso de extracción	95
Tabla I.6.	Condiciones del CO ₂ en cada una de las etapas	97
Tabla I.7.	Parámetros de diseño del molino de martillos	99
Tabla I.8.	Parámetros de diseño del equipo de extracción	99
Tabla I.9.	Parámetros de diseño de la válvula	101
Tabla I.10.	Parámetros de diseño del separador	102
Tabla I.11.	Parámetros de diseño del depósito de CO ₂	102
Tabla I.12.	Parámetros de diseño de las tuberías	104
Tabla I.13.	Parámetros de diseño de las bombas	105
Tabla I.14.	Parámetros de diseño del depósito de almacenamiento de materias primas	105
Tabla I.15.	Costes de adquisición de equipos del Área I	111
Tabla I.16.	Datos de diseño para el equipo de extracción	123
Tabla I.17.	Dimensionado del equipo de extracción (E-I.1/E.I.2)	124
Tabla I.18.	Cálculo del espesor del aislante	126
Tabla I.19.	Dimensionado del separador gas-líquido (S-I.1)	130
Tabla I.20.	Dimensionado del depósito de CO ₂	131
Tabla I.21.	Cálculo del aislante para el depósito de CO ₂	131
Tabla I.22.	Condiciones del fluido en cada una de las conexiones	132
Tabla I.23.	Diámetros óptimos de las tuberías del sistema	133
Tabla I.24.	Longitud de las tuberías	133
Tabla I.25.	Pérdidas por fricción en las tuberías (B-I.1)	137

Tabla I.26.	Pérdidas por fricción en los accesorios (B-I.1)	137
Tabla I.27.	Pérdidas por fricción en las tuberías (B-I.2)	137
Tabla I.28.	Pérdidas por fricción en los accesorios (B-I.2)	138
Tabla I.29.	Dimensionado de las bombas (B-I.1 y B-I.2)	138
Tabla I.30.	Dimensionado del depósito de almacenamiento de materia prima (T-I.1)	141
Tabla I.31.	Presiones de diseño para el extractor y el depósito de CO ₂	142
Tabla I.32.	Temperaturas de diseño para el extractor y el depósito de CO ₂ , así como sus respectivas tensiones máximas de trabajo	143
Tabla I.33.	Comprobación del criterio para el cálculo del espesor	143
Tabla I.34.	Espesor del equipo de extracción y del depósito de CO ₂	143
Tabla I.35.	Masa de acero que constituye al equipo de extracción y al depósito de CO ₂	143
Tabla I.36.	Coste del molino de martillos M-I.1, así como de su motor WM-I.1.	146
Tabla I.37.	Coste del equipo de extracción E-I.1.	147
Tabla I.38.	Coste de la válvula de expansión V-I.1.	148
Tabla I.39.	Coste del separador gas-líquido S-I.1.	149
Tabla I.40.	Coste del depósito de CO ₂ T-I.1.	149
Tabla I.41.	Coste del sistema de tuberías.	150
Tabla I.42.	Coste de las bombas.	152
Tabla I.43.	Costes de los motores.	153
Tabla I.44.	Coste del depósito de materias primas T-I.2.	155

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura I.1.	Composición del aceite esencial de distintas variedades de naranjas extraído por diferentes técnicas: Hidrodestilación (HD), hidrodestilación asistida por microondas (MAD) y prensado en frío (CP) (Ferhat et al., 2016)	80
Figura I.2.	Continuación de la tabla de la Fig.I.1.	81
Figura I.3.	Diagrama de fases del CO ₂ .	83
Figura I.4.	Esquema de una partícula sólida según el modelo BIC (Huang, Shi y Jiang 2012)	85
Figura I.5.	Evaluación del efecto de la presión en el rendimiento de extracción a 313 K	89
Figura I.6.	Concentración de D-limoneno en el aceite esencial extraído de la piel de las naranjas por medio de CO ₂ supercrítico a diferentes presiones y temperaturas (Mira et al, 1999)	89
Figura I.7.	Evaluación del efecto del flujo másico de CO ₂ en el rendimiento de la extracción a 313K y 15 MPa. La cantidad de extracto está expresada en kg de extracto por cada kg de disolvente (Mira et al., 1999)	90
Figura I.8.	Evaluación del efecto del flujo másico de CO ₂ en la cinética de la extracción a 313K y 15 MPa (Mira et al. 1999)	91
Figura I.9.	Evaluación del efecto del tamaño de partícula en la eficiencia de la extracción a 313K y 15 MPa. La cantidad de extracto está expresada en kg de extracto por cada kg de disolvente (Mira et al., 1999)	91
Figura I.10.	Evaluación de la influencia del tamaño de partícula en el porcentaje de D-limoneno presente en el aceite esencial extraído a 313 K y 15 MPa (Mira et al., 1999)	92
Figura I.11.	Curva de extracción simulada utilizando el modelo de Sovová (1994). Se muestra la cantidad de extracto obtenida (kg aceite esencial /kg de piel de naranjas) frente al tiempo (min)	95
Figura I.12.	Esquema del proceso	96

Figura I.13.	Tabla para la selección del equipo de trituración o molienda (Ulrich y Vasudevan, 2004)	120
Figura I.14.	Tabla guía para el diseño preliminar de distintos equipos de molienda y triturado (Ulrich y Vasudevan, 2004)	121
Figura I.15.	Listado de materiales aislantes térmicos recogido en el catálogo de elementos constructivos del CTE	125
Figura I.16.	Gráfica para hallar el factor de compresibilidad	127
Figura I.17.	Esquema de u separador vertical con las relaciones altura/diámetro recomendadas. Ilustración obtenida de Towler y Sinnott (2008)	128
Figura I.18.	Velocidad de circulación recomendada en función de la densidad del fluido, propuesta por Simpson (1968)	130
Figura I.19.	Diámetros normalizados para tuberías de acero	133
Figura I.20.	Rugosidad para tuberías de distintos materiales. Tabla obtenida de Towler y Sinnott (2008)	134
Figura I.21.	Longitud equivalente para distintos accesorios. Gráfica obtenida de Towler y Sinnott (2008)	135
Figura I.22.	Rangos de operación de los distintos tipos de bombas. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003)	138
Figura I.23.	Eficiencia de bombas centrífugas. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003)	138
Figura I.24.	Diagrama de Moody	139
Figura I.25.	Ecuaciones para determinar el espesor de tanques a presión según el código ASME. Tabla obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003)	143
Figura I.26.	Tensión máxima de trabajo para distintos materiales en función de la temperatura y eficiencia de juntas, según el código ASME. Tabla obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003)	143
Figura I.27.	Estimación de costes de diferentes equipos. Gráfica obtenida de Towler y Sinnott (2008)	145
Figura I.28.	Estimación del coste de una columna vertical sin plantas, relleno o conexiones. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003)	146
Figura I.29.	Estimación del coste de válvulas de control y alivio. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003)	147
Figura I.30.	Estimación del coste de un depósito de almacenamiento horizontal. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003)	149
Figura I.31.	Estimación del coste de tuberías por unidad de longitud. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003)	150

- Figura I.32. Estimación de la eficiencia de motores. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003) 151
- Figura I.33. Estimación de costes de motores. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003) 152
- Figura I.34. Estimación de costes de diferentes equipos. Gráfica obtenida de Towler y Sinnott (2008) 153

I.1 INTRODUCCIÓN

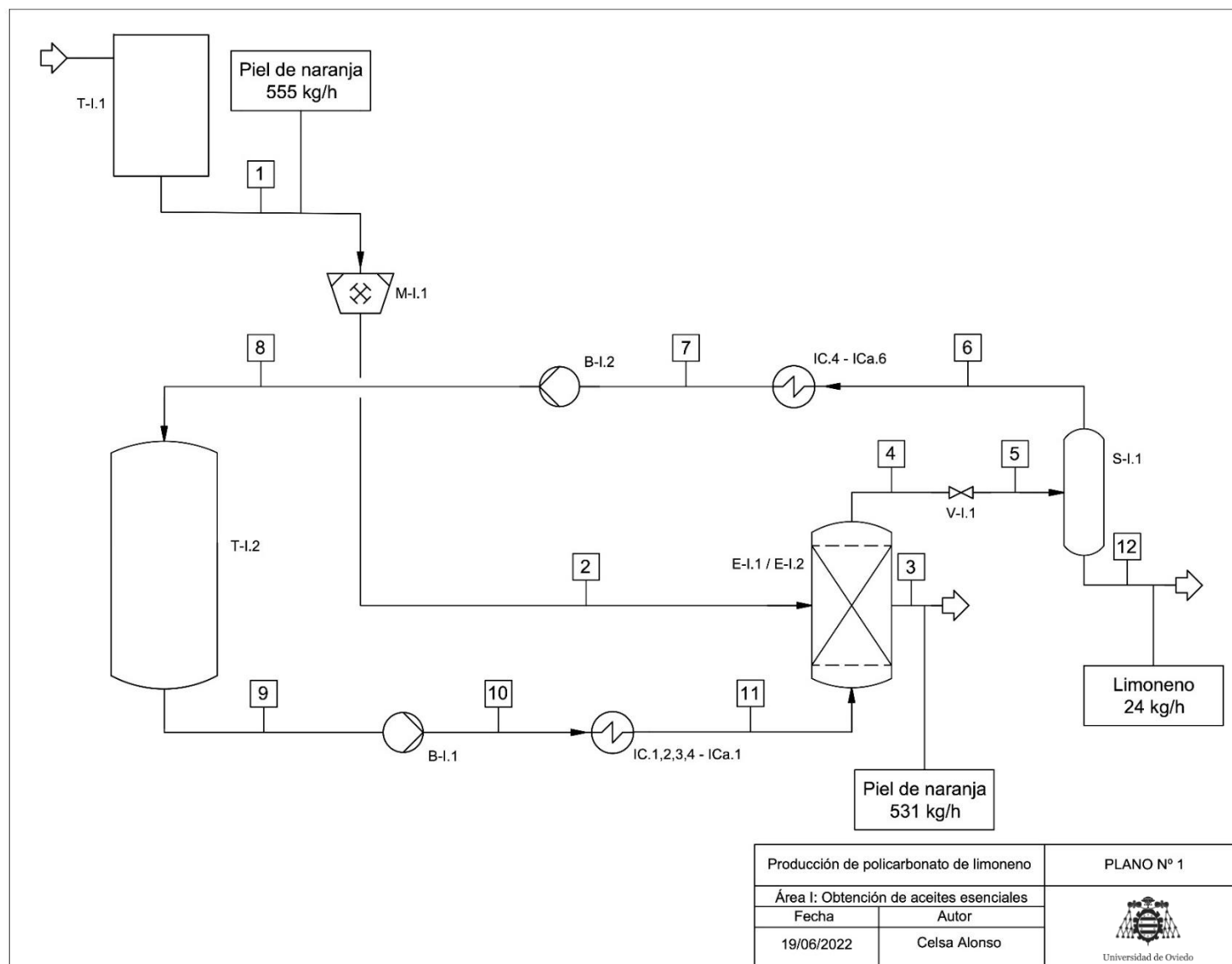
En la primera área de este proceso se lleva a cabo el tratamiento de la materia prima. Esta materia prima se corresponde con la piel de naranja generada como residuo en el proceso productivo de CIMUSA, fábrica destinada a la manufactura de zumos y concentrados.

Este tratamiento consistirá en la extracción de los aceites esenciales presentes en la piel de la naranja, los cuales poseen una elevada concentración en D-limoneno. Con el objetivo de seleccionar el método de extracción más adecuado, se realiza una evaluación de las técnicas existentes, a escala de laboratorio e industrial, donde se considera su sostenibilidad y su viabilidad económica. Se entiende como técnica sostenible a aquella que posea bajos requerimientos energéticos, no utilice grandes cantidades de disolvente y permita valorizar las pieles de naranja residuales, reduciendo al mínimo el impacto ambiental.

Tras el análisis de la literatura, se decide realizar una extracción sólido-fluido utilizando CO₂ supercrítico. Este método permite extraer 4,27 kg de aceite esencial por cada 100 kg de materia prima, con una concentración de 99,5% en peso de D-limoneno (Mira et al. 1999). En cada ciclo de extracción, el cual se completa a los 75 minutos, se cargan 693,5 kg de materia prima y se consumen 17.338 kg de CO₂. Para poder operar en continuo, se deciden utilizar 2 extractores funcionando en paralelo, de forma que uno esté operando cuando el otro esté en descarga y carga de sólidos. Esto permite gestionar 555 kg/h de piel de naranja, generando 23,57 kg/h de D-limoneno. Se opera en continuo, es decir, 24 horas al día, consumiendo un total de 13.315 kg de piel de naranja al día.

Se abarca el diseño de todos los equipos necesarios para la instalación de este proceso, recurriendo a un cambio de escala para el caso concreto de los extractores, equipos principales de esta sección. Se incluye también un análisis de los costes de adquisición de los equipos, resultando estos en un total de 1.310.833 €.

I.2 DIAGRAMA DE FLUJO



I.3 DISEÑO DEL PROCESO

I.3.1 SELECCIÓN DEL MÉTODO DE EXTRACCIÓN

El objetivo de esta primera etapa del proceso es conseguir extraer la mayor cantidad de aceite esencial posible de la piel de las naranjas. El contenido inicial de este aceite puede depender de muchos factores, como la variedad del fruto, su estado de maduración o las condiciones en las que haya sido cultivado.

Por lo general, el componente mayoritario de los aceites esenciales es el D-limoneno; sin embargo, pueden llegar a estar formados por más de 100 de compuestos diferentes, con proporciones muy diversas. La proporción en la que se encuentren los distintos compuestos orgánicos va a depender en gran medida del método de extracción empleado, tal y como se ha podido comprobar en la bibliografía (Bousbia et al., 2009; Ferhat et al., 2016; Boukroufa et al., 2015; Qadariah et al., 2017; Aboudaou et al., 2019) . En la tabla de la Fig. I.1 y la Fig. I.2 se muestra la composición del aceite esencial extraído de distintas especies de naranjas extraído por tres técnicas diferentes.

N°	Compounds ^a	Tarocco			Valencia Late			Washington Navel			Eureka			Villa França		
		MAD	HD	CP	MAD	HD	CP	MAD	HD	CP	MAD	HD	CP	MAD	HD	CP
	Monoterpene Hydrocarbons	95.75	97.20	98.34	97.48	98.61	98.32	94.55	95.49	98.03	85.90	93.07	95.25	92.37	93.26	95.72
1	α -Thujene	-	-	-	-	-	-	0.01	0.08	-	0.18	0.26	0.28	0.27	0.29	0.36
2	α -Pinene	0.43	0.47	0.50	0.43	0.53	0.51	0.42	0.53	0.50	1.00	1.34	1.31	1.15	1.37	1.56
3	Sabinene	0.63	0.51	0.45	0.54	0.49	0.54	0.75	0.34	0.54	-	-	-	-	-	-
4	β -Pinene	-	-	-	-	-	-	-	-	-	6.61	8.58	8.70	7.00	7.08	9.24
5	β -Myrcene	1.69	1.65	1.84	1.64	1.87	1.82	1.65	1.76	1.87	1.09	1.57	1.62	1.53	1.52	1.69
6	α -Phellandrene	0.19	0.13	0.22	0.15	0.17	0.36	0.19	0.12	0.15	0.02	0.05	0.03	0.05	0.03	0.05
7	α -Terpinene	-	-	-	-	-	-	0.01	0.06	-	0.15	0.21	0.14	0.18	0.13	0.17
8	Limonene	92.71	94.39	95.32	94.64	95.48	95.06	91.39	92.49	94.89	69.65	72.90	75.68	73.99	75.78	73.75
9	β -(E) Ocimene	-	-	-	0.02	0.02	0.02	0.08	0.04	0.03	-	-	-	0.14	0.15	0.12
10	γ -Terpinene	0.08	0.03	-	0.05	0.03	0.01	-	-	-	6.88	7.77	7.19	7.70	6.58	8.42
11	Terpinolene	0.02	0.02	0.01	0.01	0.02	0.01	0.05	0.07	0.05	0.32	0.39	0.30	0.36	0.33	0.36
	Oxygenated Monoterpenes	1.59	1.07	0.77	1.09	0.55	0.55	2.79	1.25	0.79	3.33	4.37	1.96	4.96	4.43	1.84
12	Linalool	1.02	0.68	0.44	0.62	0.27	0.30	1.86	0.42	0.15	0.19	0.30	0.10	0.30	0.32	0.12
13	Citronellal	0.03	0.02	0.02	0.06	0.03	0.04	0.07	0.04	0.05	0.03	0.05	0.03	0.11	0.05	0.07
14	Terpin-4-ol	0.07	0.10	0.19	0.03	0.06	0.02	0.12	0.34	0.01	0.14	0.29	0.01	0.23	0.37	0.02
15	α -Terpineol	0.14	0.10	0.04	0.10	0.06	0.05	0.22	0.26	0.03	0.37	0.39	0.15	0.43	0.53	0.14
16	Nerol	0.06	0.05	-	0.10	0.03	0.08	0.12	0.10	0.02	0.44	0.53	0.01	0.49	0.52	0.03
17	Neral	0.10	0.06	0.02	0.05	0.03	0.06	0.13	0.05	0.03	0.63	0.95	0.60	1.11	0.86	0.54
18	Geraniol	0.03	-	-	0.04	0.01	-	0.06	0.03	0.01	0.59	0.64	0.01	0.58	0.56	0.02
19	Geranial	0.14	0.06	0.06	0.09	0.06	0.11	0.21	0.01	0.49	0.94	1.22	1.05	1.71	1.22	0.90
20	Thymol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	Sesquiterpene Hydrocarbons	0.20	0.16	0.17	0.06	0.10	0.15	0.48	0.68	0.56	0.79	0.70	0.83	0.59	0.27	0.76
21	E-Caryophellene	0.03	0.01	0.02	0.02	0.02	0.01	0.04	0.03	0.03	0.27	0.21	0.23	0.18	0.16	0.21
22	α -Humulene	0.01	-	0.01	0.01	0.03	0.03	-	-	-	-	0.04	-	0.04	0.03	0.04
23	Germacrene D	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
24	Valencene	0.14	0.14	0.12	0.02	0.05	0.02	0.08	0.38	0.30	0.06	0.08	0.02	0.04	0.05	0.01
25	β -Bisabolene	-	-	-	-	-	-	0.04	0.02	0.01	0.44	0.37	0.58	0.33	0.30	0.50
26	Oxygenated Sesquiterpenes	0.02	0.01	0.02	0.01	-	0.09	0.32	0.25	0.22	0.02	-	-	-	-	-
27	Elemol	0.02	0.01	0.02	0.01	-	0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	-
28	Caryophellene Alcohol	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.01	-	-	-	-	-
29	Nootkatone	-	-	-	-	-	-	0.32	0.25	0.22	0.01	-	-	-	-	-

Fig. I.1. Composición del aceite esencial de distintas variedades de naranjas extraído por diferentes técnicas: Hidrodestilación (HD), hidrodestilación asistida por microondas (MAD) y prensado en frío (CP) (Ferhat et al., 2016).

30	Other Oxygenated Compounds	0.36	0.26	0.26	0.50	0.27	0.31	0.94	0.36	0.33	0.97	0.84	0.67	1.10	0.78	0.71
31	N-Octanol	0.09	0.03	-	0.15	0.05	-	0.12	0.04	0.13	-	-	-	0.19	0.05	-
32	N-Nonanal	0.05	0.01	-	0.01	0.01	0.02	0.04	0.01	-	-	-	0.02	0.08	0.06	0.16
33	Decanal	0.22	0.17	0.18	0.31	0.19	0.27	0.23	0.26	0.18	-	0.07	0.01	0.02	0.02	0.02
34	Linalyl acetate	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
35	Citronellyl Acetate	0.04	0.05	0.06	0.02	0.02	0.01	-	-	-	0.14	0.02	0.08	0.03	0.02	0.01
36	Neryl Acetate	0.01	-	0.02	0.01	-	0.01	0.02	0.01	0.02	0.52	0.48	0.36	0.44	0.36	0.32
37	Geranyl Acetate	-	-	-	-	-	-	0.53	0.04	-	0.31	0.27	0.20	0.34	0.27	0.20
38	Dodecanal	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	Extraction time (min)	30	180	120	30	180	120	30	180	120	30	180	120	30	180	120
	Yield %	0.17	0.15	0.04	0.42	0.39	0.16	0.10	0.13	0.05	0.24	0.21	0.05	0.29	0.26	0.03
	Total Oxygenated Compounds %	1.97	1.34	1.05	1.60	0.82	0.95	4.05	1.86	1.34	4.32	5.21	2.63	6.06	5.21	2.55
	Total non-Oxygenated Compounds %	95.90	97.36	98.51	97.54	98.71	98.47	95.03	96.17	98.59	86.69	93.77	96.08	92.96	93.53	96.48

Fig. I.2. Continuación de la tabla de la Fig.I.1.

Para la selección del método más adecuado se acudió a numerosos artículos de revisión bibliográfica (Siddiqui et al., 2022; Teigiserova et al., 2021; Razola-Díaz et al., 2021; Dima y Dima, 2015; Asbahani et al., 2015; Tongnuanchan y Benjakul, 2014). En ellos, se distinguían los métodos convencionales (ampliamente utilizados a escala industrial) de los métodos no convencionales (mucho menos implementados en la industria o estudiados únicamente a escala de laboratorio). En la Tabla I.1 están recogidos todos ellos.

Tabla I.1. Métodos de extracción, convencionales y no convencionales.

Métodos convencionales	Métodos no convencionales
Prensado en frío	Extracción con disolventes orgánicos
Destilación por arrastre de vapor	Extracción con bio-disolventes
Hidrodestilación	Extracción con CO ₂ supercrítico
	Calentamiento con microondas libre de disolvente

Actualmente, la destilación por arrastre de vapor, hidrodestilación y el prensado en frío son los métodos más aplicados en la industria para la extracción de aceites esenciales. Los principales inconvenientes de la destilación y la hidrodestilación son su largo tiempo de extracción, su alto consumo energético y la elevada temperatura que se alcanza, pudiendo producir esta última la degradación de algunos compuestos presentes en los aceites. El prensado en frío, sin embargo, tiene un coste energético reducido y se realiza a temperatura ambiente, lo que permite preservar mejor la calidad y las propiedades naturales del extracto. Además, no utiliza ningún tipo de disolvente, minimizando así la cantidad de residuos generados y evitando la contaminación de la piel de las naranjas. El mayor inconveniente del

prensado en frío es su rendimiento, siendo este el más bajo de entre todos los obtenidos por el resto de técnicas, mencionadas en la Tabla I.1.

A escala de laboratorio un método bastante utilizado es la extracción con disolventes orgánicos. Esta técnica tiene requerimientos energéticos menores que la hidrodestilación o la destilación; sin embargo, utiliza grandes cantidades de disolvente. El más empleado es el hexano, dado que presenta mejores rendimientos frente a otros compuestos orgánicos como el diclorometano, el dietil éter o el acetato de etilo. Dada la naturaleza del hexano (origen fósil, tóxico y peligroso para el medio ambiente y la salud) la sostenibilidad y viabilidad económica de esta técnica aplicada a escala industrial es muy cuestionable. Aunque se ha estudiado la posibilidad de utilizar bio-disolventes (ciclopentil metil éter y 2-metil-tetrahidrofurano, entre otros), llegando incluso a obtener rendimientos superiores a los obtenidos con el hexano, su precio sigue siendo muy elevado y las grandes cantidades requeridas suponen un residuo complicado de gestionar.

Dos métodos prometedores son la extracción con CO₂ supercrítico y el calentamiento con microondas libre de disolvente.

Por un lado, el calentamiento con microondas libre de disolvente tiene requerimientos energéticos menores que otros métodos, además de tiempos de extracción mucho más reducidos. No utiliza disolventes orgánicos, ni se alcanzan temperaturas tan elevadas como con la destilación por arrastre de vapor o la hidrodestilación, lo que permite mantener tanto la calidad del extracto como la del material de extracción. Además, su rendimiento es comparable al de los métodos más implantados, como la destilación, tal y como se observa en la bibliografía, donde se respalda su uso (Bousbia et al., 2009; Ferhat et al., 2016; Boukroufa et al., 2015; Qadariyah et al., 2017; Aboudaou et al., 2019). En estos artículos, también ha podido comprobarse que la cantidad de limoneno extraída es muy variable, y en casi ningún caso se supera el 90% en peso.

Por otro lado, la extracción con CO₂ supercrítico es una técnica muy estudiada en el sector alimentario, que se ha llegado a implantar industrialmente en la obtención de aceites esenciales a partir de semillas y plantas. No genera residuos ni contamina la materia prima, lo que lo convierte en un método limpio; y, además, no requiere temperaturas elevadas, lo que permite garantizar la calidad del extracto. Da lugar a buenos rendimientos y permite una selección más precisa de los compuestos que desean extraerse del aceite esencial, pudiendo obtener extractos con más de un 99% de pureza en D-limoneno. Su principal inconveniente son los elevados costes de inversión debido a equipos complejos y especializados que han de manejar elevadas presiones.

La etapa que sigue al tratamiento de la materia prima consiste en una reacción de epoxidación, donde se desconoce cómo influiría el comportamiento de otros terpenos y si estos favorecerían la aparición de reacciones secundarias. Es por ello que, utilizando la extracción con microondas, posiblemente sea necesario una etapa de purificación.

Ambas técnicas se muestran como una opción interesante; sin embargo, se decide llevar a cabo la extracción con CO₂ supercrítico, dado que elimina la posterior etapa de purificación y asegura un extracto de elevada calidad.

I.3.2 EXTRACCIÓN CON CO₂ SUPERCRÍTICO

I.3.2.1 Marco teórico

Se dice que una sustancia alcanza el estado supercrítico cuando sus condiciones de temperatura y presión se encuentran por encima del punto crítico, es decir, por encima de la temperatura y presión críticas. En estas condiciones los compuestos presentan una densidad similar a la de los líquidos y, gracias a ello, buenas propiedades disolventes. Al mismo tiempo, poseen una viscosidad propia de un gas, lo que hace que los coeficientes de difusión de los solutos sean mayores en un fluido supercrítico que en un líquido, permitiendo una velocidad de extracción mayor (Johnston y Penninger, 1988). Estas características hacen de los fluidos supercríticos una opción realmente interesante a la hora de concebir un proceso de extracción. Técnicamente, una extracción de naturaleza sólido-fluido recibe el nombre de lixiviación.

En la industria alimentaria suele optarse por utilizar el CO₂ como disolvente de extracción, al ser posible alcanzar el estado supercrítico a unas condiciones ($T_c=31,1^\circ\text{C}$ y $p_c=72,8\text{ atm}$, tal y como puede verse en la Fig. I.3) que permiten preservar las propiedades del extracto, el cual se compone habitualmente de sustancias termolábiles (Rizvi, 1994; Palmer y Ting, 1995).

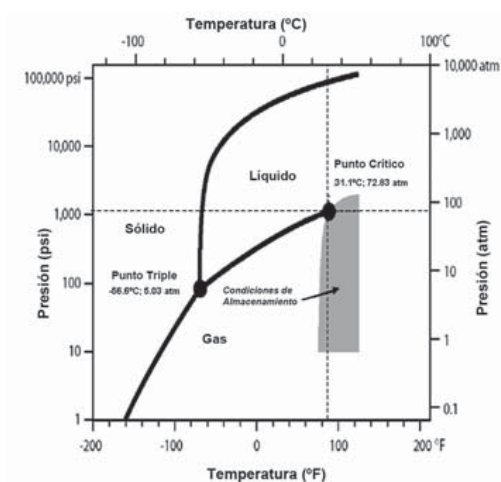


Fig. I.3. Diagrama de fases del CO₂.

La investigación en el ámbito de la extracción con CO₂ supercrítico (y en general con fluidos supercríticos) se centra sobre todo en el caso específico de la obtención de compuestos presentes en matrices sólidas vegetales, encontrándose estas dispuestas en forma de lecho (Huang, Shi y Jiang, 2012; Rizvi, 1994).

El proceso consiste en una corriente de CO₂ en estado supercrítico fluyendo de manera continua a través de un lecho poroso de matriz sólida y actuando como disolvente de las sustancias de interés. Para ello, este compuesto ha de difundir a través del lecho de partículas y adsorberse a la superficie de las mismas. Mediante interacciones disolvente-sólido se formará una fina capa de CO₂ alrededor de las partículas; posteriormente, y a través de interacciones disolvente-soluto, la sustancia o sustancias de interés se disolverán en el CO₂ que se encuentra en los poros (Huang, Shi y Jiang, 2012).

Una manera común de caracterizar esta operación es utilizando la curva de extracción, en la que se representa la cantidad de extracto obtenida frente al tiempo (t), o bien frente a la cantidad de disolvente consumida por kg de sólidos alimentados (q).

La compleja estructura de los productos naturales, como las sustancias vegetales, dificulta la aplicación de los métodos convencionales de cálculo para operaciones de lixiviación (Treybal, 1968).

Además de estudios experimentales, se han encontrado en la bibliografía diversos autores que tratan de definir este fenómeno mediante modelos matemáticos (Naik, Lentz y Maheshwari, 1989; Sovová, 1994; Veress, 1994; Goto, Roy y Hirose 1996; Nguyen, Barton y Spencer, 1991). Esto ha demostrado ser muy útil para ajustar los valores experimentales a la curva que definen los modelos; y, de esta manera, obtener ciertos parámetros que influyen en gran medida en los mecanismos físico-químicos presentes en el proceso de extracción, como los coeficientes de transferencia de materia.

El modelo que ha sido considerado el más apropiado es el desarrollado inicialmente por Sovová (1994), conocido como BIC ("Broken and Intact Cells"); esto se debe a que tiene en cuenta tanto la estructura de la matriz sólida como la cinética del proceso de extracción (Huang, Shi y Jiang, 2012; Mezzomo, Martínez y Ferreira 2009; Martínez, Rosa y Meireles 2007).

1.3.2.1.1 Descripción del modelo BIC

Generalmente, cuando se realiza un proceso de extracción supercrítica a sólidos de naturaleza vegetal como semillas, plantas o piel de frutas, dichos materiales se suelen haber sometido previamente a procesos de molienda o triturado.

Como consecuencia, Sovová introdujo el concepto de “Células rotas e intactas” o “Broken and Intact Cells” (BIC), suponiendo que los pretratamientos dañan la matriz vegetal y dividen las células que la componen en dos tipos (Fig. I.4): células rotas (aquellas que han sufrido daños en el pretratamiento) y células intactas (aquellas que no han sufrido daños en el pretratamiento).

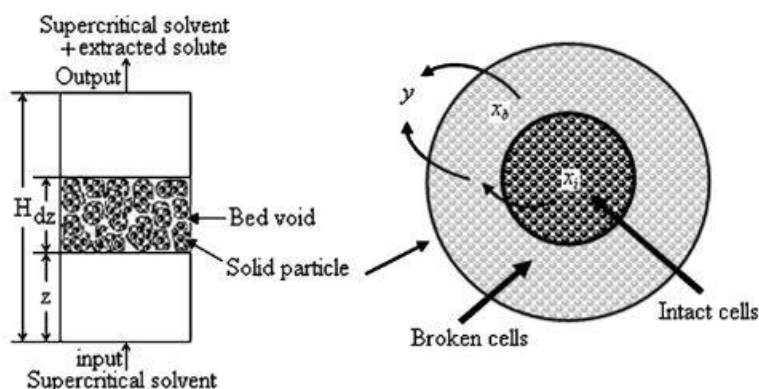


Fig. I.4. Esquema de una partícula sólida según el modelo BIC (Huang, Shi y Jiang 2012)

Las partículas sólidas que componen el lecho estarán entonces formadas por células rotas cerca de su superficie y por células intactas en las zonas más internas. La fracción volumétrica de células rotas en las partículas se caracteriza por la eficacia de triturado (r).

Sovová considera que el soluto que se encuentra en las células rotas es más accesible y se transfiere rápidamente al disolvente. Sin embargo, el soluto localizado en las células intactas tendrá que difundir primero a través de la matriz sólida hacia las células rotas y posteriormente al disolvente.

De esta manera, se distinguen dos mecanismos de transferencia de masa. Por un lado, un mecanismo convectivo, controlado por el coeficiente de transferencia de materia de la fase sólida a la fase fluida (k_f); es decir, de las células rotas a la película de disolvente. Por otro lado, un mecanismo de difusión del soluto a través de la matriz sólida, es decir, de las células intactas a las células rotas; controlado por el coeficiente de transferencia de materia de la fase sólida (k_s). La resistencia que tendrá que vencer el soluto será mucho mayor a través de la matriz sólida, por lo que $k_s \ll k_f$.

La descripción de este fenómeno según Sovová resulta en una posible división del proceso de extracción en tres periodos (Huang, Shi y Jiang, 2012):

- Tasa de extracción constante o **CER** (“*constant extraction rate*”). En este primer periodo tiene lugar la extracción del soluto de fácil acceso, que se encuentra en las células rotas. Puesto que en este punto el fenómeno de transferencia de masa está

controlado por la resistencia convectiva de la película de disolvente ($1/kf$), transcurre muy rápidamente. Al final de este periodo, se habrá extraído todo el soluto contenido en las células rotas de las partículas situadas a la entrada del lecho.

- Disminución de la tasa de extracción o **FER** (“*falling extraction rate*”). En este punto, comienza a extraerse tanto el soluto de difícil acceso que se encuentra en las células intactas, como el soluto de fácil acceso aún presente en las células rotas de partículas situadas en zonas del lecho más cercanas a la salida. Por lo tanto, en la transferencia de materia intervendrán tanto el mecanismo de difusión a través de la matriz sólida (controlado por k_s) como el mecanismo convectivo que rige la transmisión de soluto del sólido a la fase fluida (controlado por kf). Por ello, la tasa de extracción global disminuye. Al final de este periodo, se habrá extraído todo el soluto de fácil acceso, y parte del soluto contenido en células intactas.
- Controlado por la difusión o **DC** (“*diffusion-controlled*”). Esta fase del proceso de extracción se caracteriza por no disponer de más soluto de fácil acceso, sino que todo el soluto que se extrae proviene de células intactas. Como resultado, la transferencia de masa está condicionada por la resistencia a la difusión del soluto en la matriz sólida, es decir, por $1/k_s$.

Las suposiciones que se tuvieron en cuenta en el desarrollo matemático del modelo BIC son las siguientes (Sovová, 1994):

- El régimen de flujo a través del lecho es flujo de pistón, por lo que se considera despreciable la dispersión en la dirección axial.
- La extracción tiene lugar en condiciones isotermas e isobáricas.
- El soluto se encuentra homogéneamente distribuido en el lecho de partículas. Además, el tamaño de las partículas es el mismo en todo el lecho.
- Las condiciones del lecho sólido no se modifican a medida que transcurre la extracción. Esto implica que los valores de la porosidad del lecho y el área específica de las partículas no se ven afectados, aunque tenga lugar una reducción de masa del lecho ocasionada por la extracción del soluto.
- El fenómeno de transferencia de masa tiene lugar de manera similar para todo el extracto.
- La concentración de soluto en el fluido supercrítico a la entrada del extractor se considera nula; y su acumulación en el fluido a medida que este avanza en el lecho, despreciable.
- Las propiedades del CO_2 supercrítico se mantienen constantes a medida que transcurre la extracción.

La curva de extracción puede determinarse a través de la ecuación [I.1].

$$e(t) = x_0 - \frac{1}{H} \int_0^H x(z, t) dz \quad [I.1]$$

Teniendo en cuenta todo lo comentado anteriormente, la resolución analítica de la ecuación [I.1] aplicando el modelo BIC da lugar a tres ecuaciones ([I.2], [I.3], [I.4]), cada una de ellas asociada a un periodo de extracción (CER, FER y DC, respectivamente).

$$e = q \times y^* \times [1 - \exp(-Z)] \text{ para } t < t_{\text{CER}} \quad [I.2]$$

$$e = y^* \times [q - q_m \times \exp(Z_w - Z)] \text{ para } t_{\text{CER}} \leq t < t_{\text{FER}} \quad [I.3]$$

$$e = x_0 - \frac{y^*}{W} \ln \left\{ 1 + \left[\exp \left(W + \frac{x_0}{y^*} \right) - 1 \right] \times \exp \left[W \times (q_m - q) \times \frac{x_i}{x_0} \right] \right\} \text{ para } t \geq t_{\text{FER}} \quad [I.4]$$

Donde:

$$q = \frac{m_{\text{CO}_2}}{m_{\text{sólidos}}} \quad [I.5]$$

$$\dot{q} = \frac{q}{t} \quad [I.6]$$

$$q_{\text{CER}} = \frac{x_0 - x_i}{y^* \times Z} \quad [I.7]$$

$$q_{\text{FER}} = q_{\text{CER}} + \frac{1}{W} \times \ln \left(\frac{x_i + (x_0 - x_i) \times \exp(W \times x_0 / y^*)}{x_0} \right) \quad [I.8]$$

$$Z = \frac{k_f a_0 \rho_f}{[\dot{q}(1 - \varepsilon) \rho_s]} \quad [I.9]$$

$$Z_w = \frac{Z \times y^*}{W \times x_0} \ln \left(\frac{x_0 \times \exp[W \times (q - q_{\text{CER}})] - x_i}{x_0 - x_i} \right) \quad [I.10]$$

$$W = \frac{k_s a_0}{[\dot{q}(1 - \varepsilon)]} \quad [I.11]$$

Una vez determinada la solubilidad (y^*), la concentración inicial total de soluto en la matriz sólida (x_0) y la concentración inicial de soluto en las células rotas de la matriz sólida (x_i), pueden ajustarse los datos experimentales al modelo y obtener los parámetros Z y W (los cuales se definen según las ecuaciones [I.9] y [I.11]).

El primer parámetro (y^*) depende fundamentalmente de las condiciones de presión y temperatura en las que se lleve a cabo la extracción. El segundo y tercer parámetro (x_0 y x_i) variarán en función del tipo de matriz vegetal y del tamaño partícula. Finalmente, Z y W son directamente proporcionales a los coeficientes de transferencia de materia k_f y k_s ,

respectivamente; como resultado, dependerán del flujo y propiedades del disolvente y del tamaño de partícula (Berna et al. 2000; Huang, Shi y Jiang, 2012).

I.3.2.2 Condiciones de operación en el extractor

Para diseñar el proceso de extracción supercrítica se realiza un cambio de escala. Este procedimiento consiste en, a partir de estudios realizados en el laboratorio o en planta piloto, elegir un parámetro a escalar y mantener el resto de condiciones constantes.

La elección de la variable de diseño adecuada no es una decisión aleatoria, sino que dicha variable ha de ser aquella que permita considerar que el proceso se comportará de manera muy similar a nivel industrial comparado con lo observado experimentalmente.

En los próximos apartados se exponen las condiciones de operación óptimas determinadas experimentalmente, las cuales se han obtenido de la bibliografía, y se discute el criterio de cambio de escala más apropiado para este proceso.

I.3.2.2.1 Condiciones óptimas de operación determinadas en el laboratorio

Aunque el punto crítico se corresponde con unas condiciones determinadas, la región supercrítica abarca un amplio rango de temperaturas y presiones. La eficacia y selectividad de la extracción es muy sensible a pequeños cambios en ambos parámetros (Palmer y Ting, 1995), por lo que es preciso evaluar diferentes condiciones y seleccionar las más óptimas.

Estos no son los únicos aspectos que afectan al proceso, sino que también se han encontrado en la literatura estudios que evalúan el efecto del flujo de disolvente y el tamaño de partícula de la matriz sólida; en concreto, para el caso de aceites esenciales contenidos en la piel de las naranjas (Mira et al., 1996; Berna et al., 2000).

Mira et al. (1996) observaron que, manteniendo la temperatura constante e igual a 313 K, el rendimiento de extracción era directamente proporcional a la presión utilizada (Fig. I.5). Así mismo, establecieron que era recomendable operar a una temperatura por debajo de 323 K para evitar fenómenos de degradación térmica y conservar la calidad del extracto.

Sin embargo, en otro estudio realizado por estos mismos investigadores algunos años más tarde se determinó que, a medida que aumenta la presión, también pueden observarse variaciones considerables en cuanto a la selectividad que posee el CO₂ por ciertos componentes presentes en el aceite esencial (Mira et al., 1999).

El objetivo de esta primera etapa es extraer un aceite esencial lo más concentrado en D-limoneno como sea posible. Por ello, tal y como puede verse en la Fig. I.6, las condiciones que se determinaron más óptimas fueron 125 bar (12,5 MPa) y 35 °C (308 K) (Mira et al., 1999).

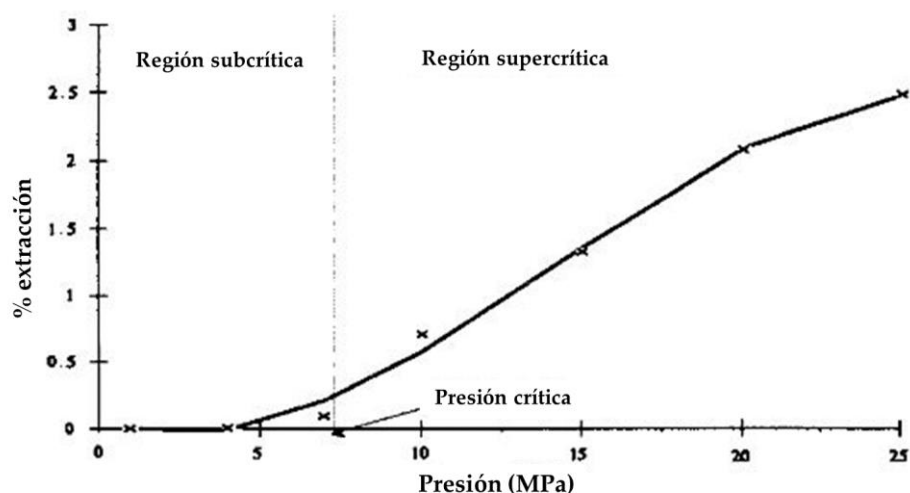


Fig. I.5. Evaluación del efecto de la presión en el rendimiento de extracción a 313 K. El % de extracción está expresado en kg de extracto por cada 100 kg de disolvente (Mira et al., 1996).

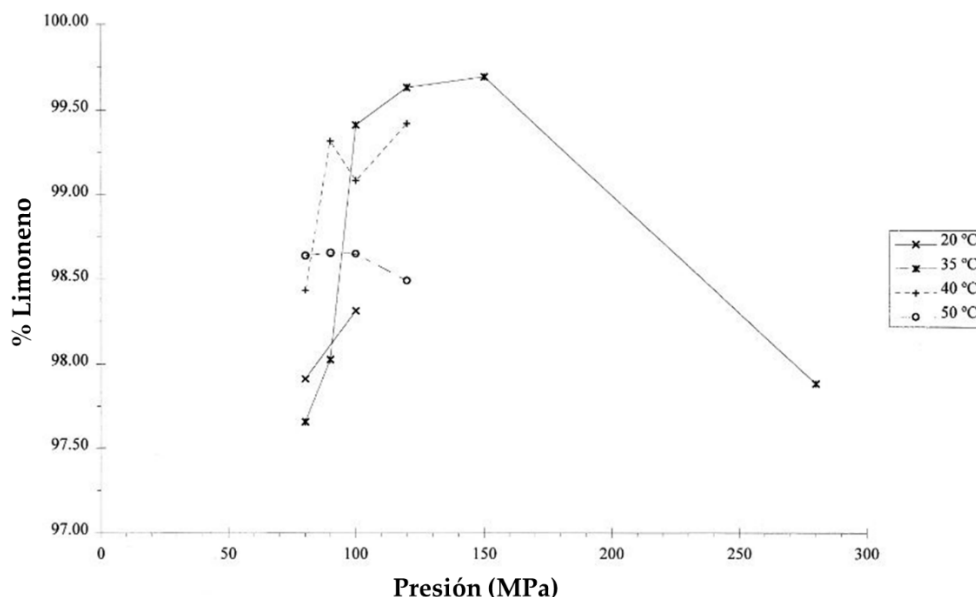


Fig. I.6. Concentración de D-limoneno en el aceite esencial extraído de la piel de las naranjas por medio de CO_2 supercrítico a diferentes presiones y temperaturas (Mira et al., 1999).

En cuanto al flujo de disolvente, se observó que, inicialmente, la cantidad de extracto obtenida variaba linealmente con la cantidad de disolvente empleada independientemente del flujo másico de CO_2 . Sin embargo, cuando los kg de CO_2 empleados por cada kg de sólidos (q) alcanzaba cierto valor, en concreto 6 kg CO_2 /kg sólidos, la influencia del flujo másico cobraba importancia. La tendencia observada era una disminución de la cantidad de extracto obtenida, para un mismo q , a medida que se aumentaba el flujo másico de CO_2 , tal y como puede verse en la Fig. I.7 (Mira et al., 1999).

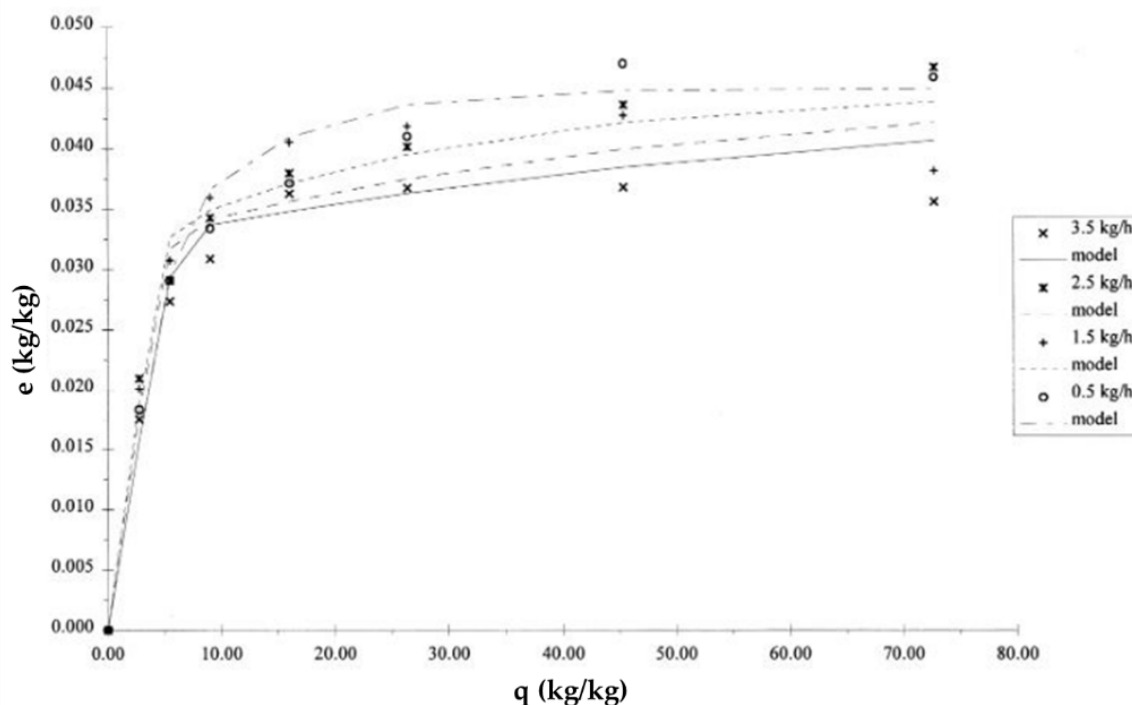


Fig. I.7. Evaluación del efecto del flujo másico de CO_2 en el rendimiento de la extracción a 313K y 15 MPa. La cantidad de extracto está expresada en kg de extracto por cada kg de disolvente (Mira et al., 1999).

La gráfica de la Fig. I.7 sugiere que el flujo másico de CO_2 más eficiente es 0,5 kg/h, puesto que consumiendo menos CO_2 se obtiene una mayor cantidad de extracto. Sin embargo, la cinética del proceso, tal y como puede verse en la Fig. I.8, alcanza su mejor valor para un flujo másico de 2,5 kg CO_2 /h (flujo al que se obtiene un mayor coeficiente de transferencia de materia de la fase sólida a la película de disolvente).

El tamaño de partícula es otro factor que influye notablemente en el proceso de extracción. Por un lado, cuanto mayores sean las partículas menor será la eficiencia de la extracción, tal y como puede verse en la Fig. I.9. Esto se debe a que un mayor diámetro de partícula implica un mayor recorrido del soluto a través del sólido, donde la resistencia a la transferencia de materia es elevada. Por otro lado, el porcentaje de D-limoneno presente en el aceite esencial extraído aumenta al disminuir el tamaño de partícula, lo cual puede observarse en la Fig. I.10 (Mira et al., 1999).

En la Tabla I.2 se recogen las condiciones óptimas para llevar a cabo la extracción del aceite esencial contenido en la piel de las naranjas utilizando CO_2 supercrítico, determinadas experimentalmente en la bibliografía (Mira et al. 1999).

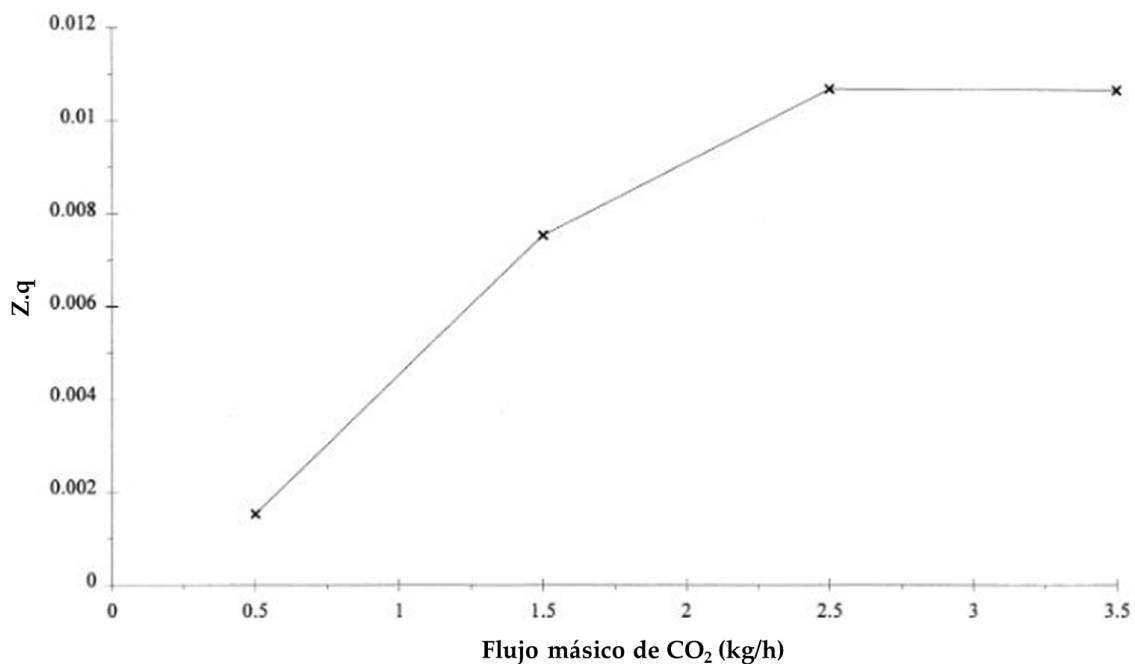


Fig. I.8. Evaluación del efecto del flujo másico de CO₂ en la cinética de la extracción a 313K y 15 MPa (Mira et al. 1999).

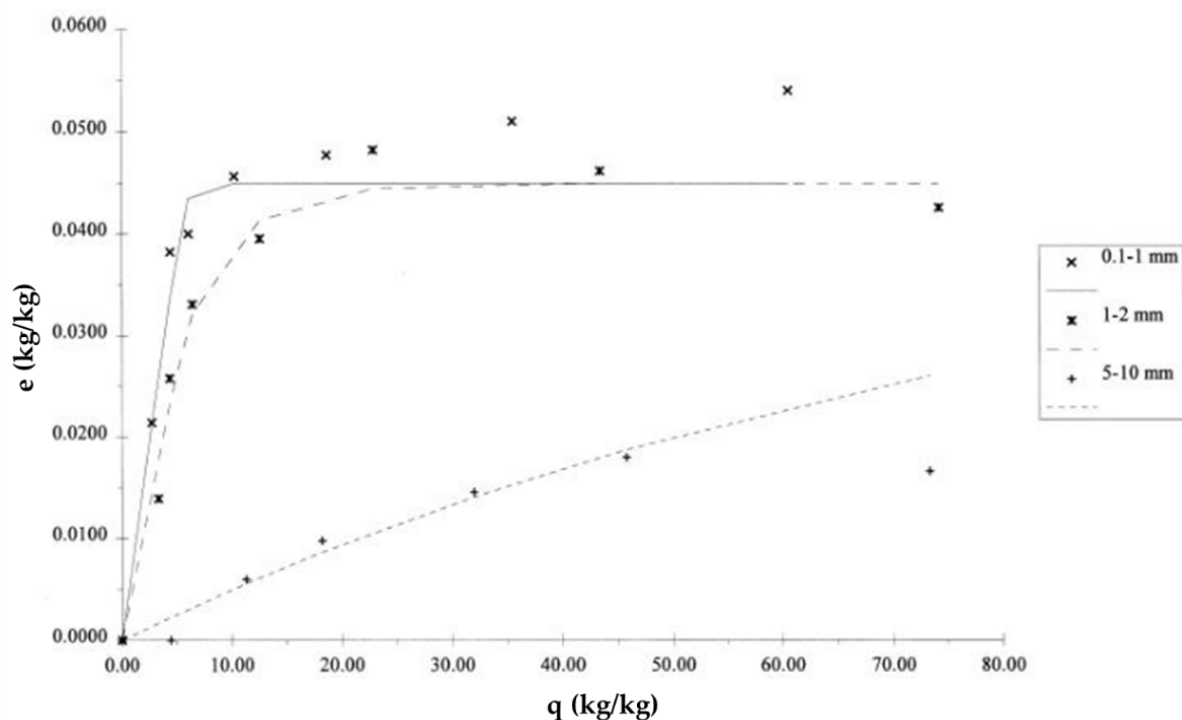


Fig. I.9. Evaluación del efecto del tamaño de partícula en la eficiencia de la extracción a 313K y 15 MPa. La cantidad de extracto está expresada en kg de extracto por cada kg de disolvente (Mira et al., 1999).

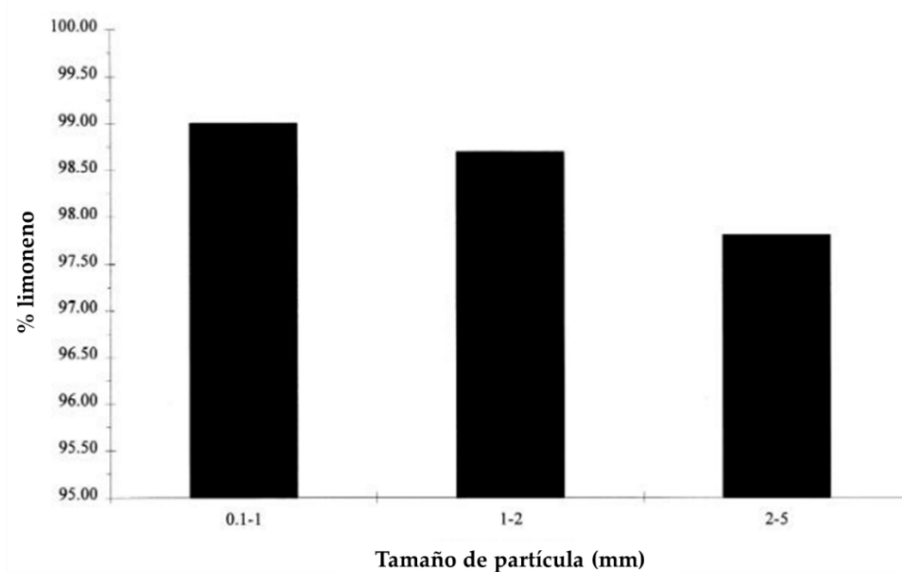


Fig. I.10. Evaluación de la influencia del tamaño de partícula en el porcentaje de D-limoneno presente en el aceite esencial extraído a 313 K y 15 MPa (Mira et al., 1999).

Tabla I.2. Condiciones óptimas de operación determinadas experimentalmente a escala de laboratorio (Mira et al., 1999).

Parámetro	Valor óptimo
Presión, p	12,5 MPa
Temperatura, T	308 K
Flujo de CO ₂	2,5 kg/h
Tamaño de partícula	0,3 mm

I.3.2.2.2 Cambio de escala: del laboratorio a la industria

Existen varios criterios que se pueden utilizar para escalar un proceso de extracción con CO₂ supercrítico (Clavier y Perrut, 2004). Hay dos que destacan sobre el resto, y cuya selección depende del mecanismo que limite la transferencia de materia. Cuando la limitación es la solubilidad del soluto en la fase fluida, se ha demostrado que mantener la relación $[m_{\text{sólidos}}/m_{\text{disolvente}}]$ constante proporciona buenos resultados (Clavier y Perrut, 2004). Por el contrario, cuando el mecanismo limitante es la difusión del soluto en la fase sólida, el criterio más apropiado es mantener constante el cociente $[w_{\text{CO}_2}/m_{\text{sólidos}}]$ (Martínez, Rosa y Meireles, 2007; Mezzomo, Martínez y Ferreira 2009).

El método de evaluación seguido por los autores en todas las casuísticas mencionadas fue realizar la extracción a escala de laboratorio y, posteriormente, en planta piloto, aplicando distintos criterios de cambio de escala. Los resultados experimentales se ajustaron por

diversos modelos matemáticos, pudiendo hallar de esta manera los coeficientes de transferencia de materia; comparando posteriormente las discrepancias entre los obtenidos a escala de laboratorio con los obtenidos en planta piloto.

El mejor criterio de cambio de escala será aquel que permita considerar que se conserva la cinética de extracción observada a nivel de laboratorio, es decir, que se conservan los coeficientes de transferencia de materia. De esta manera, se puede obtener la curva de extracción del proceso a mayor escala.

Se supone, inicialmente, que la solubilidad no es el factor limitante para el caso del aceite esencial de naranja. Por lo tanto, la variable de diseño que se utiliza para escalar el proceso de extracción con CO₂ supercrítico es la relación $[w_{CO_2}/m_{sólidos}]$.

La masa de lecho con la que se realizaron los experimentos a escala de laboratorio fue 0,125 kg. Dado que, tal y como se expuso en el apartado anterior, los mejores resultados se obtuvieron para un flujo másico de CO₂ de 2,5 kg/h, la relación $w_{CO_2}/m_{sólidos}$ (\dot{q}) se corresponde con 20 kg/kg h.

Por otra parte, lo ideal sería que el diámetro de las partículas fuera lo más pequeño posible (en torno a 0,3 mm). Sin embargo, se opta por suponer un diámetro algo mayor, puesto que en la realidad conseguir que la piel de las naranjas se reduzca a un tamaño de partícula de 0,3 mm resultaría complicado y costoso.

Las condiciones de operación elegidas para el proceso pueden verse en la Tabla I.3. Su elección se basa en el estudio experimental realizado por Mira et al. (1999), desarrollado en el apartado anterior.

Tabla I.3. Condiciones de operación de la extracción de aceite esencial de naranja con CO₂ supercrítico.

Presión (MPa)	12
Temperatura (K)	308
Diámetro de partícula, d_p (mm)	1,5
\dot{q} (kg/kg-h)	20

La curva de extracción se puede simular utilizando el modelo matemático de Sovová, para lo que resulta fundamental conocer tanto los coeficientes de transferencia de materia (k_f y k_s) como la solubilidad (y^*), la concentración inicial total de soluto en la matriz sólida (x_0) y la concentración inicial de soluto en las células rotas de la matriz sólida (x_i). Estos parámetros fueron determinados en la bibliografía para las condiciones descritas en la Tabla I.3, y pueden verse en la Tabla I.4.

Generalmente, el valor de los coeficientes de transferencia de materia se expresa como $k_f \cdot a_0$ y $k_s \cdot a_0$, es decir, se incluye el área superficial de la partícula. Otra forma de expresarlos es mediante Z y W, donde su valor depende, además, de la porosidad del lecho (ϵ), el flujo específico de disolvente (\dot{q}) y, en el caso de Z, también de las densidades del sólido y del fluido (ρ_s y ρ_f). Esto puede comprobarse en las ecuaciones [I.9] y [I.11]. Para el caso del aceite de naranja, los valores que se han encontrado en la bibliografía están proporcionados como Z y W.

Tabla I.4. Parámetros que condicionan la cinética de la extracción, según el modelo de Sovová, determinados experimentalmente (Mira et al. 1999).

Z	1,12
W	0,1911
x₀	0,045
x_i	0,012
y*	0,0080

La curva de extracción resultante se muestra en la Fig. I.11. En ella se puede observar cómo la tasa de extracción (pendiente de la curva) va disminuyendo hasta que la cantidad de extracto obtenida alcanza un valor aproximadamente constante. Se considera que el proceso se completa a los 75 minutos, tiempo al que se consigue un rendimiento del 4,27%.

En la Tabla I.5 se recogen algunos parámetros importantes que caracterizan el proceso de extracción. Entre ellos se encuentran los tiempos a los que finalizan los periodos CER y FER (t_{CER} y t_{FER} , respectivamente), con sus respectivas tasas de extracción; las cuales representan los kg de aceite esencial (EO) extraído por kg de sólidos y por unidad de tiempo.

Tabla I.5. Parámetros del proceso de extracción.

Periodo	Tiempo de finalización (min)	Tasa de extracción (kg EO/kg lecho h)
CER	10,13	0,112
FER	22,83	0,083
<i>Parámetros globales</i>		
Tiempo total de extracción (min)		75
Eficacia (%)		4,27

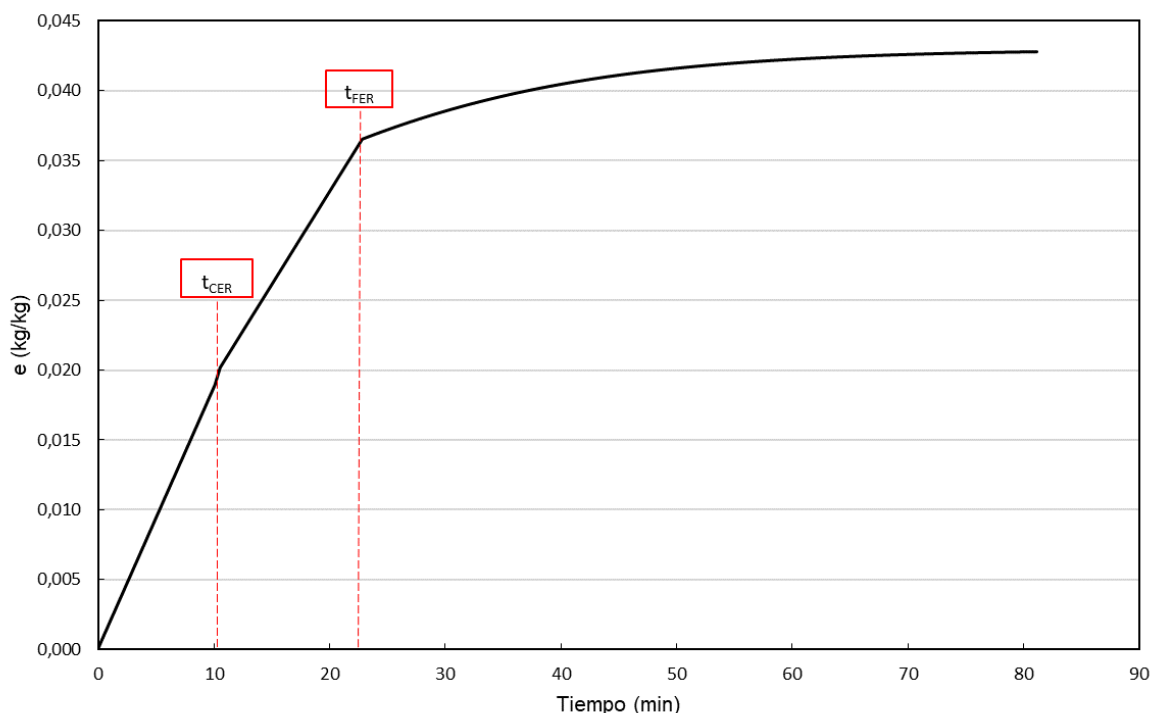


Fig. I.11. Curva de extracción simulada utilizando el modelo de Sovová (1994). Se muestra la cantidad de extracto obtenida (kg aceite esencial /kg de piel de naranjas) frente al tiempo (min).

Se pretenden suministrar al proceso 8.877 kg de piel de naranja al día, lo que supone un flujo de 555 kg/h. Puesto que en un ciclo de extracción se consumen 75 minutos (1,25 h), se han de cargar en cada ciclo 693,5 kg de materia prima. Por lo tanto, para conservar la relación $w_{CO_2}/m_{sólidos}$ constante, se necesitarán 13.870 kg/h de CO_2 .

Una vez definida la curva de extracción, puede comprobarse si la suposición inicial sobre el mecanismo que limita el proceso es correcta. Puesto que en el primer periodo de extracción (CER) el soluto extraído proviene de las células rotas, no afecta la difusión a través de la matriz sólida. Si la concentración de aceites esenciales en el CO_2 obtenida en este periodo se aleja de la concentración de equilibrio teórica, puede concluirse que, efectivamente, la solubilidad no es el factor limitante. El resultado obtenido tras los cálculos se muestra a continuación, el cual verifica la suposición. En el Anexo I.B.1 se detallan los cálculos.

$C_{EO} (t = t_{CER})$	y^*
0,0056	0,0080

I.3.2.3 Descripción del proceso global

El diseño del proceso consiste en conseguir que el CO₂ alcance las condiciones supercríticas y las mantenga durante la extracción. Con este objetivo, se distinguen 4 etapas. Los distintos estados del CO₂ se muestran a continuación en la Fig. I.12, cuyas condiciones se recogen en la Tabla I.6.

1. Presurización isoentrópica I – II
2. Calentamiento isobárico II – III
3. Expansión isoentálpica III – IV
4. Enfriamiento isobárico IV – I

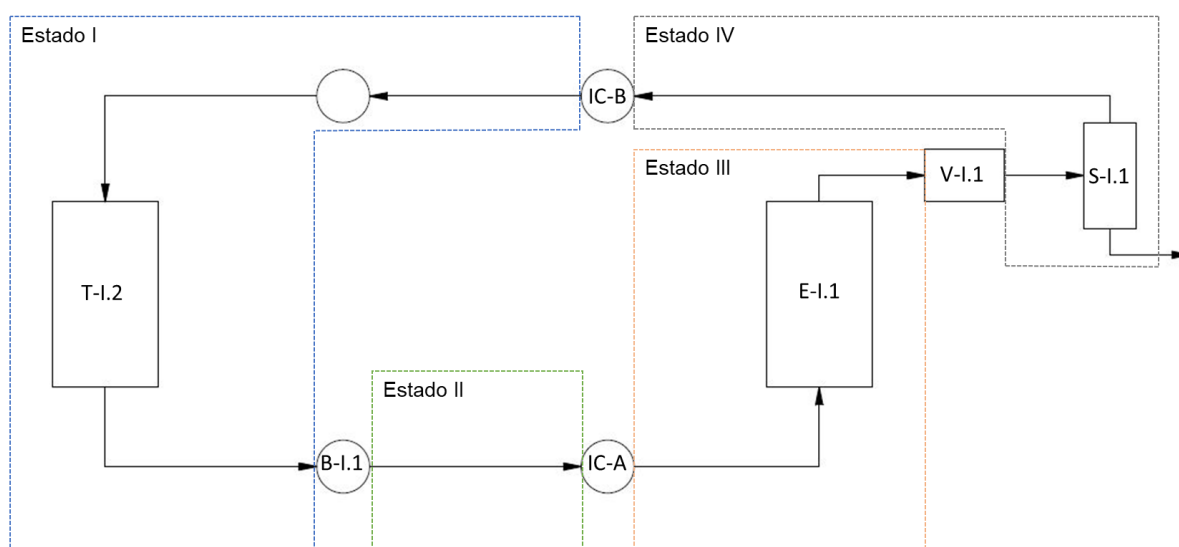


Fig. I.12. Esquema del proceso.

Tabla I.6. Condiciones del CO₂ en cada una de las etapas.

Estados	Temperatura (K)	Presión (MPa)	Densidad (Kg/m ³)	Viscosidad (Pa·s)
I	273,15	5,715	946,1	1,05·10 ⁻⁴
II	278,15	12,80	953,2	1,07·10 ⁻⁴
III	308	12,80	783,50	6.81·10 ⁻⁵
IV	293,15	5,715	192,7	1.81·10 ⁻⁵

Serán necesarios una serie de equipos de compresión y expansión, así como cambiadores de calor, los cuales estarán diseñados de tal manera que lleven al fluido a la presión y temperatura requeridas en cada etapa.

En el proceso propuesto el CO₂ se encuentra inicialmente a 5,715 MPa y 273,15 K. En primer lugar, se realiza una compresión isoentrópica. En la bibliografía se observó cómo

generalmente esta etapa tiene lugar con el CO₂ en estado líquido, y se lleva a cabo utilizando una bomba (Rizvi, 1994). Por ello, se decide emplear dicho equipo (B-I.1). Tras la compresión, el CO₂ posee una presión de 12,80 MPa, y habrá experimentado también un ligero aumento de temperatura hasta los 278,15 K.

Posteriormente, se eleva la temperatura hasta los 308 K, al hacer pasar el fluido por un intercambiador de calor (IC-A). En este punto, el CO₂ ya se encuentra a las condiciones de operación requeridas (12,80 MPa y 308 K), y se introduce en el extractor (E-I.1), donde se habrá cargado previamente la materia prima.

A la salida del extractor, para poder recuperar el D-limoneno extraído de la piel de las naranjas, es necesario llevar a cabo una expansión isoentálpica, lo cual se realiza a través de una válvula de estrangulamiento (V-I.1). Esto permite que el CO₂ pierda las condiciones supercríticas y, como consecuencia, disminuya la solubilidad del D-limoneno.

A la salida de la válvula se posee una corriente bifásica a 5,715 MPa y 293,15 K, dado que en dicha expansión se produce también una disminución de la temperatura. La corriente bifásica está formada por CO₂ gaseoso y limoneno líquido. Se considera que todo el D-limoneno extraído de la piel de las naranjas se encuentra en este punto en estado líquido. Esta corriente se introduce en un separador gas-líquido (S-I.1), pudiendo separar ambos compuestos.

El D-limoneno se introduce en la etapa de síntesis de óxido de limoneno, mientras que el CO₂ se recircula al proceso. Para que el disolvente recupere las condiciones iniciales, únicamente será necesaria una etapa de enfriamiento hasta los 273,15 K (IC-B).

Este procedimiento tiene lugar durante un ciclo de extracción, el cual dura 75 minutos. Esto implica que cada 75 minutos se produce una descarga de sólidos y una nueva carga de materia prima. Para poder convertir el proceso de naturaleza discontinua en un proceso continuo, se coloca un extractor en paralelo al primero (E-I.2). De esta forma, los ciclos de extracción tendrán lugar alternativamente en ambos extractores.

I.3.3 DISEÑO DE EQUIPOS

I.3.3.1 Molino (M-I.1)

Tal y como se ha comentado en apartados anteriores, el diámetro de partícula es un factor que influye en gran medida en el rendimiento de la extracción. Por ello, es importante controlar el tamaño de las partículas de piel de naranja que forman el lecho.

Con este objetivo, se incluye una trituradora en la instalación. Tras la revisión de la bibliografía, dada la naturaleza orgánica y características de la materia prima, se decide utilizar un molino de martillos (Ulrich y Vasudevan, 2004).

Los molinos de martillos aceptan un tamaño máximo de partícula a la entrada de 4 cm. Este tamaño se considera suficientemente elevado como para poder suponer que la piel de las naranjas, tras su procesado en la fábrica de zumo, no supera dicho valor. Los cálculos se detallan en el Anexo I.B.2.1 y los resultados se muestran en la Tabla I.7.

Tabla I.7. Parámetros de diseño del molino de martillos

$d_{p,i}$ (m)	0,04
$d_{p,f}$ (m)	0,0015
$W_{\text{piel de naranja}}$ (kg/h)	555
P (kW)	22,74

I.3.3.2 Extractor (E-I.1 / E-I.2)

El extractor es el equipo principal de la instalación, puesto que es donde tiene lugar la obtención del aceite esencial. Su dimensionado se realiza aplicando un cambio de escala, tal y como se ha expuesto en apartados anteriores. Esto implica mantener constantes ciertos parámetros de operación utilizados a nivel de laboratorio.

Tal y como se comentó anteriormente, con el objetivo de poder operar en continuo, se toma la decisión de utilizar dos equipos de extracción funcionando en paralelo. Las dimensiones y especificaciones de ambos extractores serán las mismas.

Para tanques que operan a elevadas presiones se recomiendan configuraciones cilíndricas (Towler y Sinnott, 2008; Ulrich y Vasudevan, 2004), con una relación H/D igual o superior a 5:1 (Ulrich y Vasudevan, 2004). Otra consideración a tener en cuenta son los cabezales superior e inferior del tanque. Estos pueden ser de muchas maneras: planos, torisféricos, elipsoidales o semiesféricos. Cuando se trabaja a elevadas presiones se sugieren cabezales semiesféricos, puesto que son los más resistentes (Towler y Sinnott, 2008).

Los cálculos realizados para su dimensionado pueden verse en el Anexo I.B.2.2 y sus resultados se muestran en la Tabla I.8.

Tabla I.8. Parámetros de diseño del equipo de extracción.

Volumen, $V_{E-I.1/E-I.2}$ (m³)	2,770
Diámetro, $D_{E-I.1/E-I.2}$ (m)	0,810
Altura $H_{E-I.1/E-I.2}$ (m)	4,857

Al llevar un proceso del laboratorio a escala industrial hay que tener en cuenta una serie de fenómenos que pueden cobrar importancia, como la caída de presión que sufre el

CO₂ al circular a través del lecho, la posible mala distribución de flujo o la transmisión de calor a través del lecho de partículas.

Para estimar la caída de presión ha de conocerse el régimen de flujo al que circula el disolvente en el extractor. Tras realizar los cálculos, se comprueba que el CO₂ circula en régimen de transición y, por lo tanto, puede aplicarse la ecuación de Ergun. Finalmente, se observa como la caída de presión en el lecho es igual a 5080 Pa, prácticamente despreciable comparada con la presión de operación (12,8 MPa).

Para disminuir las posibles pérdidas de calor que puedan producirse debido al gradiente de temperatura entre el interior del extractor y el exterior, se coloca un aislante alrededor del equipo. De esta forma, podrá considerarse que la operación de extracción transcurre de manera isotérmica. El aislante elegido consiste en lana mineral, y el espesor necesario se calcula teniendo en cuenta el peor de los casos posibles, así como una variación máxima de temperatura de 0,5 °C. Finalmente, se concluye, gracias a los cálculos realizados (Anexo I.B.2.2), que el espesor ha de ser de 18,24 mm.

Por otro lado, la mala distribución de flujo ocurre cuando el disolvente circula por caminos preferentes a través del lecho, perjudicando el rendimiento de la extracción. Este fenómeno se agrava al ampliar la escala de la operación. Para solventarlo, pueden colocarse distribuidores de fluido, aunque su diseño no se abarca en el presente trabajo.

I.3.3.3 Válvula de expansión (V-I.1)

A la salida del extractor, el D-limoneno se encuentra disuelto en el CO₂. Para separar ambos compuestos, se necesita que el disolvente pierda sus propiedades supercríticas; esto hace que disminuya la solubilidad del D-limoneno y se forme una corriente bifásica: CO₂ gaseoso y D-limoneno en estado líquido.

Con este objetivo, se lleva a cabo una expansión isoentálpica. Para reducir la presión en el sistema, a no ser que el trabajo generado en la expansión sea superior a varios cientos de caballos de potencia (100 caballos de potencia ≈ 75 Kw), suelen utilizarse válvulas de estrangulación en lugar de expansores (Walas, 2012).

El diseño de la válvula consiste en la determinación de su coeficiente de orificio (C_v) y su diámetro interno nominal. Al trabajar con fluidos compresibles, la densidad depende de la presión; en estos casos, se utiliza la ecuación [I.12] (Green y Southard, 2019).

$$w = 94,8 \cdot C_v \cdot p_e \cdot Y \cdot \sqrt{\frac{X \cdot M_w}{T_e z}} \quad [I.12]$$

El coeficiente de orificio obtenido tiene un valor de 7,356. Los cálculos se detallan en el Anexo I.B.2.3. Por otro lado, el diámetro nominal de la válvula se muestra en la Tabla I.9, el cual se escoge en base al diámetro de las tuberías de entrada y salida.

Tabla I.9. Parámetros de diseño de la válvula.

$D_{i, \text{ nominal (in)}}$	$D_{i, \text{ nominal (mm)}}$
3	80
C_v	
7,356	

I.3.3.4 Separador (S-I.1)

La mezcla bifásica que sale de la válvula, formada en su mayoría por CO₂ en estado gaseoso, se introduce en un separador gas-líquido con el objetivo de separar el D-limoneno.

La separación se basa en el asentamiento del líquido en el fondo del equipo por acción de la gravedad. Por ello, el diámetro del separador ha de ser suficiente como para conseguir una velocidad del gas inferior a la velocidad de asentamiento de las gotas de líquido. La velocidad con la que las gotas se depositan en el fondo del tanque puede obtenerse con la ecuación [I.13] (Towler y Sinnott, 2008).

$$u_t = 0,07 \cdot \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V}} \quad [I.13]$$

El caudal del líquido es muy inferior al caudal del gas, por lo que se decide utilizar un desnebulizador. Esto permite favorecer la separación y evitar que el D-limoneno sea arrastrado por el CO₂. Por lo general, se utilizan nebulizadores de acero inoxidable, de 100 mm de espesor y una densidad nominal de 150 kg/m³. Para hacer una estimación del diámetro necesario del separador puede utilizarse la ecuación [I.14] (Towler y Sinnott, 2008).

$$D = \sqrt{\left(\frac{4 \cdot V_V}{\pi u_t}\right)} \quad [I.14]$$

Generalmente, los separadores gas-líquido consisten en cilindros verticales (Walas, 2012). La longitud del cilindro por encima de la entrada de la alimentación ha de ser suficiente como para permitir la condensación de las gotas de líquido; en la bibliografía se encuentran las relaciones recomendadas con respecto al diámetro (Towler y Sinnott, 2008). El tiempo de residencia del líquido en el separador ha de ser siempre superior a los 10 minutos (Towler y

Sinnott, 2008). En este caso, puesto que se posee un caudal de líquido muy pequeño, se establece un tiempo de residencia de 1h; esto permite acumular un volumen de líquido considerable en el tanque y favorecer la separación. Las dimensiones del equipo se muestran en la Tabla I.10 y los cálculos se encuentran detallados en el Anexo I.B.2.4.

Tabla I.10. Parámetros de diseño del separador.

D_{S-I.1} (m)	0,445
H_{S-I.1} (m)	2,180
H_{Liq} (m)	0,180
V_{Liq} (L)	28,03

I.3.3.5 Depósito de CO₂ (T-I.2)

El objetivo del depósito de almacenamiento de CO₂ es tanto contener el disolvente como proporcionar a la bomba una alimentación uniforme y adecuada, evitando que se genere peligro de cavitación.

La cantidad de CO₂ que se encuentra en el sistema ha de ser suficiente como para poder garantizar un flujo continuo de disolvente y hacer frente a eventualidades. Por lo tanto, se decide que dicha cantidad sea el 50% de la necesaria para realizar un ciclo de extracción, es decir, 8669 kg de CO₂. Se almacena en estado líquido, concretamente a 273,15 K y 5,715 MPa. El depósito se diseña con el objetivo de poder contener todo el CO₂ presente en el sistema en caso de parada.

Al igual que el equipo de extracción, el depósito se encuentra a una presión elevada; por ello, se diseña con una configuración cilíndrica y cabezales semiesféricos, así como con una relación L/D igual a 5. La disposición será horizontal, debido a que su tamaño supera los 1000 galones (Walas, 2012). Los parámetros de diseño se muestran en la Tabla I.11, cuyos cálculos se detallan en el Anexo I.B.2.9.

Tabla I.11. Parámetros de diseño del depósito de CO₂.

Volumen, V_{T-I.2} (m³)	10,08
Diámetro, D_{T-I.2} (m)	1,286
Longitud, L_{T-I.2} (m)	7,715

Para minimizar la entrada de calor del exterior al depósito de CO₂, lo cual generaría peligro de evaporación del compuesto en el tanque y, por lo tanto, de cavitación de la bomba B-I.1, se coloca un aislante alrededor del equipo. El procedimiento seguido para el cálculo de

su espesor es análogo al seguido en el caso del extractor y se encuentra detallado en el Anexo I.B.2.6. Finalmente, el espesor de aislante necesario resulta en 73,32 mm.

I.3.3.6 Sistema de tuberías

Se lleva a cabo un diseño preliminar del sistema de tuberías de la instalación de extracción con CO₂ supercrítico. Este diseño consiste en realizar ciertas consideraciones sobre su longitud, material de construcción y diámetro óptimo. El objetivo es, fundamentalmente, poder realizar una estimación sobre las pérdidas por fricción que se generan como consecuencia de la circulación de los fluidos y la consecuente caída de presión; de esta manera, podrán determinarse los requerimientos energéticos de los equipos de impulsión y compresión, como las bombas.

Se han distinguido un total de 8 conexiones:

- 1. Del depósito de CO₂ a la bomba de compresión.
- 2. De la bomba de compresión al intercambiador de calor.
- 3. Del intercambiador de calor al extractor.
- 4. Del extractor a la válvula de expansión.
- 5. De la válvula de expansión al separador gas-líquido.
- 6. Del separador gas líquido al intercambiador de calor.
- 7. Del intercambiador de calor a la bomba de impulsión.
- 8. De la bomba de impulsión al depósito de CO₂.

El material de construcción es acero inoxidable, en concreto, AISI 316; la elección se justifica en el apartado donde se desarrolla el diseño mecánico (I.4). La determinación del diámetro óptimo consiste en realizar un estudio económico, de tal forma que la suma de los costes de instalación y los costes de operación sea mínima. Los costes de instalación son directamente proporcionales al diámetro, puesto que aumenta la cantidad de material utilizada; mientras que los costes de operación disminuyen al aumentar el diámetro, debido a que se originan menores pérdidas por fricción. Para un diseño preliminar, puede utilizarse la correlación que se muestra en la ecuación [I.15], válida para tuberías de acero y régimen turbulento, por lo que posteriormente se debe comprobar el número de Reynolds y verificar que es superior a 2100 (Peters, Timmerhaus y West, 2003).

$$D_{i, \text{opt}} = 0,550 \cdot Q^{0,45} \cdot \rho^{0,13} \quad [\text{I.15}]$$

Esta correlación, sin embargo, no es adecuada cuando el fluido es un vapor, lo cual ocurre en las conexiones 5 y 6. En ellas, la determinación del diámetro óptimo se obtendrá a

partir de la velocidad de circulación recomendada en función de la densidad del fluido, propuesta por Simpson (1968) (Towler y Sinnott, 2008).

En la Tabla I.12 se muestran los resultados del diseño, la cual incluye su diámetro, longitud y velocidad de circulación del CO₂. Como puede verse, en base a los cálculos realizados, se decidió que todas las tuberías tuvieran el mismo diámetro nominal y número de catálogo. Dichos cálculos y consideraciones se detallan en el Anexo I.B.2.7.

Tabla I.12. Parámetros de diseño de las tuberías.

nº	D _{nominal} (mm)	Nº de catálogo	Longitud (m)	u _{CO₂} (m/s)
1			6	0,938
2			6	0,948
3			6	1,154
4	80,00	80	6	1,154
5			6	4,692
6			12	4,692
7			12	0,956
8			12	0,956

I.3.3.7 Bombas para la compresión e impulsión del fluido (B-I.1 y B-I.2)

En la instalación se cuenta con dos bombas. Una de ellas (B-I.1) encargada de comprimir e impulsar el fluido desde el depósito de CO₂ hasta el extractor y a través del mismo. La otra (B-I.2) capaz de hacer circular el CO₂ desde el separador de nuevo hasta el depósito.

Su diseño se basa en hacer una estimación de los requerimientos energéticos, los cuales pueden calcularse haciendo uso de la ecuación [I.16]. Para ello, es necesario conocer las diferencias de presión y altura entre los equipos, así como las pérdidas de fricción que tienen lugar por la propia circulación del fluido a través de la tubería, accesorios y equipos.

$$W = g \cdot \Delta z + \frac{\Delta p}{\rho} + \frac{\Delta p_{f,total}}{\rho} \quad [I.16]$$

El requerimiento energético de la B-I.1 es muy elevado y se debe en su mayoría a la diferencia de presiones entre el depósito de CO₂ y el extractor. Tal y como se ha comprobado en la bibliografía, la elección más adecuada es una bomba centrífuga de varias etapas (Green y Southard, 2019; Rizvi, 1994; Peters, Timmerhaus y West 2003).

En el caso de la B-I.2 dichas necesidades energéticas no son especialmente elevadas; por ello, se utilizará una bomba centrífuga de una sola etapa, las más comunes en la industria química (Green y Southard 2019).

En el Anexo I.B.2.8 se detallan los cálculos del diseño, cuyos resultados se muestran en la Tabla I.13. La potencia teórica calculada (P) es adecuado sobredimensionarla en un 25%, obteniendo P_s .

Tabla I.13. Parámetros de diseño de las bombas.

	B-I.1	B-I.2
Δp_f (kPa)	0,401	17,1
Δz (m)	3,571	0
Δp (kPa)	7090	0
W_{bomba} (J/kg)	7973	49,01
H (m)	813,5	5,001
η	0,500	0,500
P (kW)	61,43	0,378
P_s (kW)	76,79	0,480

I.3.3.8 Depósito de almacenamiento de materia prima: piel de naranja (T-I.1)

Tal y como se comentó anteriormente, se cuenta con un suministro de piel de naranja cada 24h. Por ello, los depósitos de almacenamiento han de ser capaces de almacenar la cantidad de materia prima que se procesará en un día de operación. Si se opera 24 h al día con un flujo de 554,8 kg/h de piel de naranja, esto implica un consumo diario de 13.315 kg.

Se utilizarán dos depósitos de almacenamiento, los cuales se encontrarán a temperatura ambiente y a presión atmosférica. Como esto no supone una presión elevada, serán cilíndricos con cabezales planos. Al igual que el depósito de CO_2 su volumen supera los 1000 galones, por lo que se colocarán en horizontal. De nuevo, al no encontrarse a presiones elevadas, no es necesario una relación L/D muy alta; se escoge 3:1, por ser un valor comúnmente empleado (Ulrich y Vasudevan, 2004). Sus dimensiones se muestran en la Tabla I.14.

Tabla I.14. Parámetros de diseño del depósito de almacenamiento de materias primas.

Volumen, $V_{T-I.1}$ (m^3)	13,02
Diámetro, $D_{T-I.1}$ (m)	1,768
Longitud, $L_{T-I.1}$ (m)	5,304

I.4 DISEÑO MECÁNICO

El diseño mecánico se aborda para el equipo de extracción y para el depósito de CO₂. Se abarca la elección del material de construcción y el cálculo tanto del espesor de la carcasa del equipo como de la masa de acero que lo constituye.

En cuanto al material, el CO₂ puro no presenta problemas importantes de corrosión. Sin embargo, en presencia de agua, puede llegar a ser muy corrosivo. La piel de las naranjas posee cierto grado de humedad y, por lo tanto, es adecuado considerar que el CO₂ supercrítico que atraviesa el extractor es capaz de disolver una pequeña parte de esa agua. Por ello, se escoge acero inoxidable como material de construcción; en concreto, acero inoxidable AISI 316. Este acero es un acero austenítico de la serie 300, se selecciona por su elevada resistencia a la corrosión.

Los cálculos y consideraciones llevadas a cabo para la determinación del espesor y de la masa de acero se detallan en el Anexo I.B.3.

-A continuación, se muestran las hojas de especificaciones tanto del equipo de extracción como del depósito de almacenamiento. Tal y como se ha comentado anteriormente, debido a las elevadas presiones que soportan ambos equipos, poseen una forma cilíndrica con coberturas semiesféricas, puesto que se considera esta la configuración más resistente.

HOJA DE ESPECIFICACIONES DEL EQUIPO DE EXTRACCIÓN	
Equipo	E-I.1 / E-I.2
DATOS GENERALES	
Denominación del equipo	Extractor
Función	Extracción supercrítica de aceites esenciales
DATOS DE OPERACIÓN	
Presión (MPa)	12,80
Temperatura (K)	308,0
Tiempo de ciclo (h)	1,250
Lecho	Piel de naranja triturada
Disolvente de extracción	CO ₂
DATOS DE DISEÑO	
Presión (MPa)	14,27
Temperatura (K)	318
Volumen (m ³)	2,770
Diámetro (m)	0,810
Altura (m)	4,857
Material de construcción	AISI 316
Espesor (mm)	63,03
Masa de acero (kg)	7.465

HOJA DE ESPECIFICACIONES DEL DEPÓSITO DE ALMACENAMIENTO	
Equipo	T-I.2
DATOS GENERALES	
Denominación del equipo	Depósito de almacenamiento
Función	Almacenamiento y contención de CO ₂
DATOS DE OPERACIÓN	
Presión (MPa)	5,715
Temperatura (K)	273,2
Compuesto almacenado	CO ₂
Estado	Líquido
DATOS DE DISEÑO	
Presión (MPa)	6,476
Temperatura (K)	283,2
Volumen (m ³)	10,08
Diámetro (m)	1,285
Altura (m)	7,715
Material de construcción	AISI 316
Espesor (mm)	54,05
Masa de acero (kg)	16.133

I.5 ANÁLISIS DE COSTES

En este apartado se realiza una estimación de los costes de instalación de cada uno de los equipos que componen la unidad de extracción con CO₂ supercrítico. Para ello, se realizan una serie de consideraciones y aproximaciones, con el objetivo de poder utilizar las gráficas y correlaciones de costes localizadas en la bibliografía (Peters, Timmerhaus y West 2003; Towler y Sinnott 2008). El procedimiento seguido se detalla en el Anexo I.B.4. Los resultados obtenidos se muestran a continuación, en la Tabla I.15.

De la bibliografía se obtienen los costes en \$ estadounidenses. Para pasarlo a € se utiliza el cambio a día 19 de junio de 2023, el cual se corresponde con 1\$ USA = 0,92 €.

Tabla I.15. Costes de adquisición de equipos del Área I.

Equipo	Unidades	Coste por unidad (€)
Molino, M-I.1	1	35.090
Extractor, E-I.1	2	428.097
Válvula de expansión ,V-I.1	1	4.116
Separador gas-líquido,S-I.1	1	107.106
Depósito de CO ₂ , T-I.2	1	171.370
Sistema de tuberías		46.301
Bomba B-I.1	1	21.103
Bomba B-I.2	1	5.276
Motor bomba B-I.1, WB-I.1	1	22.449
Motor bomba B-I.2, WB-I.2	1	673,5
Motor molino M-I.1, WM-I.1	1	7.483
Depósito de almacenamiento de piel de naranja, T-I.1	2	16.837
COSTE TOTAL		1.310.833 €

I.6 BIBLIOGRAFÍA

ABOUDAOU, M., M. A. FERHAT, M. HAZZIT, A. ARIÑO y D. DJENANE, 2019. Solvent free-microwave green extraction of essential oil from orange peel (*Citrus sinensis* L.): effects on shelf life of flavored liquid whole eggs during storage under commercial retail conditions. En línea. *Journal of Food Measurement and Characterization*, vol. 13, nº. 4, pp. 3162–3172. ISSN 2193-4126.

ASBAHANI, A. EI, K. MILADI, W. BADRI, M. SALA, E. H. ADDI, H. CASABIANCA, A. EI MOUSADIK, D. HARTMANN, A. JILALE, F. N. R. RENAUD, y A. ELAISSARI, 2015. Essential oils: From extraction to encapsulation. En línea. *International Journal of Pharmaceutics*, vol. 483, nº. 1, pp. 220–243. ISSN 0378-5173.

BERNA, A., A. TÁRREGA, M. BLASCO y S. SUBIRATS, 2000. Supercritical CO₂ extraction of essential oil from orange peel; effect of the height of the bed. En línea. *The Journal of Supercritical Fluids*, vol. 18, nº. 3, pp. 227–237. ISSN 0896-8446.

BOUKROUFA, M., C. BOUTEKEDJIRET, L. PETIGNY, N. RAKOTOMANOMANA y F. CHEMAT, 2015. Bio-refinery of orange peels waste: A new concept based on integrated green and solvent free extraction processes using ultrasound and microwave techniques to obtain essential oil, polyphenols and pectin. En línea. *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 24, pp. 72–79. ISSN 1350-4177.

BOUSBIA, N., M. A. VIAN, M. A. FERHAT, B. Y. MEKLATI y F. CHEMAT, 2009. A new process for extraction of essential oil from Citrus peels: Microwave hydrodiffusion and gravity. En línea. *Journal of Food Engineering*, vol. 90, nº. 3, pp. 409–413. ISSN 0021-9673.

CLAVIER, J.-Y. y M. PERRUT, 2004. *Supercritical Fluid Technology for Drug Product Development*. CRC Press. ISBN 9780429215407.

DIMA, C. y S. DIMA, 2015. Essential oils in foods: extraction, stabilization, and toxicity. En línea. *Current Opinion in Food Science*, vol. 5, pp. 29–35. ISSN 22147993.

FERHAT, M., M. BOUKHATEM, M. HAZZIT, B. MEKLATI y F. CHEMAT, 2016 Cold Pressing, Hydrodistillation and Microwave Dry Distillation of Citrus Essential Oil from Algeria: A Comparative Study. En línea. *Electronic Journal of Biology*, Vol. S1, pp. 30–41. ISSN 1870-3122.

GOTO, M., B. C. ROY y T. HIROSE, 1999. Shrinking-core leaching model for supercritical-fluid extraction. En línea. *The Journal of Supercritical Fluids*, vol. 9, nº. 2, pp. 128–133. ISSN 1881-1299.

GREEN, Don W. y M. Z. SOUTHARD, 2019. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. Mc Graw Hill. ISBN 9780071834094.

HUANG, Z., X. SHI y W. JIANG, 2012. Theoretical models for supercritical fluid extraction. En línea. *Journal of Chromatography A*, vol. 1250, pp. 2–26. ISSN 0021-9673.

JOHNSTON, K. P. y J. M. L. PENNINGER, 1989. *Supercritical Fluid Science and Technology: ACS Symposium Series 406*. American Chemical Society. ISBN 9780841216785.

MARTÍNEZ, J., P. T. V. ROSA y M. A. A. MEIRELES, M., 2007. Extraction of Clove and Vetiver Oils with Supercritical Carbon Dioxide: Modeling and Simulation. En línea. *The Open Chemical Engineering Journal*, vol. 1, nº. 1, pp. 1-7. ISSN 1874-1231.

MEZZOMO, N., J. MARTÍNEZ, y S. R. S. FERREIRA, 2009. Supercritical fluid extraction of peach (*Prunus persica*) almond oil: Kinetics, mathematical modeling and scale-up. En línea *The Journal of Supercritical Fluids*, vol. 51, nº. 1, pp. 10–16. ISSN 0896-8446.

MIRA, B., M. BLASCO, A. BERNA y S. SUBIRATS, 1999. Supercritical CO₂ extraction of essential oil from orange peel. Effect of operation conditions on the extract composition. En línea. *The Journal of Supercritical Fluids*, vol. 14, nº 2, pp. 95–104. ISSN 0896-8446.

MIRA, B., M. BLASCO, S. SUBIRATS y A. BERNA, 1996. Supercritical CO₂ extraction of essential oils from orange peel. En línea. *The Journal of Supercritical Fluids*, vol. 9, nº. 4, pp. 238–243. ISSN 0896-8446

NAIK, S. N., H. LENTZ, y R. C. MAHESHWARI, 1989. Extraction of perfumes and flavours from plant materials with liquid carbon dioxide under liquid-vapor equilibrium conditions. En línea. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 49, pp. 115–126. ISSN 0378-3812.

NGUYEN, K., P. y S. J. S. BARTON, 1991. Supercritical carbon dioxide extraction of vanilla. En línea. *The Journal of Supercritical Fluids*, vol. 4, nº. 1, pp. 40–46. ISSN 0186-6036.

PALMER, M. V. y S. S. T. TING, 1995. Applications for supercritical fluid technology in food processing. En línea. *Food Chemistry*, vol. 52, nº. 4, pp. 345–352. ISSN 0308-8146.

PETERS, M. S., K. D. TIMMERHAUS y R. E. WEST, 2003. *Plant design and economics for chemical engineers*. McGraw-Hill. ISBN 9780072392661.

QADARIYAH, L., P. D. AMELIA, C. ADMIRALIA, D. S. BHUANA, y M. MAHFUD, 2017. Extraction of orange peel's essential oil by solvent-free microwave extraction. En línea. *International Seminar on Fundamental and Application of Chemical Engineering, AIP Conference Proceeding*, vol. 1840, nº. 1, p. 100008.

RAZOLA-DÍAZ, M. C., E. J. GUERRA-HERNÁNDEZ, B. GARCÍA-VILLANOVA, V. VERARDO, 2021. Recent developments in extraction and encapsulation techniques of orange essential oil. En línea *Food Chemistry*, Vol. 354, p. 129575. ISSN 0308-8146

RIZVI, S. S. H, 1994. *Supercritical Fluid Processing of Food and Biomaterials*. Blackie Academic & Professional.

SIDDIQUI, S. A., M. J. PAHMEYER, E. ASSADPOUR y S. M. JAFARI, 2022. Extraction and purification of d-limonene from orange peel wastes: Recent advances. En línea. *Industrial Crops and Products*, vol. 177, p. 114484. ISSN 0926-6690.

SOVOVÁ, H. Rate of the vegetable oil extraction with supercritical CO₂, 1994. Modelling of extraction curves. En línea. *Chemical Engineering Science*, vol. 49, nº. 3, pp. 409–414. ISSN 0009-2509.

TEIGISEROVA, D. A., L. TIRUTA-BARNA, A. AHMADI, L. HAMELIN, y M. THOMSEN, 2021. A step closer to circular bioeconomy for citrus peel waste: A review of yields and technologies for sustainable management of essential oils. En línea. *Journal of Environmental Management*, vol. 280, p. 111832. ISSN 0301-4797.

TONGNUANCHAN, P. y S. BENJAKUL, 2014. Essential Oils: Extraction, Bioactivities, and Their Uses for Food Preservation. *Journal of Food Science*, vol. 79, nº. 7, p. R1231–R1249. ISSN 1750-3841.

TOWLER, G. P. y R. K. SINNOTT, 2008. *Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design*. Elsevier Science & Technology Books. ISBN 9780750684231.

TREYBAL, R. E, 1968. *Mass-transfer Operations*. McGraw-Hill.

ULRICH, G. D. y P. T. VASUDEVAN, 2004. *Chemical Engineering Process Design and Economics: A Practical Guide*. Process Publishing. ISBN 970876823

VERESS, T., 1994. Sample preparation by supercritical fluid extraction for quantification a model based on the diffusion-layer theory for determination of extraction time. En línea. *Journal of Chromatography A.*, vol. 668, nº. 2, p. 285–291. ISSN 0021-9673.

WALAS, Stanley M., 2012. *Chemical process equipment: selection and design*. Butterworth-Heinemann. ISBN 9780123969590.

I.7 ANEXO

I.A. SÍMBOLOS

- A_i	Área superficial del equipo i
- a_0	Área superficial de partícula
- b	Pendiente
- C_v	Coeficiente de orificio
- c_v	Calor específico a volumen constante
- d_p	Diámetro de partícula
- D_i	Diámetro de equipo i
- $D_{i, \text{opt}}$	Diámetro interno óptimo
- $D_{i, \text{nominal}}$	Diámetro interno nominal
- e	Rendimiento de la extracción
- E_j	Eficiencia de juntas
- EO	Aceites esenciales
- f	Factor de fricción
- G_0	$v_0 \cdot \rho$
- H	Altura del lecho de extracción
- H_i	Altura del equipo i
- k_f	Coeficiente de transferencia de materia de la fase fluida
- k_s	Coeficiente de transferencia de materia de la fase sólida
- L	Longitud
- M_w	Masa molecular
- m	Masa
- M	Tasa de extracción
- P	Potencia
- p_c	Presión crítica
- q	Kg de CO_2 consumido por kg de lecho
- Q	Flujo volumétrico
- r	Fracción de células rotas
- S	Tensión máxima de trabajo
- T	Temperatura
- t_c	Temperatura crítica
- t	Espesor
- t	Tiempo
- t_{CER}	Tiempo al que finaliza el periodo CER
- t_{FER}	Tiempo al que finaliza el periodo FER
- u_t	Velocidad de asentamiento de las gotas de líquido en el separador gas-líquido

- u_s	Velocidad de asentamiento a considerar cuando no hay nebulizador
- V_i	Volumen del equipo i
- v	Velocidad lineal
- W	Trabajo
- W	Parámetro de la operación de extracción relacionado con k_s
- w	Flujo másico
- x	Concentración de soluto en la matriz vegetal a un tiempo t y posición z
- x_0	Concentración total de soluto en la matriz vegetal
- x_i	Concentración de soluto en las células rotas de la matriz vegetal
- y^*	Concentración de soluto en el equilibrio
- z	Posición axial en el lecho de sólidos
- z	Factor de compresibilidad
- Z	Parámetro de la operación de extracción relacionado con k_f
- ρ	Densidad
- μ	Viscosidad
- ϵ	Porosidad

I.B. CÁLCULOS

I.B.1. Determinación del mecanismo limitante de transferencia de materia

Los parámetros del proceso necesarios para los cálculos se muestran a continuación.

t_{CER} (h)	0,17
w_{CO_2} (kg/h)	13.870
$m_{sólidos}$ (kg)	693,5

En primer lugar, se calcula la masa de CO_2 consumido en el periodo CER.

$$m_{CO_2} = w_{CO_2} \cdot t_{CER}$$

$$m_{CO_2} = 693,5 \frac{kg}{h} \cdot 0,17h$$

$$m_{CO_2} = 2.341 \text{ kg}$$

Posteriormente, se calcula la cantidad de aceite esencial extraído en este mismo periodo, $m_{EO,CER}$. Para ello, se necesita conocer la tasa de extracción, M (kg/h); esta se puede calcular conociendo la pendiente de la curva de extracción en el periodo CER, b_{CER} (kg/kg h) y la masa del lecho, $m_{sólidos}$ (kg).

$$M = b_{CER} \cdot m_{sólidos}$$

$$M = 0,112 \frac{kg \text{ EO}}{kg \text{ sólidos} \cdot h} \cdot 693,5 \text{ kg sólidos}$$

$$M = 77,87 \frac{kg}{h} \text{ EO}$$

$$m_{EO,CER} = M \cdot t_{CER}$$

$$m_{EO,CER} = 77,87 \frac{kg}{h} \text{ EO} \cdot 0,17 \text{ h}$$

$$m_{EO,CER} = 13,15 \text{ kg EO}$$

Finalmente, conocida tanto la cantidad de aceite esencial extraído como la cantidad de CO_2 utilizado, puede calcularse la concentración en porcentaje en peso de aceite esencial en el CO_2 a la salida del extractor. Como esta concentración es menor que la concentración de equilibrio (0,008), es adecuado considerar que la solubilidad no es la etapa controlante del proceso de transferencia de materia.

$$y_{EO} = \frac{13,15}{2.341} = 0,0056 < 0,0080$$

I.B.2. Diseño y dimensionado de equipos

I.B.2.1 Molino

La piel de las naranjas se considera que pertenecen a la clasificación de sólidos orgánicos. En la Fig. I.13 se observa que para este tipo de material se recomiendan equipos de molienda de la categoría universal, así como molinos de bolas.

Finalmente, se escoge el molino de martillos (universal), puesto que, tal y como se puede ver en la Fig. I.14, el diámetro máximo de partícula permitido para la alimentación son 4 cm, mientras que para el molino de bolas son 0,5 cm. Se desconoce el estado en el que la piel de las naranjas llega a la instalación, pero se supone que posiblemente sea en un tamaño superior a 0,5 cm e inferior a 4 cm. También puede observarse en esta misma figura que este tipo de molino es adecuado para sólidos húmedos y blandos, como es el caso.

En el diseño se abarca la determinación de la potencia necesaria para reducir el tamaño de partícula. Se sigue el procedimiento descrito en la Fig. I.14 para molinos universales.

Estos equipos permiten un *ratio* de reducción máximo de 100; pudiendo llegar a obtenerse partículas de menos de 1 mm. Se considera que la piel de las naranjas posee un tamaño inicial de 4 cm y se calcula la potencia requerida para un diámetro final de 1mm; sin embargo, para la extracción, se considera un diámetro de 1,5 mm, contemplando de esta forma una eficacia real menor que la teórica.

A continuación, se muestran los datos necesarios para aplicar la ecuación [I.17].

$d_{p,i}$ (m)	0,04
$d_{p,f}$ (m)	0,001
w (kg/h)	555

$$P = 40 \cdot w \cdot \ln(R) \quad [I.17]$$

$$R = \frac{d_{p,i}}{d_{p,f}} = \frac{0,04}{0,001} = 40$$

$$P = 40 \cdot 555 \cdot \ln(40)$$

P = 22,74 kW

TABLE 4.5b
Typical materials processed in different
types of crushing and grinding equipment (continued)

Typical Materials Processed*	Equipment type						Cutter (chipper, dicer)
	Grinders						
	Media mills					Fluid energy	
	Tumbling mill	Tumbling ball mill (pebble)	Vibrating ball mill	Stirred ball mill (bead, hand)	Universal (hammer, cage, pin)		
Biochemical cell distribution				X			
Bone					X		
Carbon black				X	X	X	
Cereals and grains					X		
Cement	X	X	X				
Chalk	X	X					
Charcoal					X	X	
Clay				X		X	
Coal	X	X	X	X	X		
Coke	X	X	X		X		
Feldspar	X	X	X				
Filter cake					X		
Fluorspar	X	X					
Foods				X	X		
Fuller's earth					X		
Graphite	X	X	X			X	
Gypsum	X	X	X	X	X		X
Leather					X		
Lime	X	X	X		X		
Limestone	X	X	X	X	X		
Marble		X			X		
Mica						X	
Minerals and ores	X	X	X	X			X
Organic solids				X	X	X	
Pharmaceuticals				X	X	X	
Phosphates	X	X	X			X	
Pigments	X	X		X	X	X	X
Plastics				X	X	X	
Refractories	X	X	X	X	X	X	X
Resins				X	X	X	X
Rubber				X	X		X
Salts					X		
Scrap iron							
Slags	X	X	X	X		X	
Soaps					X		
Soapstone				X			
Silica	X	X	X			X	
Sodium bicarbonate					X		X
Solid waste (municipal)							
Sulfur						X	
Talc				X	X	X	
Wood					X		X

Fig. I.13. Tabla para la selección del equipo de trituración o molienda (Ulrich y Vasudevan, 2004).

TABLE 4.5a
Criteria and data for the rapid design
of crushing and grinding equipment (continued)

	Equipment type						
	Grinders						Cutter
	Media mills				Universal (hammer, cage, pin)	Fluid energy	
Tumbling rod mill	Tumbling ball mill (pebble)	Vibrating ball mill	Stirred ball mill (bead, hand)				
Maximum feed particle or lump diameter, D (m)	0.02	0.02	0.03	0.005	0.04	0.01	0.5
Typical maximum reduction ratio, R	15	100	30	30	100	2000	50
Maximum capacity, m (kg/s)	50	15	5	5	8	1	50
<i>Performance Characteristics</i>							
Narrowness of size distribution	B	A	A	A	B	A	A
<i>Compatibility</i>							
Hard solids	A	A	A	D	X	A	X
Abrasive materials	A	A	A	C	X	A	X
Sticky or cohesive solids	B	D	D	C	A	D	A
Soft materials	C	D	E	A	A	D	A
Resilient substances	E	E	E	E	A	E	A
<i>Suitability</i>							
Wet Grinding	A	A	A	A	A	X	E
Controlled atmospheres	C	C	A	A	A	A	E
Heating or cooling	A	A	A	A	A	A	E
Other types of simultaneous processing	Drying, dispersing	Drying, dispersing	Dispersing	Cell disruption, dispersing	Classifying, delumping, dispersing, drying, mixing, shredding	Classifying	
Crushing and grinding size (arrows indicate grinding range)							
<i>Particle diameter, D_p</i>							
	E	E	X	X	X	X	X
Coarse crushing	C	C	X	X	X	X	A
Intermediate crushing	A	A	X	B	B	D	A
Coarse grinding	A	A	E	E	A	B	A
Fine grinding	D	A	B	B	A	A	D
Extra-fine grinding	E	B	A	A	D	A	X
Ultra-fine grinding	X	C ^d	B	B	X	B	X
	X	X	C ^d	C ^d	X	X	X
<i>Power Consumption, P (KW)^a</i>							
Hard materials (8–10 Moh)	$(0.007rh/D_p)^e$	$(0.008rh/D_p)^e$	$(40rh/D_p^{0.3})^f$	$(40rh/D_p^{0.3})^f$		$(1.0 \ln R)^g$	
Medium (4–7 Moh)	$(0.007rh/D_p)^e$	$(0.008rh/D_p)^e$	$(40rh/D_p^{0.3})^f$	$(40rh/D_p^{0.3})^f$		$(1.0 \ln R)^g$	
Soft (1–3 Moh)					$40rh \ln R$		$(100 rh)^g$
Leathery, tenacious materials					$40rh \ln R$		$(500 rh)^g$

Fig. I.14. Tabla guía para el diseño preliminar de distintos equipos de molienda y triturado (Ulrich y Vasudevan, 2004).

I.B.2.2. *Extractor*Dimensiones

El volumen del equipo de extracción se calcula en base al volumen utilizado en los estudios experimentales. La ecuación [I.18] puede utilizarse para calcular volumen de un cilindro con coberturas semiesféricas; conocido el volumen y la relación H/D, puede despejarse el diámetro del extractor. Los datos de diseño se muestran en la Tabla I.16.

Para realizar el cambio de escala se aplicó el criterio discutido en apartados anteriores, el cual consistía en mantener la relación $[m_{\text{sólidos}}/w_{\text{CO}_2}]$. Por lo tanto, únicamente se modifica la masa de sólidos y el caudal de CO_2 , el resto de parámetros permanecen constantes: porosidad del lecho, tiempo de residencia del CO_2 y relación $V_{\text{lecho}}/V_{\text{extractor}}$. Esto permite determinar el volumen del extractor.

Tabla I.16. Datos de diseño para el equipo de extracción.

Escala de laboratorio		Escala industrial	
<i>Lecho de sólidos</i>			
$m_{\text{sólidos}}$ (kg)	0,125	$m_{\text{sólidos}}$ (kg)	693,5
ρ_s (kg/m ³)	568,0	ρ_s (kg/m ³)	568,0
$V_{\text{sólido}}$ (m ³)	$2,20 \cdot 10^{-4}$	$V_{\text{sólido}}$ (m ³)	1,221
V_{lecho} (m ³)	$3,00 \cdot 10^{-4}$	V_{lecho} (m ³)	1,664
ϵ	0,266	ϵ	0,266
<i>Disolvente</i>			
w_{CO_2} (kg/h)	2,500	w_{CO_2} (kg/h)	13.870
tr_{CO_2}	3,761	tr_{CO_2}	3,761
<i>Equipo</i>			
$V_{\text{extractor}}$ (m ³)	$5,00 \cdot 10^{-4}$	$V_{\text{extractor}}$ (m ³)	2,77
$V_{\text{lecho}} / V_{\text{extractor}}$	0,600	$V_{\text{lecho}} / V_{\text{extractor}}$	0,600

Una vez determinado el volumen, se calculan sus dimensiones despejando el diámetro de la ecuación [I.19]. Los resultados se muestran en la Tabla I.17.

$$V_{\text{TOTAL}} = \pi * R^2 * H + \frac{4}{3} * \pi * R^3 \quad [\text{I.18}]$$

$$V_{\text{TOTAL}} = \pi * \left(\frac{D}{2}\right)^2 * 5D + \frac{4}{3} * \pi * \left(\frac{D}{2}\right)^3 \quad [\text{I.19}]$$

Tabla I.17. Dimensionado del equipo de extracción (E-I.1/E.I.2).

H_{cilindro}/D	5	H_{cilindro} (m)	4,05
D_{E-I.1/E.I.2} (m)	0,810	H_{E-I.1/E.I.2} (m)	4,857

Caída de presión

Para calcular la caída de presión del lecho pueden utilizarse las ecuaciones [I.20], [I.21] y [I.22]; el uso de una u otra dependerá del régimen de circulación del fluido.

$$\frac{d_p G_0}{\mu(1-\varepsilon)} < 10 \quad \frac{\Delta P}{L} = 150 \left(\frac{\mu v_0}{D_p^2} \right) \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \quad [I.20]$$

$$\frac{D_p G_0}{\mu(1-\varepsilon)} > 1.000 \quad \frac{\Delta P}{L} = \frac{7}{4} \left(\frac{\rho v_0^2}{D_p} \right) \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \quad [I.21]$$

$$\left(\frac{\Delta p \cdot \rho}{G_0^2} \right) \left(\frac{d_p}{L} \right) \left(\frac{\varepsilon^3}{1-\varepsilon} \right) = 150 \left(\frac{1-\varepsilon}{\frac{d_p G_0}{\mu}} \right) + \frac{7}{4} \quad [I.22]$$

En primer lugar, se aplica la ecuación [I.23] para determinar en qué régimen se encuentra circulando el CO₂. Tal y como puede verse, dicho régimen se corresponde con régimen de transición; por lo tanto, se empleará la ecuación [I.22], también conocida como ecuación de Ergun. Los datos necesarios para los cálculos se muestran a continuación.

S_e (m²)	0,515
v₀ (m/s)	9,55 · 10 ⁻³
G₀ (kg/m²·s)	3,980
d_{p,lecho} (m)	0,0015
μ_{CO2} (Pa·s)	6,81 · 10 ⁻⁵
L_{lecho} (m)	3,233
ε	0,266

$$\frac{d_{p,lecho} \cdot G_0}{\mu \cdot (1-\varepsilon)} = 119,52 \quad [I.23]$$

10 < 119,52 < 1000 → Régimen de transición → Ecuación de Ergun

Δp = 5080 Pa

Aislante

Se coloca un aislante alrededor del equipo con el objetivo de poder considerar la operación de extracción isotérmica. El diseño consiste en seleccionar un material aislante y calcular el espesor requerido.

Se ha encontrado que un posible material para el aislamiento de equipos industriales es la lana mineral. En el catálogo de elementos constructivos del CTE puede encontrarse un listado con diferentes materiales aislantes y sus respectivas conductividades térmicas, entre los que se encuentra la lana mineral (Fig. I.15).

Para el cálculo del espesor es necesario conocer el flujo de calor máximo que puede tener lugar a través del equipo. Se decide que la temperatura del CO₂ en el interior del equipo varíe como máximo 0,5 °C, y de esta manera poder considerarla constante. Conociendo la variación de temperatura, es posible calcular la cantidad de calor (kJ) que es necesario aportar o retirar (dependiendo de la temperatura exterior), utilizando para ello la ecuación [I.24]; sabiendo, además, el tiempo de residencia del CO₂ en el depósito, es posible obtener el flujo el flujo de calor (kJ/s), a través de la ecuación [I.25].

$$\Delta H \text{ (kJ)} = \int_{T_1}^{T_2} c_p dT \quad [I.24]$$

$$Q \text{ (kW)} = \frac{\Delta H}{t_{r,CO_2}} \quad [I.25]$$

La ecuación [I.26] define el flujo de transmisión de calor en función del área de transmisión (A), el gradiente de temperaturas existente entre los puntos considerados (ΔT) y el coeficiente global de resistencia a la transmisión de calor (U). En este caso puede considerarse un flujo de calor a través de paredes cilíndricas, de forma que es posible calcular U mediante la ecuación [I.27].

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T \quad [I.26]$$

$$U = \left[\frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{\lambda_{SS316}} \cdot \ln \left(\frac{r_1 + t}{r_1} \right) + \frac{1}{\lambda_a} \cdot \ln \left(\frac{r_1 + t + t_a}{r_1 + t} \right) \right) \right]^{-1} \quad [I.27]$$

El material aislante utilizado y su espesor modifican U. Una vez seleccionado el material, su conductividad térmica (λ_a) está definida, lo que implica que la única incógnita es su espesor (t_a); este último ha de tomar un valor de manera que se cumpla la expresión [I.28].

$$\frac{\Delta H}{t_{r,CO_2}} = U \cdot A \cdot \Delta T \quad [I.28]$$

Para definir el ΔT se contempla el peor de los casos, el cual tras realizar una búsqueda sobre las temperaturas máxima y mínima en la Región de Murcia se considera que tiene lugar cuando hay una temperatura exterior de 15 °C. Los resultados de los cálculos se muestran en la Tabla I.18.

Tabla I.18. Cálculo del espesor del aislante.

ΔH (kJ)	370	Q (W)	164,0
t_{r,CO_2} (s)	226		
A (m ²)	12,36	U (W/m ² ·K)	7,376
ΔT	17		
$\lambda_{AISI 316}$ (W/m·K)	17	$t_{AISI 316}$ (mm)	63,03
λ_a (W/m·K)	0,050	t_a (mm)	18,24

Aislantes térmicos				
Material o producto	HE			
	ρ kg / m ³	λ W / m·K	c_p J / kg·K	μ
Poliestireno Expandido (EPS)	-	0,039 ⁽¹⁾ – 0,029	-	20 - 100
Poliestireno Expandido Elasticado (EEPS)	-	0,046 – 0,029	-	
Poliestireno Extruido (XPS)				
Expandido con dióxido de carbono CO ₂	-	0,039 - 0,033	-	100 - 220
Expandido con hidrofluorcarbonos HFC	-	0,039 - 0,029	-	100 - 220
Lana mineral (MW)	-	0,050 - 0,031	-	1
Espuma rígida de Poliuretano (PUR) o poliisocianurato (PIR)				
Proyección con Hidrofluorcarbono HFC	30 - 60	0,028	-	60 - 150
Proyección con dióxido de carbono CO ₂ celda cerrada	40 - 60	0,035 - 0,032	-	100 - 150
Plancha con Hidrofluorcarbono HFC o Hidrocarburo (pentano) y revestimiento permeable a los gases.	-	0,030 - 0,027	-	60 - 150
Plancha con Hidrofluorcarbono HFC o Hidrocarburo (pentano) y revestimiento impermeable a los gases.	-	0,025 - 0,024	-	∞
Inyección en tabiquería con dióxido de carbono CO ₂	15 - 20	0,040	-	≤ 20
Otros materiales aislantes)				
Corcho expandido (ICB) ⁽²⁾				
Arcilla Expandida ⁽³⁾	325 - 750	0,148 – 0,095	-	1
Panel de perlita expandida (EPB) (>80%)	140 -240	0,062	-	5
Panel de vidrio celular (CG)	100 -150	0,050	-	∞
Guata o fieltro de poliéster	20 y 50	0,038 – 0,033	-	
Espuma de polietileno reticular	-	0,072 – 0,038	-	
Espuma de polietileno no reticulado	-	0,042 – 0,035	-	

⁽¹⁾ Valor recomendado. Existen tipos de poliestireno expandido con una conductividad de hasta 0,046 W/mK

⁽²⁾ Vease el apartado 3.3 Maderas

⁽³⁾ Las características de la arcilla expandida corresponden únicamente al árido suelto

Fig. I.15. Listado de materiales aislantes térmicos recogido en el catálogo de elementos constructivos del CTE.

I.B.2.3 Válvula de expansión

Para el diseño de la válvula de expansión se ha de calcular su coeficiente de orificio. Se recurre a la ecuación [I.12], presentada en el apartado I.3.3.3 y mostrada a continuación.

$$w = 94,8 \cdot C_v \cdot p_e \cdot Y \cdot \sqrt{\frac{X \cdot M_w}{T_e \cdot z}} \quad [I.12]$$

Donde:

$$X = \frac{(p_e - p_s)}{p_s} \quad [I.29]$$

$$Y = 1 - \frac{1,4 \cdot X}{3 \cdot x_T \cdot \gamma} \quad [I.30]$$

Los datos necesarios para los cálculos se muestran a continuación.

p_e (bar)	128,0	c_{v,1} (J/kg·K)	940,9
p_s (bar)	57,15	c_{v,2} (J/kg·K)	1066
T_e (K)	308	M_w (g/mol)	44,01
z	0,57	w (kg/h)	13870
x_T	0,5		

El factor de compresibilidad se ha obtenido recurriendo a la Fig. I.16, a partir de la temperatura y presión reducidas. Por otro lado, x_T es un factor que depende del modelo de flujo y de la geometría de la válvula; para válvulas convencionales suele tomarse un valor de 0,5. Finalmente, el parámetro gamma (γ) de la ecuación [I.30] se corresponde con la relación de los calores específicos de la corriente de entrada y salida de la válvula (Green y Southard, 2019).

$$\gamma = \frac{c_{v,1}}{c_{v,2}} = 0,883$$

Como resultado, se obtiene:

$$C_v = \frac{w}{94,8 \cdot p_1 \cdot Y \cdot \sqrt{\frac{X \cdot M_w}{T_e \cdot z}}}$$

C_v = 7,356

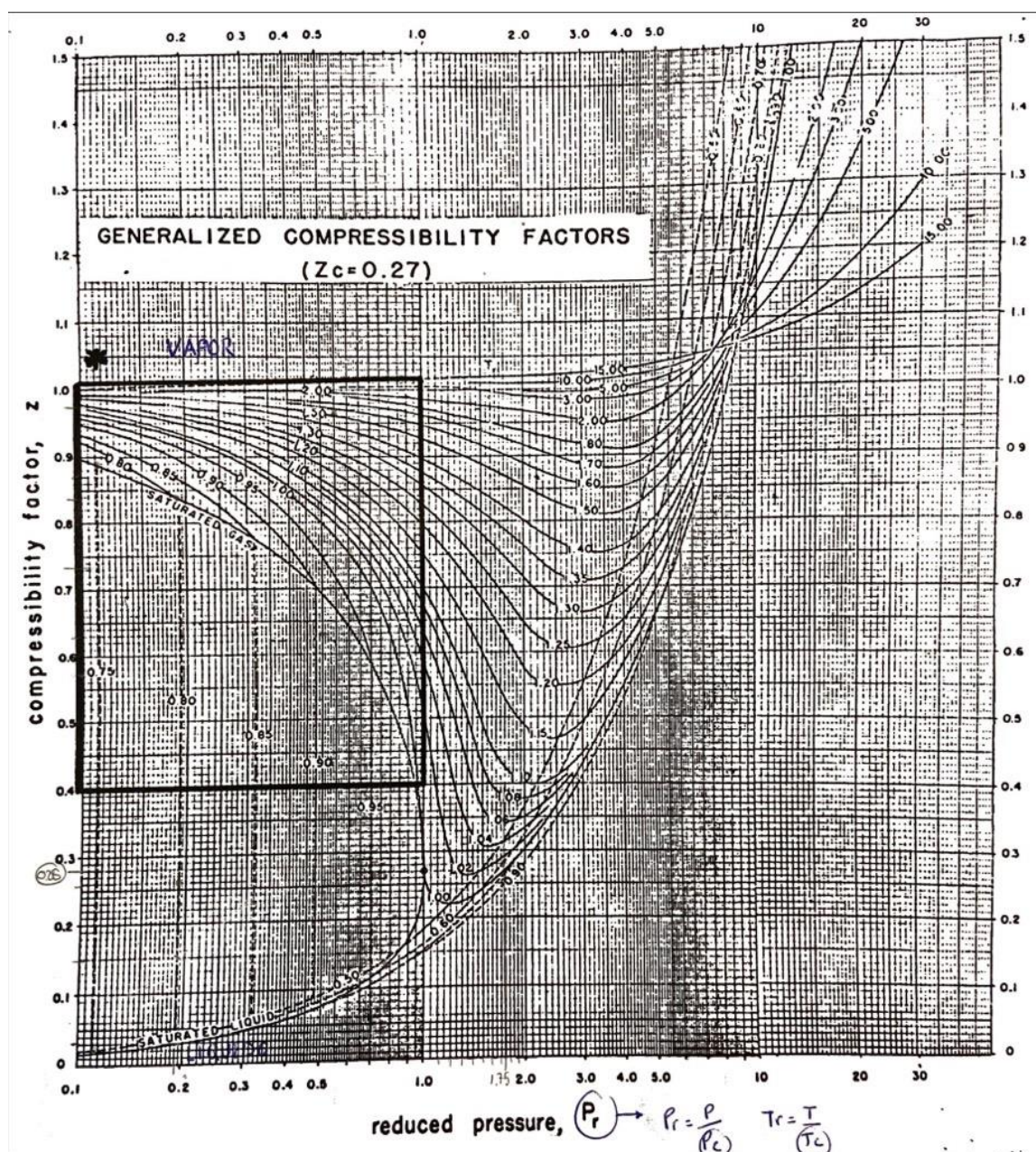


Fig. I.16. Gráfica para hallar el factor de compresibilidad.

I.B.2.4 Separador gas-líquido

Para dimensionar el separador gas-líquido se calcula primero la velocidad de asentamiento de las gotas del líquido con la ecuación [I.13]; y, posteriormente, se determina el diámetro mínimo que ha de tener el separador, utilizando para ello la ecuación [I.14]. Puesto que se ha decidido utilizar un desnebulizador, $u_s = u_t$.

$$u_t = 0,07 \cdot \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V}} \quad [I.13]$$

$$D = \sqrt{\left(\frac{4 \cdot Q_v}{\pi u_s}\right)} \quad [I.14]$$

Los datos necesarios para los cálculos se muestran a continuación.

ρ_L (kg/m ³)	841,0
ρ_v (kg/m ³)	192,7
Q_v (m ³ /s)	0,020

Se obtiene que la velocidad de asentamiento de las gotas del líquido es 0,128 m/s. El diámetro necesario para que la velocidad del gas permita dicho asentamiento resulta en 0,45 m.

En la Fig. I.17 se muestran las relaciones altura/diámetro recomendadas en la bibliografía para un separador vertical, las cuales permiten completar el dimensionado del equipo. La altura del líquido se calcula a partir de la superficie transversal del separador y del volumen de líquido retenido en el mismo; este último proporcional al tiempo de residencia establecido, en este caso 1h.

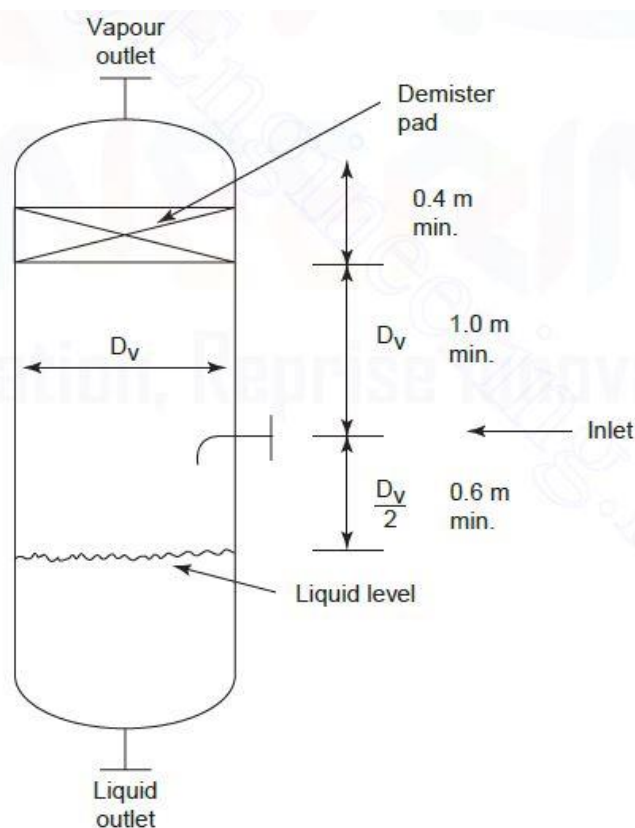


Fig. I.17. Esquema de un separador vertical con las relaciones altura/diámetro recomendadas. Ilustración obtenida de Towler y Sinnott (2008).

Para determinar el volumen del líquido, se ha de conocer el caudal. Puesto que se sabe por los balances de materia que el flujo másico de limoneno arrastrado por el CO₂ es 23,57 kg/h y que su densidad se aproxima a 841,0 kg/m³, puede calcularse el flujo volumétrico de limoneno: 0,028 m³/h. Las dimensiones del separador resultantes de los cálculos se muestran en la Tabla I.19.

Tabla I.19. Dimensionado del separador gas-líquido (S-I.1).

D_{S-I.1} (m)	0,450	H_{i,F-dn} (m)	1,000
V_{Liq} (m³)	0,028	H_{dn-o,G} (m)	0,400
H_{Liq} (m)	0,180	H_{S-I.1} (m)	2,180
H_{L-i,F} (m)	0,600	V_{S-I.1} (m³)	0,339

I.B.2.6 Depósito de CO₂

Dimensiones

La configuración elegida para el del depósito de CO₂ es la misma que para el equipo de extracción. Por lo que las ecuaciones que relacionan el volumen con su altura y diámetro son las mismas.

$$V_{\text{TOTAL}} = \pi * R^2 * H + \frac{4}{3} * \pi * R^2 \quad [I.18]$$

$$V_{\text{TOTAL}} = \pi * \left(\frac{D}{2}\right)^2 * 5D + \frac{4}{3} * \pi * \left(\frac{D}{2}\right)^2 \quad [I.19]$$

La cantidad de CO₂ presente en el sistema son 8.669 kg, por lo que el depósito tiene que estar capacitado para albergar dicha cantidad en caso de que la instalación no se encuentre en operación. Las condiciones en las que se encuentra el CO₂ en el depósito son 273,15 K y 5,715 MPa, a las cuales posee una densidad de 946,1 kg/m³. Por lo tanto, el volumen de CO₂ que deberá poder contener el depósito son 9,163 m³.

Para depósitos que superen los 500 galones, es decir, los 1893 L, se recomienda dejar un 10% del volumen total del depósito libre (Walas, 2012). Por lo que el volumen total serán 10,08 m³.

Conocido el volumen y sabiendo que la relación L/D es 5:1, puede despejarse el diámetro de la ecuación [I.19]. Esta relación se aplica a la altura del cilindro, por lo que la altura total del depósito será L_{cilindro} + D_{T-I.1}. Los resultados de los cálculos se muestran en la Tabla I.20.

Tabla I.20. Dimensionado del depósito de CO₂.

V_{T-1.2} (m³)	10,08	L_{cilindro} (m)	6,429
D_{T-1.2} (m³)	1,286	L_{T-1.2} (m)	7,715

Aislante

Para el cálculo del espesor del aislante en el depósito de CO₂ se sigue el mismo procedimiento que el desarrollado en apartado I.B.2.2. del Anexo para el equipo de extracción. En este caso, lo que interesa es que la temperatura en el interior del depósito aumente lo menos posible de los 0 °C, por lo que el peor caso se considera que tiene lugar cuando la temperatura exterior son 40 °C. Los resultados se muestran en la Tabla I.21.

Tabla I.21. Cálculo del aislante para el depósito de CO₂.

ΔH (kJ)	889	Q (W)	0,395
t_{r,CO2} (s)	2.250		
A (m²)	31,17	U (W/m²·K)	0,317
ΔT	40		
λ_{AISI 316} (W/m·K)	17	t_{AISI 316} (mm)	54,05
λ_a (W/m·K)	0,050	t_a (mm)	73,32

I.B.2.7 Sistema de tuberías

Se distinguen 8 conexiones y, para cada una de ellas, se calcula el diámetro óptimo utilizando la ecuación [I.15]; exceptuando las tuberías 5 y 6, puesto que el CO₂ se encuentra en estado gaseoso y la ecuación propuesta no es adecuada para fluidos en fase vapor. En ese caso se recurre a la tabla de la Fig. I.18, y, a partir de la velocidad y el flujo volumétrico, se calcula el diámetro óptimo.

$$D_{i, \text{opt}} = 0,550 \cdot Q^{0,45} \cdot \rho^{0,13} \quad [\text{I.15}]$$

Fluid Density kg/m ³	Velocity m/s
1600	2.4
800	3.0
160	4.9
16	9.4
0.16	18.0
0.016	34.0

Fig. I.18. Velocidad de circulación recomendada en función de la densidad del fluido, propuesta por Simpson (1968).

El flujo másico de CO₂ que circula por el sistema es constante e igual a 13.870 kg/h. Para calcular el flujo volumétrico es necesario conocer la densidad del fluido, la cual varía en función de la presión y temperatura. En la Tabla I.22 se muestra las condiciones del fluido en cada una de las conexiones.

Tabla I.22. Condiciones del fluido en cada una de las conexiones.

nº	De	a	P (MPa)	T (K)	ρ (kg/m ³)	μ (Pa·s)	Q (m ³ /h)
1	T-I.1	B-I.1	5,715	273,2	946,1	1,05·10 ⁻⁴	14,66
2	B-I.1	IC-I.1	12,80	278,2	953,2	1,07·10 ⁻⁴	14,55
3	IC-I.1	E-I.1	12,80	308,2	783,5	6,81·10 ⁻⁵	17,70
4	E-I.1	V-I.1	12,80	308,2	783,5	6,81·10 ⁻⁵	17,70
5	V-I.1	S-I.1	5,715	293,2	192,7	1,81·10 ⁻⁵	71,98
6	S-I.1	IC-I.2	5,715	293,2	192,7	1,81·10 ⁻⁴	71,98
7	IC-I.2	B-I.2	5,715	273,2	946,1	1,05·10 ⁻⁴	14,66
8	B-I.2	T-I.1	5,715	273,2	946,1	1,05·10 ⁻⁴	14,66

Para las conexiones 5 y 6, en base a lo propuesto por Simpson (1968), se escoge una velocidad de circulación óptima de 5 m/s, que, junto con el caudal, permite calcular el diámetro de tubería.

Se ha calcular también el número de Reynolds, utilizando la ecuación [I.31], para comprobar que el régimen de circulación es turbulento, lo cual ocurre para Re>2100.

$$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot D_i}{\mu} \quad [I.31]$$

Los diámetros de las tuberías de acero se encuentran normalizados, por lo que se ha de seleccionar el diámetro más cercano al óptimo calculado. Para ello, se utiliza la tabla de la Fig.I.19. Los resultados de los cálculos se muestran en la Tabla I.23. Tal y como puede verse, los diámetros internos óptimos son muy similares, todos entre los 70 y 80 mm. Esta similitud hace que, para simplificar la problemática, se escoja el mismo tipo de tubería para todas las conexiones.

El número de catálogo está relacionado con el espesor de la tubería y, en la industria, los más empleados son el 40 y el 80, teniendo este último un mayor espesor. Para aplicaciones de carácter general a bajas presiones suele utilizarse el número de catálogo 40. En este caso, las presiones son más elevadas, por lo que se empleará en número 80.

En cuanto a la longitud de las tuberías, se realiza una estimación de acuerdo a las dimensiones y disposición de los equipos, y teniendo en cuenta que lo más común son longitudes entre 6 y 12 m. Estas estimaciones se muestran en la Tabla I.24.

Tabla I.23. Diámetros óptimos de las tuberías del sistema.

nº	D _{i,opt} (mm)	D _i (mm)	nº catálogo	D _e (mm)	D _n (mm)	u _{CO2} (m/s)	Re
1	74,37					0,938	6,23·10 ⁵
2	74,16					0,948	6,22·10 ⁵
3	78,96					1,154	9,78·10 ⁵
4	78,96	73,66	80	88,9	80	1,154	9,78·10 ⁵
5	71,35					4,692	3,68·10 ⁶
6	71,35					4,692	3,68·10 ⁶
7	74,34					0,961	6,35·10 ⁵
8	74,34					0,956	6,35·10 ⁵

Tabla I.24. Longitud de las tuberías.

L ₁ (m)	6	L ₅ (m)	6
L ₂ (m)	6	L ₆ (m)	12
L ₃ (m)	6	L ₇ (m)	12
L ₄ (m)	6	L ₈ (m)	12



Philadelphia Regional Center
 2450 Wheatstheat Lane
 Philadelphia, PA 19137
 O 215-831-0700
 F 215-533-1645
 E sales@tiogapipe.com

Houston Regional Center
 14950 Heathrow Forest Parkway,
 Suite 390, Houston, TX 77032
 O 713-433-2111
 F 281-397-0132
 E sales@tiogapipe.com

Chattanooga Regional Center
 1301 Riverfront Parkway, Suite 108
 Chattanooga, TN 37402
 O 423-899-3398
 F 423-899-9695
 E sales@tiogapipe.com

PIPE DIMENSIONS AND WEIGHTS

Available in commercial and nuclear

U.S./METRIC

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID	
		INCH	ASME	INCH	MM	LBS/FOOT	KG/METER	INCH	MM
1/8	0.405	10	10S	0.049	1.24	0.19	0.28	0.307	7.82
6	10.3	STD	40	0.068	1.73	0.24	0.37	0.269	6.84
8	13.7	XS	80	0.095	2.41	0.31	0.47	0.215	5.84
1/4	0.540	10	10S	0.065	1.65	0.33	0.49	0.410	10.40
10	17.1	STD	40	0.088	2.24	0.43	0.63	0.364	9.22
15	21.3	XS	80	0.119	3.02	0.54	0.80	0.302	7.66
3/8	0.675	10	10S	0.065	1.65	0.42	0.63	0.545	13.80
10	17.1	STD	40	0.091	2.31	0.57	0.84	0.493	12.48
15	21.3	XS	80	0.126	3.20	0.74	1.10	0.423	10.70
1/2	0.840	5	5S	0.065	1.65	0.54	0.80	0.710	18.00
15	21.3	10	10S	0.083	2.11	0.67	1.00	0.674	17.08
		STD	40	0.109	2.77	0.85	1.27	0.622	15.76
		XS	80	0.147	3.73	1.09	1.62	0.546	13.84
		160		0.188	4.78	1.31	1.95	0.464	11.74
		XX		0.294	7.47	1.72	2.55	0.252	6.36
3/4	1.050	5	5S	0.065	1.65	0.69	1.03	0.920	23.40
20	26.7	10	10S	0.083	2.11	0.86	1.28	0.884	22.48
		STD	40	0.113	2.87	1.13	1.69	0.824	20.96
		XS	80	0.154	3.91	1.48	2.20	0.742	18.88
		160		0.219	5.56	1.95	2.90	0.612	15.58
		XX		0.308	7.82	2.44	3.64	0.434	11.06
1	1.315	5	5S	0.065	1.65	0.87	1.29	1.185	30.10
25	33.4	10	10S	0.109	2.77	1.41	2.09	1.097	27.86
		STD	40	0.133	3.38	1.68	2.50	1.049	26.64
		XS	80	0.179	4.55	2.17	3.24	0.957	24.30
		160		0.250	6.35	2.85	4.24	0.815	20.70
		XX		0.358	9.09	3.66	5.45	0.599	15.22
1-1/4	1.660	5	5S	0.065	1.65	1.11	1.65	1.530	38.90
32	42.2	10	10S	0.109	2.77	1.81	2.69	1.442	36.66
		STD	40	0.140	3.56	2.27	3.39	1.380	35.08
		XS	80	0.191	4.85	3.00	4.47	1.278	32.50
		160		0.250	6.35	3.77	5.61	1.160	29.50
		XX		0.382	9.70	5.22	7.77	0.896	22.80
1-1/2	1.900	5	5S	0.065	1.65	1.28	1.90	1.770	45.00
40	48.3	10	10S	0.109	2.77	2.09	3.11	1.682	42.76
		STD	40	0.145	3.68	2.72	4.05	1.610	40.94
		XS	80	0.200	5.08	3.63	5.41	1.500	38.14
		160		0.281	7.14	4.86	7.25	1.338	34.02
		XX		0.400	10.15	6.41	9.55	1.100	28.00
2	2.375	5	5S	0.065	1.65	1.61	2.39	2.245	57.00
50	60.3	10	10S	0.109	2.77	2.64	3.93	2.157	54.76
		STD	40	0.154	3.91	3.66	5.44	2.067	52.48
		XS	80	0.218	5.54	5.03	7.48	1.939	49.22
		160		0.344	8.74	7.47	11.11	1.687	42.82
		XX		0.436	11.07	9.04	13.44	1.503	38.16
2-1/2	2.875	5	5S	0.083	2.11	2.48	3.69	2.709	68.78
65	73.0	10	10S	0.120	3.05	3.53	5.26	2.635	66.90
		STD	40	0.203	5.16	5.80	8.63	2.469	62.68
		XS	80	0.276	7.01	7.67	11.41	2.323	58.98
		160		0.375	9.53	10.02	14.92	2.125	53.94
		XX		0.552	14.02	13.71	20.39	1.771	44.96
3	3.500	5	5S	0.083	2.11	3.03	4.52	3.334	84.68
80	88.9	10	10S	0.120	3.05	4.34	6.46	3.260	82.80
		STD	40	0.216	5.49	7.58	11.29	3.068	77.92
		XS	80	0.300	7.62	10.26	15.27	2.900	73.66
		160		0.438	11.13	14.34	21.35	2.624	66.64
		XX		0.600	15.24	18.60	27.68	2.300	58.42
3-1/2	4.000	5	5S	0.083	2.11	3.48	5.18	3.834	97.38
90	101.6	10	10S	0.120	3.05	4.98	7.41	3.760	95.50
		STD	40	0.226	5.74	9.12	13.57	3.548	90.12
		XS	80	0.318	8.08	12.52	18.64	3.364	85.44
		160		0.436	11.13	17.27	25.53	3.152	80.06
		XX		0.636	16.15	22.87	34.03	2.728	69.30
4	4.500	5	5S	0.083	2.11	3.92	5.84	4.334	110.08
100	114.3	10	10S	0.120	3.05	5.62	8.37	4.260	108.20
		STD	40	0.156	3.96	7.24	10.78	4.188	106.38
		XS	80	0.216	5.49	9.67	14.21	4.124	104.74
		160		0.337	8.56	15.00	22.32	3.826	97.18
		XX		0.438	11.13	19.02	28.32	3.624	92.04
		160		0.531	13.49	22.53	33.54	3.438	87.32
		XX		0.674	17.12	27.57	41.03	3.152	80.06
4-1/2	5.000	STD	40	0.247	6.27	12.55	18.67	4.506	114.46
115	127.0	XS	80	0.355	9.02	17.63	26.24	4.290	108.96
		XX		0.710	18.03	32.56	48.45	3.580	90.94

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID	
		INCH	ASME	INCH	MM	LBS/FOOT	KG/METER	INCH	MM
5	5.563	5	5S	0.109	2.77	6.36	9.46	5.345	135.76
125	141.3	10	10S	0.134	3.40	7.78	11.56	5.295	134.50
		STD	40	0.258	6.55	14.63	21.77	5.047	128.20
		XS	80	0.375	9.53	20.80	30.97	4.813	122.24
		120		0.500	12.70	27.06	40.28	4.563	115.90
		160		0.625	15.88	32.99	49.12	4.313	109.54
		XX		0.750	19.05	38.59	57.43	4.063	103.20
6	6.625	5	5S	0.109	2.77	7.59	11.31	6.407	162.76
150	168.3	10	10S	0.134	3.40	9.30	13.83	6.357	161.50
		STD	40	0.188	4.78	12.94	19.28	6.249	158.74
		XS	80	0.280	7.11	18.99	28.26	6.065	154.08
		120		0.432	10.97	28.60	42.56	5.761	146.36
		160		0.562	14.27	36.43	54.21	5.501	139.76
		XX		0.719	18.26	45.39	67.57	5.187	131.78
		160		0.864	21.95	53.21	79.22	4.897	124.40
7	7.625	STD	40	0.301	7.65	23.57	35.10	7.023	178.40
175	193.7	XS	80	0.500	12.70	38.08	56.69	6.625	168.30
		XX		0.875	22.23	63.14	94.00	5.875	149.24
8	8.625	10	5S	0.109	2.77	9.92	14.78	8.407	213.56
200	219.1	20	10S	0.148	3.76	13.41	19.97	8.329	211.58
		30		0.250	6.35	22.38	33.32	8.125	206.40
		40		0.277	7.04	24.72	36.82	8.070	205.02
		STD	40	0.322	8.18	28.58	42.55	7.981	202.74
		60		0.406	10.31	35.67	53.09	7.813	198.48
		XS	80	0.500	12.70	43.43	64.64	7.625	193.70
		100		0.594	15.09	51.00	75.92	7.437	188.92
		120		0.719	18.26	60.77	90.44	7.187	182.58
		140		0.812	20.62	67.82	100.93	7.001	177.86
		XX		0.875	22.23	72.49	107.93	6.875	174.64
		160		0.906	23.01	74.76	111.27	6.813	173.08
9	9.625	STD	40	0.342	8.69	33.94	50.54	8.941	227.12
225	244.5	XS	80	0.500	12.70	48.77	72.60	8.625	219.10
		XX		0.875	22.23	81.85	121.85	7.875	200.04
10	10.750		5S	0.134	3.40	15.21	22.61	10.482	266.20
250	273.0		10S	0.165	4.19	18.67	27.78	10.420	264.62
				0.188	4.78	21.23	31.62	10.374	263.44
				0.250	6.35	28.06	41.76	10.250	260.30
				0.307	7.80	34.27	51.01	10.136	257.40
				0.365	9.27	40.52	60.29	10.020	254.46
				0.500	12.70	54.79	81.53	9.750	247.60
				0.594	15.09	64.49			

I.B.2.8 Equipos de impulsión y compresión de fluidos

Para calcular los requerimientos energéticos de las bombas se utiliza la ecuación [I.16]. Estos dependerán de la diferencia de altura y de presiones entre el punto inicial y final, y de las pérdidas por fricción ocasionadas por las tuberías y sus accesorios.

$$W = g \cdot \Delta z + \frac{\Delta p}{\rho} + \frac{\Delta p_{f,\text{total}}}{\rho} \quad [\text{I.16}]$$

Para calcular las pérdidas por fricción generadas en la tubería se utiliza la ecuación [I.31]. Su valor depende del diámetro interno y longitud de la tubería, así como de la velocidad del fluido y del factor de fricción. Puesto que el régimen de circulación es turbulento, para conocer el factor de fricción puede emplearse el diagrama de Moody, donde es necesario saber la rugosidad de la tubería y el número de Reynolds.

$$\Delta p_f = 8 \cdot f \cdot \frac{L}{D_i} \cdot \frac{\rho u^2}{2} \quad [\text{I.31}]$$

Se considera que la rugosidad de una tubería de acero inoxidable son 0,0046 mm ("commercial steel pipe", Fig. I.20). El número de Reynolds se encuentra calculado, para cada tubería, en la Tabla I.23.

Table 5.2. Pipe Roughness

Material	Absolute Roughness, mm
Drawn tubing	0.0015
Commercial steel pipe	0.046
Cast iron pipe	0.26
Concrete pipe	0.3 to 3.0

Fig. I.20. Rugosidad para tuberías de distintos materiales. Tabla obtenida de Towler y Sinnott (2008).

B-I.1

Se considera que el depósito de CO₂ tiene un elevado volumen de fluido; por ello, se aproxima la diferencia de altura entre depósito y el extractor como la resta entre la altura del segundo y el diámetro del primero. Es decir, $\Delta z = 3,571$ m.

La presión en el depósito son 5,715 MPa, mientras que en el extractor han de ser 12,80 MPa. Por lo que Δp es igual a 7,085 MPa.

En cuanto a las pérdidas por fricción, el fluido circula por las conexiones 1, 2 y 3 hasta llegar al extractor, cuyas longitudes y diámetro pueden verse en la Tabla I.24 y la Tabla I.23,

respectivamente. Además, se suponen un total de 8 codos, debido a cambios de altura y/o dirección, y una válvula de globo completamente abierta, debido a que se colocan 2 extractores en paralelo y resulta necesaria para cerrar o abrir el flujo. Se emplea una válvula de globo puesto que son las más comunes, junto con las de compuerta (Green y Southard, 2019).

Tras obtener el factor de fricción a través del diagrama, se poseen todos los datos para calcular las pérdidas por fricción originada en las tuberías. Los resultados se muestran en la Tabla I.25.

Para estimar las pérdidas de fricción ocasionada por los accesorios se obtienen de tablas (Fig. I.21) sus longitudes equivalentes y se aplica la ecuación [I.31]. Este método consiste en considerar que las pérdidas de fricción producidas por los accesorios son similares a las que se producirían en una tubería con una longitud igual a la longitud equivalente del accesorio en cuestión. El resultado se muestra en la Tabla I.26. Las pérdidas por fricción totales son la suma de $\sum (\Delta p_{f, \text{accesorios}})$ y $\sum (\Delta p_{f, \text{tubería}})$.

Table 5.3. Pressure Loss in Pipe Fittings and Valves
(for Turbulent Flow)

Fitting or Valve	K, Number of Velocity Heads	Number of Equivalent Pipe Diameters
45° standard elbow	0.35	15
45° long radius elbow	0.2	10
90° standard radius elbow	0.6–0.8	30–40
90° standard long elbow	0.45	23
90° square elbow	1.5	75
Tee-entry from leg	1.2	60
Tee-entry into leg	1.8	90
Union and coupling	0.04	2
Sharp reduction (tank outlet)	0.5	25
Sudden expansion (tank inlet)	1.0	50
Gate valve		
fully open	0.15	7.5
1/4 open	16	800
1/2 open	4	200
3/4 open	1	40
Globe valve, bevel seat-		
fully open	6	300
1/2 open	8.5	450
Globe valve, plug disk-		
fully open	9	450
1/2 open	36	1800
1/4 open	112	5600
Plug valve - open	0.4	18

Fig. I.21. Longitud equivalente para distintos accesorios. Gráfica obtenida de Towler y Sinnott (2008).

Tabla I.25. Pérdidas por fricción en las tuberías (B-I.1).

nº	ϵ	Re	f	L (m)	D _i (m)	u _{CO2} (m/s)	$\Delta p_{f,tubería}$ (Pa)
1		6,23·10 ⁵	0,0045	6		0,938	1.221
2	0,046	6,22·10 ⁵	0,0045	6	73,66	0,948	1.257
3		9,78·10 ⁵	0,0045	6		1,154	1.529

Tabla I.26. Pérdidas por fricción en los accesorios (B-I.1).

Accesorio	Codo	Válvula de globo
Cantidad	8	1
L _{eq} /D	35	300
$\Delta p_{f,accesorios}$ (Pa)	6.430	6.001

Los requerimientos energéticos que resultan tras aplicar la ecuación [I.16] son 7973 J/kg; o lo que es lo mismo, una carga de 813,5 m. Se observa como la energía requerida se debe casi en su totalidad a la necesidad de comprimir el fluido desde 5,715 MPa en el depósito hasta 12,8 MPa en el extractor.

B-I.2

La función de esta bomba es únicamente la impulsión del fluido desde el separador hasta el depósito de CO₂. En este caso, se considera despreciable la diferencia de altura entre el separador y el depósito, por lo que $\Delta z = 0$ m.

El fluido circulará por las conexiones 6, 7 y 8, cuyas longitudes y diámetro pueden verse en la Tabla I.24 y la Tabla I.23, respectivamente. Igual que en el caso anterior, se suponen un total de 8 codos debido a cambios de altura y/o dirección. De nuevo, se utiliza el diagrama de Moody para hallar el factor de fricción y se calculan las pérdidas por fricción debidas a las tuberías (Tabla I.27) y a los accesorios (Tabla I.28).

Tabla I.27. Pérdidas por fricción en las tuberías (B-I.2).

nº	ϵ	Re	f	L (m)	D _i (m)	u _{CO2} (m/s)	$\Delta p_{f,tubería}$ (Pa)
6		3,68·10 ⁶	0,0043	12		4,392	12.024
7	0,046	6,34·10 ⁵	0,0045	12	73,66	0,956	2.533
8		6,34·10 ⁵	0,0045	12		0,956	2.533

Tabla I.28. Pérdidas por fricción en los accesorios (B-I.2).

Accesorio	Codo
Cantidad	8
L_{eq}/D	35
$\Delta p_{f,accesorios}$ (Pa)	16.968

Los requerimientos energéticos que resultan tras aplicar la ecuación [I.16] son 49,41 J/kg; o lo que es lo mismo, una carga de 5,001 m.

Una vez se conocen los requerimientos energéticos, se ha de calcular la potencia que consumen las bombas; esta dependerá del flujo másico a impulsar y del factor de eficiencia, tal y como puede verse en la ecuación [I.32].

$$P = \frac{w_{CO_2} \cdot W}{\eta} \quad [I.32]$$

Previamente, con los conocimientos sobre las características del sistema, ha de seleccionarse el tipo de bomba. En el caso de la bomba B-I.1, esta será una bomba centrífuga de varias etapas, puesto que parece una opción adecuada en base a lo observado en la Fig. I.22; en el caso de la B-I.2, será una bomba centrífuga de una sola etapa, por ser las más comunes en la industria química (Green y Southard, 2019).

Una vez conocido el tipo de bomba a emplear y con el objetivo de hacer una estimación de la eficacia se recurre a la Fig. I.23. Para ambas bombas, con una capacidad de en torno a 15 m³/h, se estima una eficiencia del 50%. En la Tabla I.29 se recogen los resultados de ambas bombas. Además, estas han de sobredimensionarse en, al menos, un 25% (Walas, 2012).

Tabla I.29. Dimensionado de las bombas (B-I.1 y B-I.2).

	w (kg/h)	W (J/kg)	H (m)	η	P (kW)	P_s (kW)
B-I.1	13.870	7.973	813,5	0,5	61,43	76,79
B-I.2		49,41	5,079		0,384	0,480

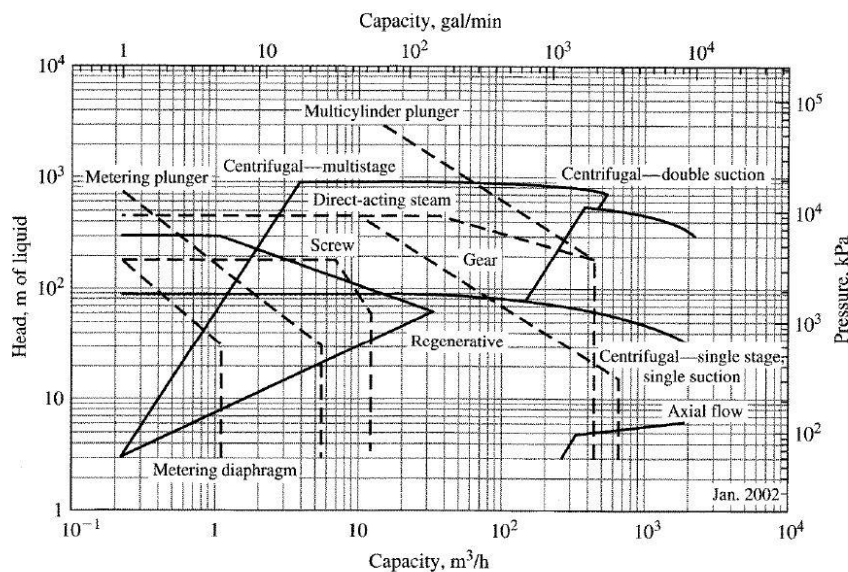


Figure 12-13
 Normal operating ranges of commercially available pumps.
 Solid lines: use left ordinate, head. Broken lines: use right ordinate, pressure.

Fig. I.22. Rangos de operación de los distintos tipos de bombas. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

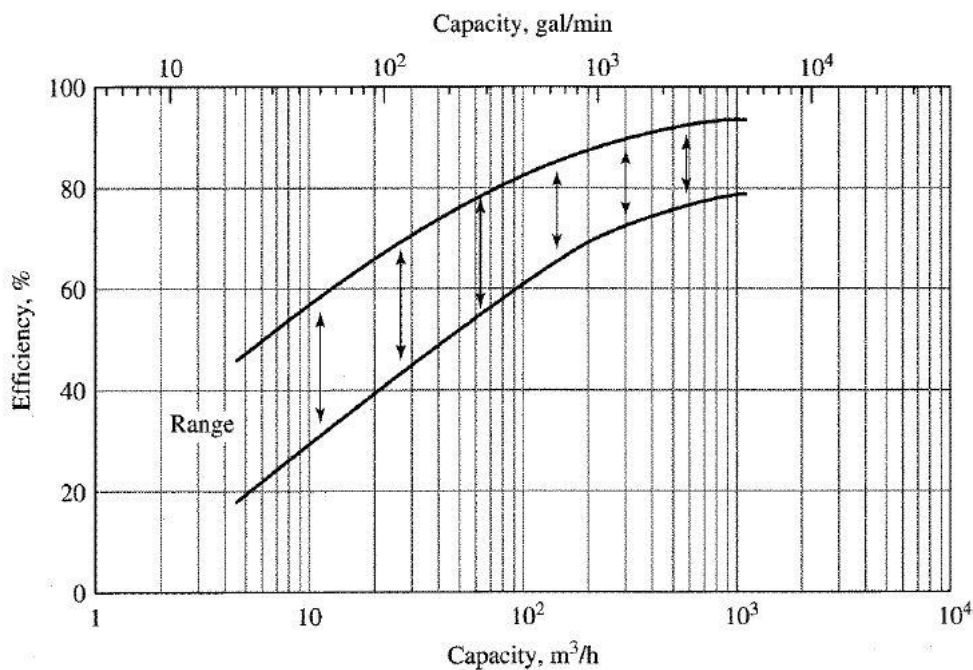


Figure 12-17
 Efficiencies of centrifugal pumps

Fig. I.23. Eficiencia de bombas centrífugas. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

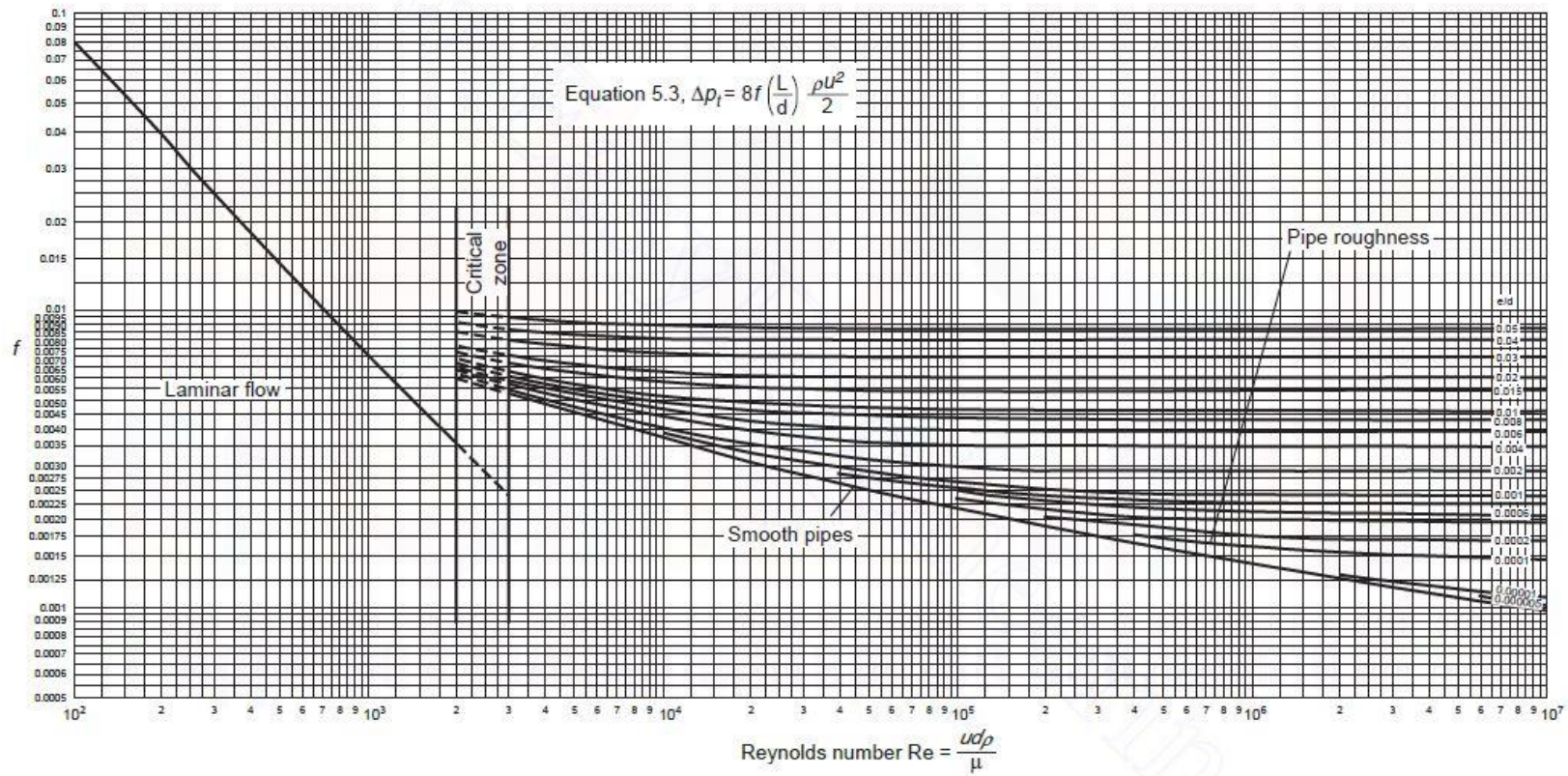


Fig. I.24. Diagrama de Moody.

I.B.2.9 Depósito de almacenamiento de piel de naranja

La configuración elegida para el del depósito de almacenamiento de la piel de las naranjas es cilíndrica con cabezales planos, con una relación L/D igual a 3:1. Por lo que las ecuaciones que relacionan el volumen con su longitud y diámetro son las ecuaciones [I.33] y [I.34].

$$V_{TOTAL} = \pi * R^2 * L \quad [I.33]$$

$$V_{TOTAL} = \pi * \left(\frac{D}{2}\right)^2 * 3D \quad [I.34]$$

La cantidad de materia prima a almacenar son 13.315 kg, por lo que el depósito tiene que estar capacitado para albergar dicha cantidad. Las condiciones en las que se encuentra el depósito son temperatura ambiente y presión atmosférica. La piel de las naranjas posee una densidad de 568,0 kg/m³. Por lo tanto, el volumen que deberá poder contener el depósito son 11,72 m³.

Para depósitos que superen los 500 galones, es decir, los 1893 L, se recomienda dejar un 10% del volumen total del depósito libre (Walas, 2012). Por lo que el volumen total serán 13,02 m³.

Conocido el volumen y sabiendo que la relación L/D es 3:1, puede despejarse el diámetro de la ecuación [I.29]. Los resultados de los cálculos se muestran en la Tabla I.30.

Tabla I.30. Dimensionado del depósito de almacenamiento de materia prima (T-I.1)

V_{T-I.1} (m³)	13,02
D_{T-I.1} (m³)	1,768
L_{T-I.1} (m)	5,304

I.B.3. Diseño mecánico

A continuación, se abordan los cálculos y consideraciones llevadas a cabo en el diseño mecánico del extractor y del depósito de almacenamiento de CO₂.

Tanto el extractor como el depósito de almacenamiento de CO₂ poseen una configuración cilíndrica con cabezales semiesféricos. Además, ambos están construidos en acero inoxidable 316 (AISI 316).

El espesor mínimo requerido puede calcularse acudiendo a la tabla que se muestra en la Fig. I.25. En ella pueden verse distintas fórmulas para calcular el espesor en función de la forma del tanque y de sus cabezales. Para una configuración cilíndrica y cabezales

semiesféricos se ha de emplear las ecuaciones [I.35] o [I.36] y [I.37] o [I.38], respectivamente. Por motivos de seguridad, el espesor final del equipo será el mayor de los dos.

$$t = \frac{p \cdot R_i}{S \cdot E_j - 0,6 \cdot p} + C_c \quad p \leq 0,385SE_j \quad [I.35]$$

$$t = R_i * \left(\frac{2SE_j + p}{2SE_j - p} \right)^{\frac{1}{2}} - R_i + C_c \quad p > 0,385SE_j \quad [I.36]$$

$$t = \frac{p \cdot L_a}{S \cdot E_j - 0,2 \cdot p} + C_c \quad p \leq 0,665SE_j \quad [I.37]$$

$$t = L_a * \left(\frac{2SE_j + 2p}{2SE_j - p} \right)^{\frac{1}{3}} - L_a + C_c \quad p > 0,665SE_j \quad [I.38]$$

Las juntas serán de doble soldadura examinándose en todos puntos, lo que determina una eficiencia de junta (E_j) de 1 (Fig. I.25).

La presión de diseño será un 10% superior a la presión máxima de operación; a su vez, la presión máxima de operación será 25 psig (1,72 bar) superior a la presión normal de operación (Tabla I.31) (Wallas, 2012).

Tabla I.31. Presiones de diseño para el extractor y el depósito de CO₂.

Equipo	p,operación (kPa)	p, max. operación (kPa)	p,diseño (kPa)
E-I.1	12,80	12,97	14,27
T-I.1	5,715	5,887	6,476

Por otro lado, la tensión máxima de trabajo (S) depende en gran medida de la temperatura, tal y como puede verse en la Fig. I.26. Con los datos que se poseen a distintas temperaturas se realizó una representación gráfica y se ajustaron los valores a un polinomio de grado 2; de esta manera, conociendo la temperatura de diseño, puede obtenerse una aproximación de la tensión máxima de trabajo. Por motivos de seguridad, la temperatura de diseño se toma como 10°C superior a la temperatura normal de operación. Todo ello puede verse en la Tabla I.32.

Finalmente, al calcular el espesor suelen añadirse unos milímetros extra para tener en cuenta posibles fenómenos de corrosión (C_c). Como en este caso se considera que ambos equipos son susceptibles a dichos fenómenos, debido a la capacidad corrosiva del CO₂ en presencia de agua, C_c toma un valor de 8,89 mm (Wallas, 2012)

Tabla I.32. Temperaturas de diseño para el extractor y el depósito de CO₂, así como sus respectivas tensiones máximas de trabajo.

Equipo	T _{operación} (K)	T _{diseño} (K)	S (kPa)
E-I.1	308	318	115.295
T-I,1	273,15	283,15	121.469

En la Tabla I.33 se muestra la comprobación para ver qué ecuaciones usar en el cálculo de los espesores de ambos equipos. En base a lo observado, se utilizan las ecuaciones [I.35] y [I.37]. Los espesores obtenidos se recogen en la Tabla I.34 ; tal y como puede verse, el mayor valor de espesor en ambos casos se corresponde con el espesor del cuerpo cilíndrico. Por lo tanto, será este el utilizado.

Tabla I.33. Comprobación del criterio para el cálculo del espesor.

Equipo	p (kPa)	0,385·S·E _J	0,665·S·E _J
E-I.1	14.269	44.389	76.671
T-I,1	6.476	46.766	80.777

Tabla I.34. Espesor del equipo de extracción y del depósito de CO₂.

Equipo	t cuerpo cilíndrico (m)	t cabezales semiesféricos (m)	t equipo (m)
E-I.1	0,063	0,060	0,063
T-I.1	0,054	0,053	0,054

Una vez conocido el espesor, se puede calcular la masa de acero que constituye a los equipos, utilizando la ecuación [I.34]. Basicamente, este procedimiento consiste en calcular el área superficial de los equipos y multiplicarlo por el espesor, obteniendo de esta forma el volumen de acero; junto con la densidad del material, se obtiene la masa. Finalmente, se le adiciona un 20% correspondiente a los accesorios. Los resultados se muestran en la Tabla I.35.

$$\text{Masa}_{\text{carcasa}} = \rho_{SS\ 316} [(2\pi RL) + 2 * (2\pi R^2)] * t \quad [I.39]$$

Tabla I.35. Masa de acero que constituye al equipo de extracción y al depósito de CO₂.

Equipo	A ₀ (m ²)	t (m)	V _{acero} (m ³)	ρ _{SS316} (kg/m ³)	Masa (kg)	Masa _{120%} (kg)
E-I.1	12,37	0,063	0,780	7980	6221	7.465
T-I.1	31,17	0,054	1,685	7980	13.444	16.133

Table 12-10 Design equations and data for pressure vessels based on the ASME Boiler and Pressure Vessel Code*

Recommended design equations for vessels under internal pressure		Limiting conditions	
For cylindrical shells			
$t = \frac{Pr_i}{SE_j - 0.6P} + C_c$		$\left\{ \begin{array}{l} t \leq \frac{r_i}{2} \\ \text{or } P \leq 0.385SE_j \end{array} \right.$	
$t = r_i \left(\frac{SE_j + P}{SE_j - P} \right)^{1/2} - r_i + C_c$		$\left\{ \begin{array}{l} t > \frac{r_i}{2} \\ \text{or } P > 0.385SE_j \end{array} \right.$	
For spherical shells			
$t = \frac{Pr_i}{SE_j - 0.2P} + C_c$		$\left\{ \begin{array}{l} t \leq 0.356r_i \\ \text{or } P \leq 0.665SE_j \end{array} \right.$	
$t = r_i \left(\frac{2SE_j + 2P}{2SE_j - P} \right)^{1/3} - r_i + C_c$		$\left\{ \begin{array}{l} t > 0.356r_i \\ \text{or } P > 0.665SE_j \end{array} \right.$	
For ellipsoidal head			
$t = \frac{PD_a}{2SE_j - 0.2P} + C_c$		0.5 (minor axis) $0 = 0.25D_a$	
For torispherical (spherically dished) head			
$t = \frac{0.885PL_a}{SE_j - 0.1P} + C_c$		$r = \text{knuckle radius} = 6\%$ of inside crown radius and is not less than $3t$	
For hemispherical head Same as for spherical shells with $r_i = L_a$			
Properties of vessel heads (include corrosion allowance in variables)	2:1 Ellipsoidal	Hemispherical	Standard ASME torispherical
Capacity as volume in head, m ³	$\frac{\pi D_a^3}{24}$	$\frac{2}{3}\pi L_a^3$	$0.9 \left(\frac{2\pi L_a^2}{3} \text{IDD} \right)$
IDD = inside depth of dish, m	$\frac{D_a}{4}$	L_a	$L_a - [(L_a - r)^2 - (L_a - t - r)^2]^{1/2}$
Approximate weight of dished portion of head, kg	$\rho_w \frac{\pi(nD_a + t)^2 t}{4}$	$\rho_n (2\pi L_a^2 t)$	$\rho_m \frac{\pi(\text{OD} + \text{OD}/24 + at)^2 t}{4}$

Fig. I.25. Ecuaciones para determinar el espesor de tanques a presión según el código ASME. Tabla obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

Table 12-10 Continued

Joint efficiencies	Recommended stress values			
	Metal	Temp., °C	S, kPa	
For double-welded butt joints If fully radiographed = 1.0 If spot-examined = 0.85 If not radiographed = 0.70	Carbon steel (SA-285, Gr. C)	-29 to 343 399 454	94,500 82,700 57,200	
	In general, for spot examined If electric resistance weld = 0.85 If lap-welded = 0.80 If single-butt-welded = 0.60	Low-alloy steel for resistance to H ₂ and H ₂ S (SA-387, Gr.12Cl.1)	-29 to 427 510 565 649	94,500 75,800 34,500 6,900
		High-tensile steel for heavy-wall vessels (SA-302, Gr.B)	-29 to 399 454 510 538	137,900 115,800 69,000 42,750
High-alloy steel for cladding and corrosion resistance Stainless 304 (SA-240)		-29 343 427 538	128,900 77,200 72,400 66,900	
Stainless 316 (SA-240)		-29 345 427 538	128,900 79,300 75,800 73,100	
Nonferrous metals Copper (SB-11)		38 204	46,200 20,700	
Aluminum (SB-209, 1100-0)		38 204	15,900 6,900	

Fig. I.26. Tensión máxima de trabajo para distintos materiales en función de la temperatura y eficiencia de juntas, según el código ASME. Tabla obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

I.B.4. Determinación de costes

La estimación de costes se realiza mediante el uso de las gráficas recogidas en Peters, Timmerhaus y West (2003). Estas gráficas están basadas en datos del año 2002, por lo que se debe aplicar la ecuación [I.40] para obtener la equivalencia del coste en el año 2023. En algunos casos se utilizará una fórmula propuesta por Towler y Sinnott (2008), donde el coste se obtiene para el año 2006. Los CEPCI son 803,4, 499,6 y 395,1 para 2023, 2006 y 2002, respectivamente.

$$\text{Coste}_n = \text{Coste}_i \cdot \frac{\text{CEPCI}_n}{\text{CEPCI}_i} \quad [\text{I.40}]$$

Por lo general las gráficas están definidas para unas condiciones de presión y para un material determinado. Sin embargo, existen factores de presión (F_p) y de material (F_M) que se proporcionan para poder hacer una estimación más ajustada, teniendo en cuenta la presión de diseño y el material de construcción del equipo; de esta forma, el coste final del equipo (PC_i) puede calcularse con la ecuación [I.41].

$$PC_{i,2002} = PC_{2002} \cdot F_p \cdot F_M \quad [\text{I.41}]$$

I.B.4.1 Molino de martillos

Para determinar el coste del molino de martillos se recurre a la ecuación [I.42] y a la tabla de la Fig. I.27. Este equipo se aproxima a lo que se refiere en la tabla como "Reversible hammer mil". Los parámetros a , b y n se obtienen de dicha tabla, donde también puede verse como S hace referencia al factor de tamaño; en este caso, las t/h de materia prima procesada.

Puede comprobarse como el factor de tamaño del equipo en cuestión (5,548 t/h) no entra dentro del rango establecido en la tabla (20-400 t/h). Sin embargo, no se ha encontrado en la bibliografía tablas o correlaciones para estimar el coste de este tipo de equipos; por ello, pese a no ser la estimación más rigurosa, se efectuará de esta manera.

$$C_e = a + b \cdot S^n \quad [\text{I.42}]$$

El coste del motor se obtendrá haciendo uso de la gráfica de la Fig. I.32, para estimar la eficiencia del motor, y de la gráfica de la Fig. I.33, para estimar su coste en función de la potencia requerida. Todos los resultados pueden verse en la Tabla I.36.

Table 6.6. Purchased Equipment Cost for Common Plant Equipment

Equipment	Units for Size, S	S_{Lower}	S_{Upper}	a	b	n	Note
<i>Agitators & mixers</i>							
Propeller	driver power, kW	5.0	75.0	4,300	1,920	0.8	
Spiral ribbon mixer	driver power, kW	5.0	35.0	11,000	420	1.5	
Static mixer	Liters/s	1.0	50.0	780	62	0.8	
<i>Boilers</i>							
Packaged, 15 to 40 bar	kg/h steam	5,000.0	200,000.0	4,600	62	0.8	
Field erected, 10 to 70 bar	kg/h steam	20,000.0	800,000.0	-90,000	93	0.8	
<i>Centrifuges</i>							
High-speed disk	diameter, m	0.26	0.49	63,000	260,000	0.8	
Atmospheric suspended basket	power, kW	2.0	20.0	37,000	1,200	1.2	
<i>Compressors</i>							
Blower	m ³ /h	200.0	5,000.0	4,200	27	0.8	
Centrifugal	driver power, kW	132.0	29,000.0	8,400	3,100	0.6	
Reciprocating	driver power, kW	100.0	16,000.0	240,000	1.33	1.5	
<i>Conveyors</i>							
Belt, 0.5 m wide	length, m	10.0	500.0	21,000	340	1.0	
Belt, 1.0 m wide	length, m	10.0	500.0	23,000	575	1.0	
Bucket elevator, 0.5 m bucket	height, m	10.0	35.0	14,000	1,450	1.0	
<i>Crushers</i>							
Reversible hammer mill	tonne/h	20.0	400.0	400	9,900	0.5	
Pulverizers	kg/h	200.0	4,000.0	3,000	390	0.5	
<i>Crystallizers</i>							
Scraped surface crystallizer	length, m	7.0	280.0	41,000	40,000	0.7	
<i>Distillation columns</i>							
See pressure vessels, packing, and trays							
<i>Dryers</i>							
Direct contact rotary	area, m ²	11.0	180.0	-7,400	4,350	0.9	1
Pan	area, m ²	1.5	15.0	-5,300	24,000	0.5	2
Spray dryer	evap rate kg/h	400.0	4,000.0	190,000	180	0.9	
<i>Evaporators</i>							
Vertical tube	area, m ²	11.0	640.0	17,000	13,500	0.6	
Agitated falling film	area, m ²	0.5	12.0	29,000	53,500	0.6	

(continued)

Fig. I.27. Estimación de costes de diferentes equipos. Gráfica obtenida de Towler y Sinnott (2008).

Tabla I.36. Coste del molino de martillos M-I.1, así como de su motor WM-I.1.

S (t/h)	5,548	PC_{M-I.1,2006} (\$)	23.719
a	400		
b	9900		
n	0,5	PC_{M-I.1,2023} (\$)	38.142
P (kW)	22,74	PC_{WM-I.1,2006} (\$)	4000
η	0,88		
P_{real} (kW)	25,84		
		PC_{WM-I.1,2023} (\$)	8134

I.B.4.2 Equipo de extracción

Para determinar el coste del equipo de extracción se recurre a la Fig. I.28. Esta gráfica se corresponde con el coste de columnas verticales sin incluir platos, relleno o conexiones. Se considera que el equipo de extracción utilizado se aproxima a dicha definición.

Los datos de diseño necesarios para hacer la estimación de costes son la altura y diámetro de la columna, así como presión de diseño y material de construcción. El resultado se muestra en la Tabla I.37.

Tabla I.37. Coste del equipo de extracción E-I.1.

$H_{E-I.1}$ (m)	4,857		
$D_{E-I.1}$ (m)	0,810	PC_{2002} (\$)	11.000
$p_{\text{diseño}}$ (kPa)	14.270	F_p	6,935
Material de construcción	SS 316	F_M	3
		$PC_{E-I.1,2002}$ (\$)	228.839
		$PC_{E-I.1,2022}$ (\$)	465.322

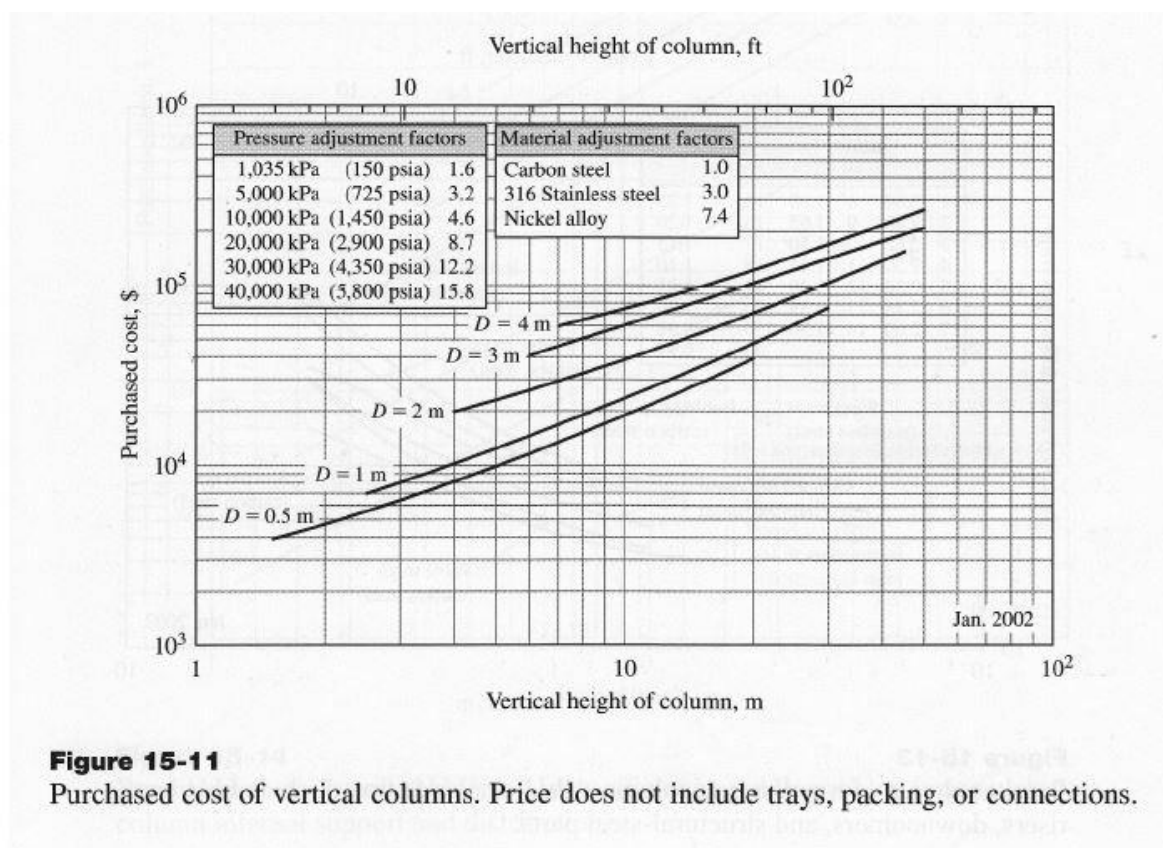


Figure 15-11
Purchased cost of vertical columns. Price does not include trays, packing, or connections.

Fig. I.28. Estimación del coste de una columna vertical sin plantas, relleno o conexiones. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

I.B.4.3 Válvula de expansión

Para determinar el coste de la válvula de expansión se recurre a la Fig. I.29. Esta gráfica se corresponde con el coste de válvulas de control y alivio. Posee 6 isolíneas, cada una de ellas correspondiente a una de las definiciones localizadas en la parte derecha de la gráfica. En este caso, se escoge la isolínea número 3, que representa el coste de válvulas reguladoras de presión para corrientes gaseosas y líquidas, con cuerpos de acero.

El único dato de diseño necesario es el diámetro nominal de la válvula. El resultado se muestra en la Tabla I.38 .

Tabla I.38. Coste de la válvula de expansión V-I.1.

D_n (m)	0,08	$PC_{V-I.1,2002}$ (\$)	2.200
		$PC_{V-I.1,2022}$ (\$)	4.474

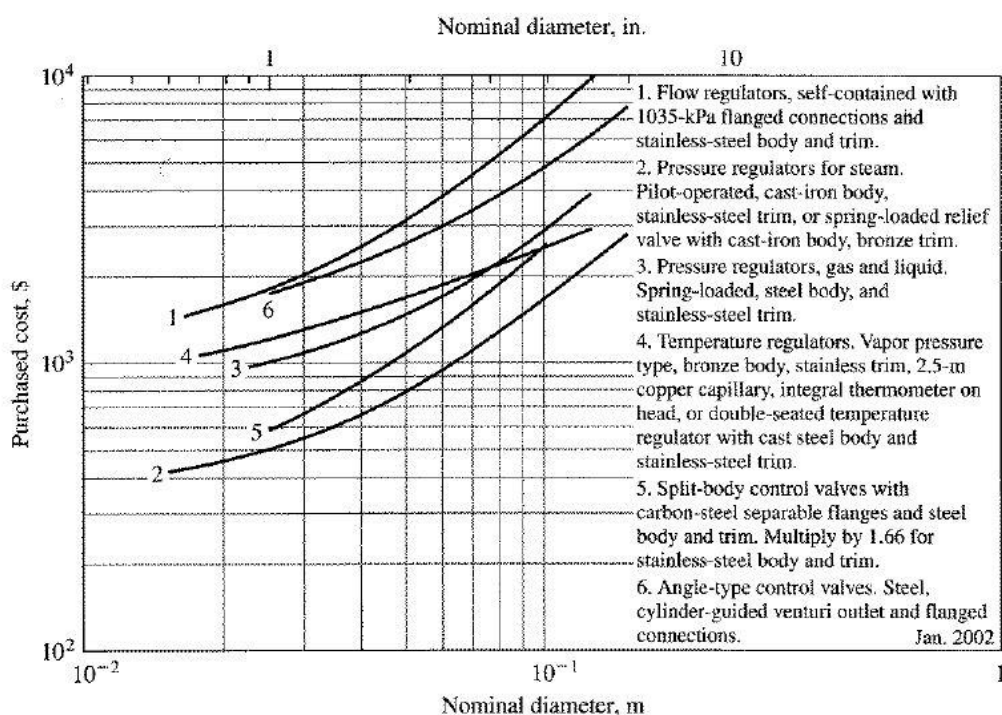


Figure 12-11
Purchased cost for control and relief valves

Fig. I.29. Estimación del coste de válvulas de control y alivio. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

I.B.4.4 Separador gas-líquido

Para determinar el coste del separador gas-líquido se recurre de nuevo a la Fig. I.28, debido a que el separador puede considerarse como una columna vertical.

Los datos de diseño necesarios para hacer la estimación de costes son la altura y diámetro de la columna, así como presión de diseño y material de construcción. La presión de diseño no está aún definida, debido a que no se ha realizado el diseño mecánico para este equipo. Las reglas aplicadas en su determinación serán las mismas que se han comentado en el apartado anterior; dado que su presión de operación coincide con la del depósito de CO₂, la presión de diseño será la misma. Su material de construcción será SS 316. El resultado se muestra en la Tabla I.39

Tabla I.39. Coste del separador gas-líquido S-I.1.

H_{S-I.1} (m)	2,180	PC₂₀₀₂ (\$)	5.000
D_{S-I.1} (m)	0,445		
p_{diseño} (kPa)	6.476	F_p	3,817
Material de construcción	SS 316	F_M	3
		PC_{S-I.1,2002} (\$)	57.254
		PC_{S-I.1,2023} (\$)	116.420

I.B.4.5 Depósito de CO₂

Para determinar el coste del depósito de CO₂ se recurre a la Fig. I.30. Esta gráfica se corresponde con el coste de depósitos de almacenamiento horizontales, como es el caso del T-I.1.

Los datos de diseño necesarios para hacer la estimación de costes son la longitud y diámetro del depósito, así como presión de diseño y material de construcción. El resultado se muestra en la Tabla I.40.

Tabla I.40. Coste del depósito de CO₂ T-I.1.

H_{T-I.1} (m)	7,715	PC₂₀₀₂ (\$)	8.000
D_{T-I.1} (m)	1,286		
p_{diseño} (kPa)	6.476	F_p	3,817
Material de construcción	SS 316	F_M	3
		PC_{T-I.1,2002} (\$)	91.606
		PC_{T-I.1,2023} (\$)	186.272

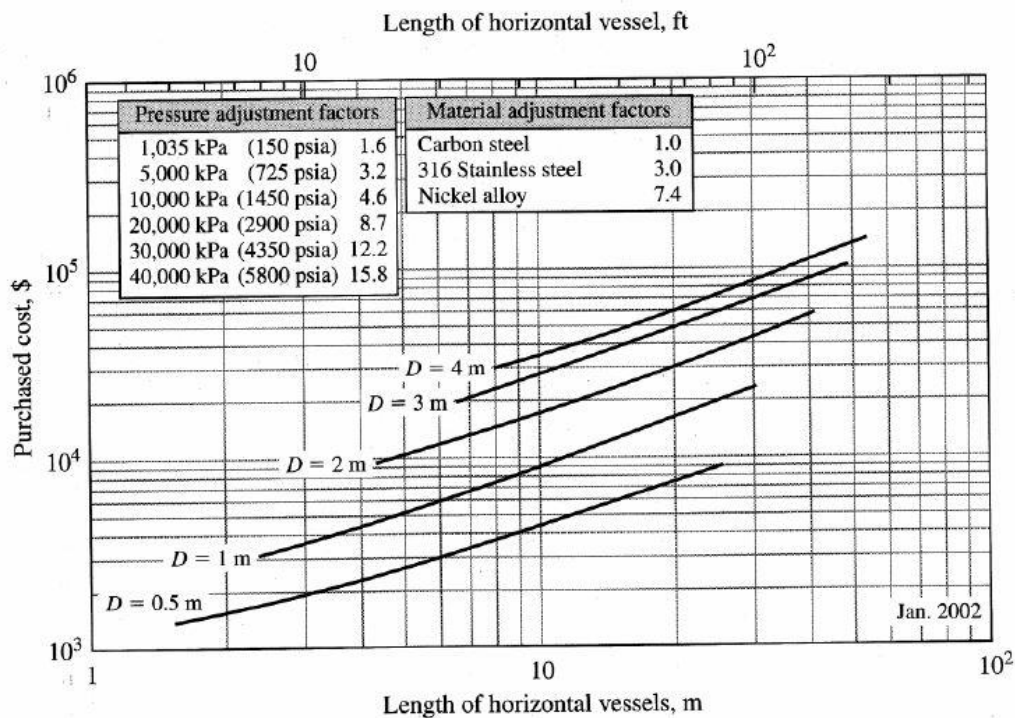


Figure 12-54
Purchased cost for horizontal storage vessels

Fig. I.30. Estimación del coste de un depósito de almacenamiento horizontal. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

I.B.4.6. Sistema de tuberías

Para determinar el coste del sistema de tuberías se utiliza la gráfica de la Fig. I.31. Esta gráfica se corresponde con el coste de tuberías por unidad de longitud.

Los datos de diseño necesarios para hacer la estimación de costes son el diámetro nominal de las tuberías, el número de catálogo y el material de construcción, así como la longitud total, que será la suma de la longitud de todas las conexiones. El resultado se muestra en la Tabla I.41 .

Tabla I.41. Coste del sistema de tuberías.

D_n (m)	0,08		
Nº de catálogo	80	(PC/L)₂₀₀₂ (\$)	300
Material de construcción	SS 316	F_M	1,25
Longitud total (m)	66		
		PC_{Tuberías, 2002} (\$)	24.750
		PC_{Tuberías, 2023} (\$)	50.327

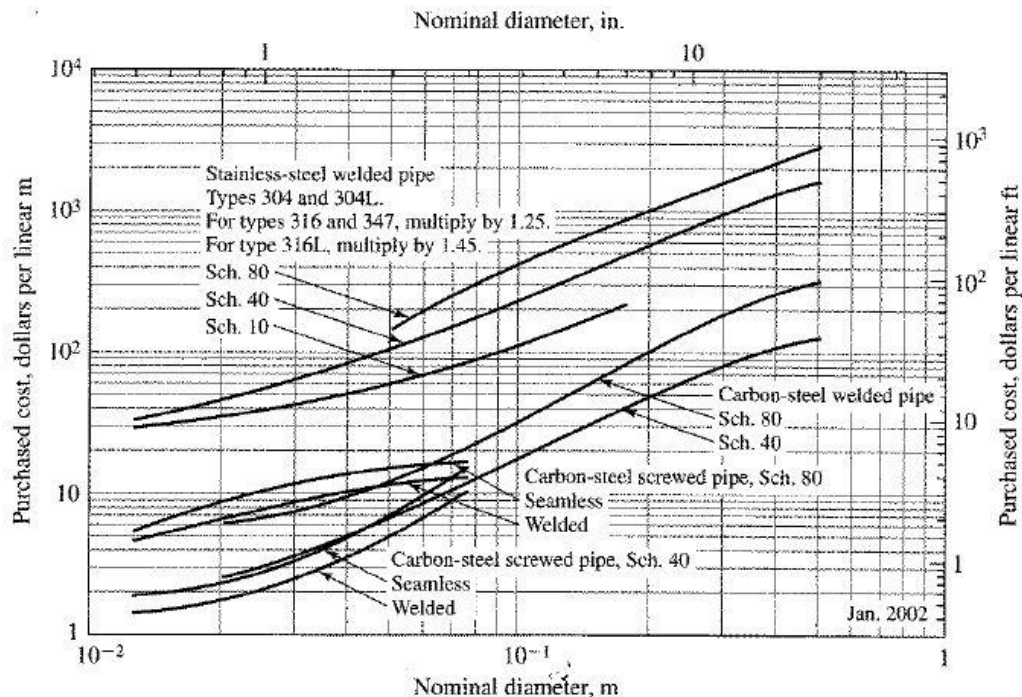


Figure 12-4
Purchased cost of welded and screwed pipe per unit length

Fig. I.31. Estimación del coste de tuberías por unidad de longitud. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

I.B.4.7 Equipos de impulsión y compresión de fluidos

Para determinar los costes de las bombas se recurre de nuevo a la ecuación [I.37].

$$C_e = a + b \cdot S^n \quad [I.37]$$

Los parámetros a , b y n dependen del equipo, tal y como puede verse en la Fig. I.34. En el caso de las bombas centrífugas de una etapa, toman los siguientes valores:

- $a = 3300$
- $b = 48$
- $n = 1,2$

Por otro lado, S es el factor de tamaño. Para las bombas, se refiere al caudal impulsado. En este caso, ambas bombas impulsan un flujo volumétrico aproximado de 15 m³/h, es decir, 4,167 L/s.

Sin embargo, B-I.1 es una bomba centrífuga de varias etapas, no habiéndose encontrado en la bibliografía gráficas o correlaciones para estimar su coste. Puesto que la

presión suministrada es de más de 7000 kPa y la máxima variación por etapa son 2000 kPa, se suponen 4 etapas. Para estimar su coste, se considera que en el peor de los casos será igual al coste de 4 bombas centrífugas de una etapa que impulsen el mismo caudal. Los resultados pueden verse en la Tabla I.42

Estos resultados obtenidos no incluyen el coste de los motores. Para ello, se recurre primero a la Fig. I.32, de forma que pueda hacerse una estimación de su eficiencia, y finalmente, se acude a la Fig. I.33, para hallar el coste tanto del motor de B.I.1 como para el motor de B-I.2 en función de la potencia requerida. Los resultados se muestran en la Tabla I.43.

Tabla I.42. Coste de las bombas.

Caudal de fluido (m³/h)	15	PC_{B-I.1, 2006} (\$)	14.264
Caudal de fluido, S (L/s)	4,167	PC_{B-I.1, 2023} (\$)	22.938
a	3.300	PC_{B-I.2, 2006} (\$)	3566
b	48	PC_{B-I.2, 2023} (\$)	5.735
N	1,2		

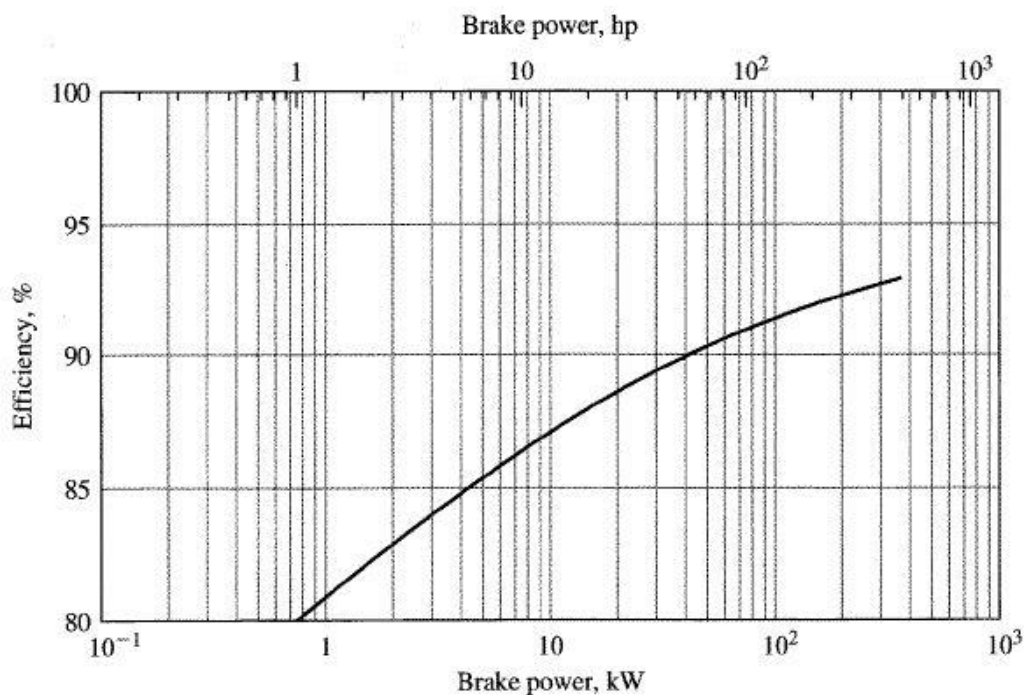


Figure 12-18
Efficiencies of three-phase motors

Fig. I.32. Estimación de la eficiencia de motores. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

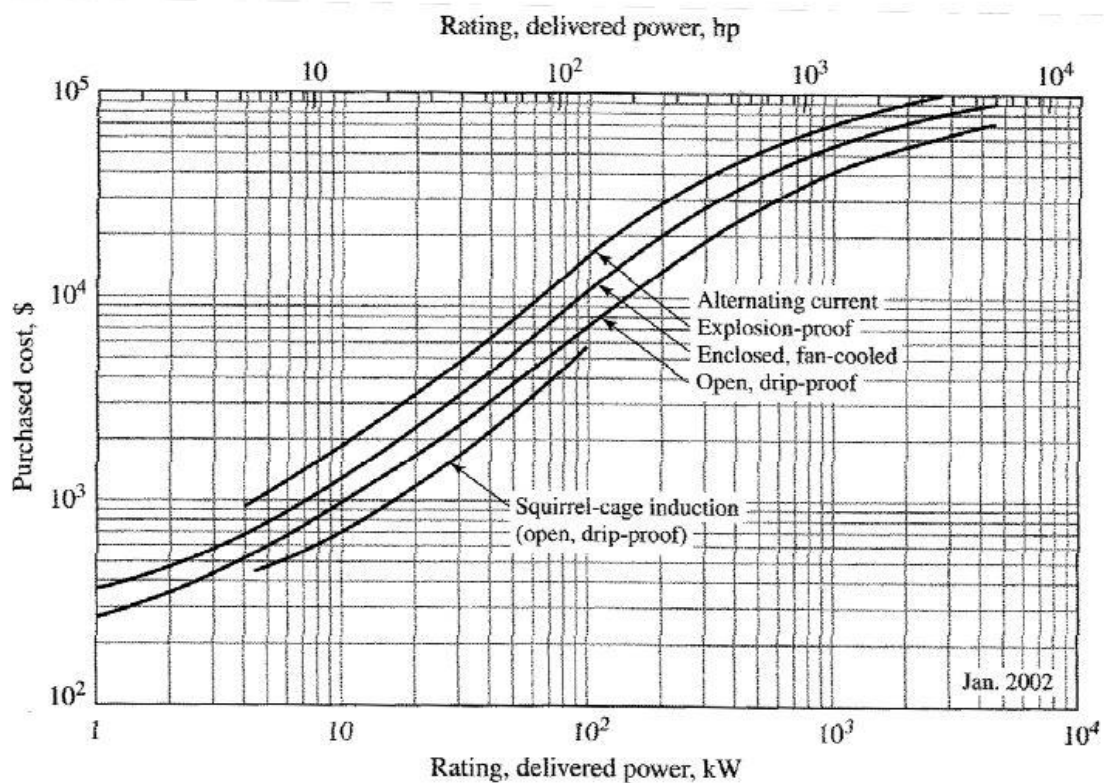


Figure 12-24
Purchased cost of electric motors

Fig. I.33. Estimación de costes de motores. Gráfica obtenida de Peters, Timmerhaus y West (2003).

Tabla I.43. Costes de los motores.

B-I.1	P (kW)	76,79	PC_{WB-I.1, 2002} (\$)	12000
	η	0,91		
	P_{real} (kW)	84,85		
B-I.2	P (kW)	0,480	PC_{WB-I.2, 2002} (\$)	360
	η	0,80		
	P_{real} (kW)	0,600		
			PC_{WB-I.1, 2023} (\$)	24.401
			PC_{WB-I.2, 2023} (\$)	732

Table 6.6. Purchased Equipment Cost for Common Plant Equipment—Cont'd

Equipment	Units for Size, S	S_{Lower}	S_{Upper}	a	b	n	Note
<i>Exchangers</i>							
U-tube shell and tube	area, m ²	10.0	1,000.0	10,000	88	1.0	
Floating head shell and tube	area, m ²	10.0	1,000.0	11,000	115	1.0	
Double pipe	area, m ²	1.0	80.0	500	1,100	1.0	
Thermosyihon reboiler	area, m ²	10.0	500.0	13,000	95	1.0	
U-tube Kettle reboiler	area, m ²	10.0	500.0	14,000	83	1.0	
Plate and frame	area, m ²	1.0	180.0	1,100	850	0.4	3
<i>Filters</i>							
Plate and frame	capacity, m ³	0.4	1.4	76,000	54,000	0.5	
Vacuum drum	area, m ²	10.0	180.0	-45,000	56,000	0.3	
<i>Furnaces</i>							
Cylindrical	duty, MW	0.2	60.0	53,000	69,000	0.8	
Box	duty, MW	30.0	120.0	7,000	71,000	0.8	
<i>Packings</i>							
304 ss Raschig rings	m ³			0	3,700	1.0	
Ceramic intalox saddles	m ³			0	930	1.0	
304 ss Pall rings	m ³			0	4,000	1.0	
PVC structured packing	m ³			0	250	1.0	
304 ss structured packing	m ³			0	3,200	1.0	4
<i>Pressure vessels</i>							
Vertical, cs	shell mass, kg	150.0	69,200.0	-400	230	0.6	5
Horizontal, cs	shell mass, kg	250.0	69,200.0	-2,500	200	0.6	
Vertical, 304 ss	shell mass, kg	90.0	124,200.0	-10,000	600	0.6	5
Horizontal, 304 ss	shell mass, kg	170.0	114,000.0	-15,000	560	0.6	
<i>Pumps and drivers</i>							
Single-stage centrifugal	flow Liters/s	0.2	500.0	3,300	48	1.2	
Explosion-proof motor	power, kW	1.0	2,500.0	920	600	0.7	
Condensing steam turbine	power, kW	100.0	20,000.0	-19,000	820	0.8	
<i>Reactors</i>							
Jacketed, agitated	volume, m ³	0.5	100.0	14,000	15,400	0.7	
Jacketed, agitated, glass-lined	volume, m ³	0.5	25.0	13,000	34,000	0.5	
<i>Tanks</i>							
Floating roof	capacity, m ³	100.0	10,000.0	53,000	2,400	0.6	
Cone roof	capacity, m ³	10.0	4,000.0	5,700	700	0.7	
<i>Trays</i>							
Sieve trays	diameter, m	0.5	5.0	100	120	2.0	6
Valve trays	diameter, m	0.5	5.0	130	146	2.0	6
Bubble cap trays	diameter, m	0.5	5.0	200	240	2.0	6
<i>Utilities</i>							
Cooling tower & pumps	flow liters/s	100.0	10,000.0	61,000	650	0.9	7
Packaged mechanical refrigerator	evaporator duty, kW	50.0	1,500.0	4,900	720	0.9	
Water ion exchange plant	flow m ³ /h	1.0	50.0	6,200	4,300	0.7	

Fig. I.34. Estimación de costes de diferentes equipos. Gráfica obtenida de Towler y Sinnott (2008).

I.B.4.8 Depósito de almacenamiento de piel de naranja

La estimación de costes del tanque de almacenamiento de materia prima se hace recurriendo de nuevo a la gráfica de la Fig. I.30. Puesto que se trata de un depósito horizontal.

Los datos de diseño necesarios para hacer la estimación de costes son la longitud y diámetro del depósito, así como presión de diseño y material de construcción. El resultado se muestra en la Tabla I.44. Al no haber problemas de corrosión, el material de construcción será acero al carbono (CS).

Tabla I.44. Coste del depósito de materias primas T-I.2.

L_{T-I.2} (m)	5,304	PC₂₀₀₂ (\$)	9.000
D_{T-I.2} (m)	1,768		
p_{diseño} (kPa)	101,15	F_p	1
Material de construcción	CS	F_M	1
		PC_{T-I.1,2002} (\$)	9.000
		PC_{T-I.1,2023} (\$)	18.301



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**ÁREA II: SÍNTESIS DEL ÓXIDO DE
LIMONENO**

por

Marta Noval Rodríguez

Oviedo, Julio de 2023

ÍNDICE

II.1 INTRODUCCIÓN	156
II.2 DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO	158
II.3 DISEÑO DEL PROCESO	160
II.3.1 REACTOR DE SÍNTESIS	161
II.3.2.1 Condiciones de operación.	161
II.3.1.2 Cinética de la reacción. Epoxidación del D-limoneno.	162
II.3.1.3 Selección del tipo de reactor.	164
II.3.1.4 Dimensionado del reactor.	165
II.3.1.5 Agitación.	167
II.3.1.6 Sistema de refrigeración con encamisado.	169
II.3.2 EQUIPOS AUXILIARES	170
II.3.2.1 Válvula de expansión V-II.1	170
II.3.2.2 Tanques de almacenamiento T-II.1/T-II.2	171
II.3.2.3 Sistemas de impulsión. Bombas B-II.1 y B-II.2	172
II.3.2.4 Filtro y regeneración del catalizador.	173
II.4 DISEÑO MECÁNICO	175
II.5 ANÁLISIS DE COSTES	178
II.6 BIBLIOGRAFÍA	181
II.7 ANEXOS	184
II.7.A SÍMBOLOS	185
II.7.B CÁLCULOS	187
II.7.B.1 Cinética de la reacción.	187
II.7.B.2 Diseño y dimensionado del reactor.	188
II.7.B.3 Agitación.	191
II.7.B.4 Sistema de refrigeración con encamisado.	195
II.7.B.5 Tanques de almacenamiento.	197
II.7.B.6 Sistemas de impulsión.	197
II.7.B.7 Diseño mecánico	201
II.7.C COSTES	206
II.7.D OTROS	210
II.7.E CONCLUSIONES	211

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla II. 1. Parámetros obtenidos en el proceso de dimensionado del reactor.	166
	168
Tabla II. 2 Cálculos relativos al diseño de la agitación del reactor R-II.1.	
Tabla II. 3. Parámetros implicados en el diseño del encamisado del reactor R-II.1.	169
Tabla II. 4 Diseño de la válvula de expansión V-II.1.	170
Tabla II. 5. Dimensiones de los tanques de almacenamiento de materias primas.	172
Tabla II. 6 Parámetros característicos de las bombas seleccionadas.	172
Tabla II. 7. Dimensionado de la tubería de entrada y salida al reactor.	173
Tabla II. 8. Parámetros del diseño mecánico del equipo según código ASME.	177
Tabla II. 9. Costes de adquisición de los equipos del Área II.	179
Tabla II. 10. Constantes relativas a los equilibrios de adsorción.	188
Tabla II. 11. Valores de las constantes involucradas en la ecuación cinética.	188
Tabla II. 12 Flujos molares correspondientes a la corriente 15.	189
Tabla II. 13 Concentraciones finales de los compuestos implicados en la reacción de epoxidación descrita.	189
Tabla II. 14. Concentraciones, densidad y peso molecular de los diferentes compuestos.	190
Tabla II. 15. Dimensionado del reactor.	191
Tabla II. 16. Cálculo de la velocidad de sedimentación de las partículas de catalizador.	192
Tabla II. 17. Valores numéricos de los factores de forma.	192
Tabla II. 18. Parámetros asociados a la agitación del reactor.	194
Tabla II. 19. Constantes implicadas en el cálculo de c_p para los diferentes compuestos.	195
Tabla II. 20. Cálculo de las entalpías de formación y reacción a la temperatura de operación.	196
Tabla II. 21. Longitud equivalente en función de los distintos accesorios (Towler y Sinnott, 2008).	200

Tabla II. 22. Cálculos detallados relativos al diseño de las bombas.	200
Tabla II. 23. Resultados obtenidos a partir de los dos métodos considerados para el cálculo de la tensión máxima de trabajo admisible, S.	203
Tabla II. 24 Parámetros de diseño para el cálculo del espesor de cuerpo y cabezales del equipo según el código ASME.	204
Tabla II. 25. Parámetros considerados y resultados obtenidos para el diseño mecánico del reactor de epoxidación.	205
Tabla II. 26. Características de las válvulas de aguja seleccionadas.	208
Tabla II. 27. Características de los caudalímetros seleccionados.	208
Tabla II. 28 Catálogo de tuberías.	210

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. II. 1. Diagrama de flujo relativo al Área II del proceso.	159
Fig. II. 2. Agitador tipo turbina de palas inclinadas (Towler y Sinnott, 2008).	168
Fig. II. 3. Factores de forma para el dimensionado de la turbina (Peters <i>et al.</i> , 2003)	168
Fig. II. 4. Rango de velocidades típicas para los diferentes tipos de agitadores (Soares, 2002).	193
Fig. II. 5 Valor de la constante K_T en función del tipo de agitador.	194
Fig. II. 6 Diagrama de Moody. Obtención del factor de fricción- f (Towler y Sinnott, 2008)	198
Fig. II. 7 Cálculo del diámetro óptimo (Peters <i>et al.</i> , 2003).	199
Fig. II. 8. Ajuste polinómico de la tensión máxima de trabajo (S) en función de la temperatura.	203
Fig. II. 9. Análisis de costes del reactor con agitación y encamisado (Peters <i>et al.</i> , 2003).	206
Fig. II. 10 Análisis de costes para los tanques de almacenamiento.	207
Fig. II. 11. Válvula de expansión.	209
Fig. II. 12 Coste asociado al catalizador PW-Amberlita IRA 900.	209

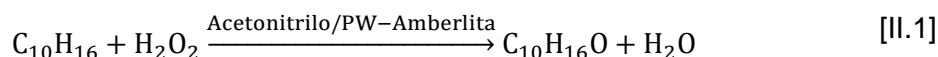
II.1. INTRODUCCIÓN

En esta segunda área del proceso se desarrolla la etapa correspondiente a la síntesis de óxido de limoneno a partir del D-limoneno obtenido en la etapa I, y su posterior purificación.

La síntesis de óxido de limoneno se lleva a cabo mediante la reacción de epoxidación caracterizada en la Ecuación II.1. Se ha decidido emplear H_2O_2 como agente oxidante, ya que, aunque existen otras alternativas, esta resulta ser la más sostenible para el medio ambiente, generándose H_2O como único subproducto de reacción y, además, consiguiéndose conversiones de limoneno superiores al 80% en condiciones de operación suaves.

Asimismo, será necesario acudir a un disolvente debido a la baja solubilidad del peróxido en limoneno. El disolvente utilizado será acetonitrilo, ya que este facilitará la mezcla entre ambos componentes, y permitirá que se lleve a cabo la reacción de manera efectiva.

En cuanto al catalizador, se emplea PW-Amberlita, obtenido por inmovilización del complejo $[\text{PO}_4[\text{WO}(\text{O}_2)_2]_4]^{3-}$ (PW) en una resina de intercambio iónico Amberlita IRA 900. El uso de este catalizador junto con el resto de los reactivos previamente descritos permitirá rendimientos del epóxido superiores al 70%.



La reacción estudiada es exotérmica ($\Delta H < 0$), por lo que se deben adoptar las medidas de seguridad adecuadas para evitar situaciones de peligro que puedan desencadenar en accidentes. Además, el uso de H_2O_2 como agente oxidante en contacto con materia orgánica, puede causar una combustión espontánea e incluso riesgo de explosión.

Considerando lo mencionado anteriormente, una de las decisiones más importantes en cuanto al diseño del proceso, será seleccionar el reactor más apropiado tanto para llevar a cabo la reacción, como para garantizar la máxima seguridad de este, traduciéndose esta seguridad en un buen control de la temperatura, ya que la elección del reactor tiene un impacto directo en la gestión de los riesgos asociados al proceso.

Una vez seleccionado el reactor apropiado, se realiza un cálculo detallado de las dimensiones de este, adecuadas a los caudales tratados en el proceso y a los resultados finales deseados. Además, se contempla el diseño mecánico del equipo principal, así como el dimensionado de los equipos auxiliares necesarios para garantizar un proceso de producción óptimo y seguro, junto con el análisis de costes relativo a esta área del proyecto.

II.2. DIAGRAMA DE FLUJO

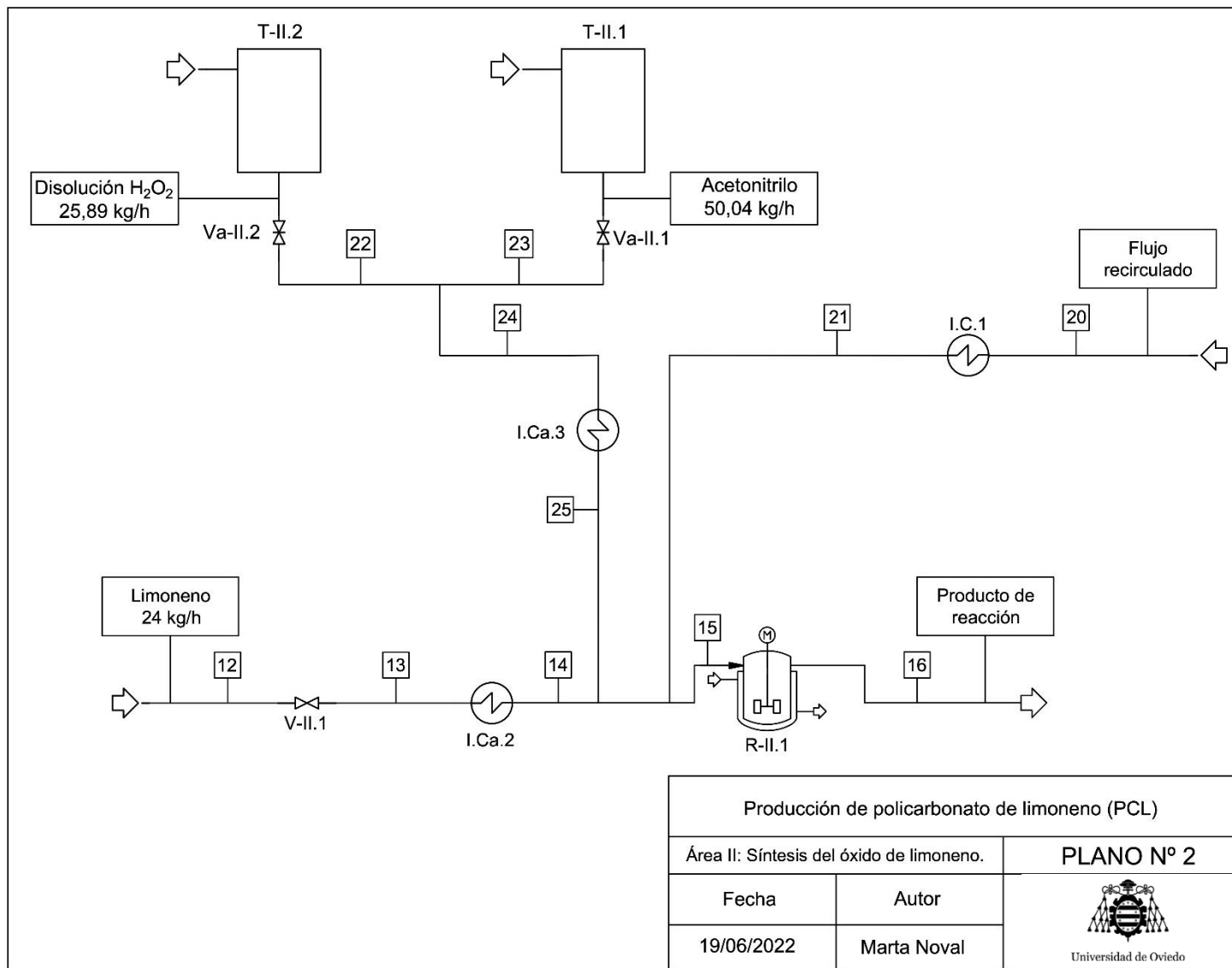


Fig. II. 1. Diagrama de flujo relativo al Área II del proceso.

II.3. DISEÑO DEL PROCESO

II.3.1 REACTOR DE SÍNTESIS

II.3.2.1 Condiciones de operación.

Tal y como se facilita en la bibliografía localizada, se realiza un estudio previo de las condiciones de operación óptimas para el sistema tratado, pudiendo posteriormente caracterizar de forma óptima el reactor empleado para llevar a cabo la síntesis de óxido de limoneno.

Para ello, se baraja operar de dos formas diferentes, bien manteniendo la temperatura constante a lo largo de toda la reacción, o bien trabajando en condiciones no isotérmicas dentro del intervalo comprendido entre 23 y 50 °C.

Se toman estas temperaturas límite puesto que trabajando a menos de 23°C se obtienen velocidades de reacción muy lentas y conversiones bajas de limoneno, y, además, no es recomendable llevar a cabo esta reacción a temperaturas por debajo de la temperatura ambiente. Por otro lado, tampoco se debe trabajar a temperaturas superiores a 50°C, ya que se podría reducir la selectividad del limoneno como consecuencia de la aparición de reacciones de isomerización no deseadas. A esta temperatura (50°C), también se puede dar la descomposición del peróxido en agua y oxígeno antes de lo previsto, reduciéndose así los rendimientos del epóxido. Por último, se conoce que la resina del catalizador empleado en el proceso se podría descomponer a temperaturas superiores a 60°C (Zapata *et al.*, 2010).

La elección de las condiciones de operación se encuentra también supeditada a los costes que conlleve la implementación de estas. Una vez valoradas ambas opciones, se ha decidido trabajar a una temperatura constante de 33°C. Se ha tomado esta decisión ya que llevar a cabo la experimentación necesaria para hallar la cinética de la reacción no entra dentro de lo abarcado en este proyecto y los datos de los que se dispone se encuentran calculados a esta temperatura, comprendida dentro del intervalo admisible de trabajo. Además, la conversión obtenida en las condiciones citadas anteriormente resulta suficiente para los requerimientos del proceso.

Asimismo, a pesar de que en este tipo de reacciones en las que se libera calor es recomendable trabajar en condiciones no isotérmicas para favorecer el aumento de temperatura en la superficie del catalizador y, por tanto, un aumento de la velocidad de reacción en dicha superficie, se ha optado por trabajar manteniendo la temperatura del proceso constante para evitar aumentos bruscos de temperatura por encima de los 50°C, donde tienen lugar consecuencias no deseadas como las comentadas anteriormente.

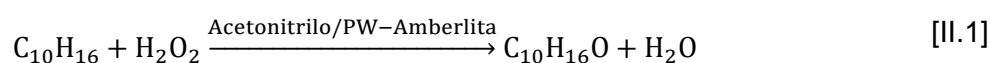
Por último, cabe destacar que, el proceso descrito se encuentra actualmente en desarrollo y no se ha implementado a escala industrial, por lo que apenas existen fuentes bibliográficas que proporcionen información extensa y detallada sobre el mismo.

Es por ello, por lo que, como ya se ha comentado con anterioridad, las condiciones de operación elegidas se han ajustado a los datos disponibles en la bibliografía recopilada, y se corresponden con una temperatura constante de 33°C y presión de 1 atmósfera (Arenas y Zapata, 2016).

II.3.1.2 Cinética de la reacción. Epoxidación del d-limoneno.

El sistema objeto de estudio se trata de un sistema bifásico y heterogéneo, donde existe una fase líquida junto con un catalizador sólido. Para dicho sistema se acude a un mecanismo de reacción basado en el formalismo de Langmuir-Hinshelwood, que contempla que la etapa más lenta de las implicadas en una reacción catalizada es la adsorción de reactivos y disolvente sobre una superficie catalítica uniforme (Villa *et al.*, 2002).

Cuando se trabaja con una concentración de acetonitrilo inferior al 82% (p/p), el sistema pasa a ser trifásico, compuesto por dos fases líquidas, peróxido de hidrógeno acuoso y acetonitrilo; y una fase sólida, correspondiéndose esta última con el catalizador, PW-Amberlita (Barrera *et al.*, 2007). Se obtiene el modelo cinético de la reacción en condiciones trifásicas a partir de parámetros de adsorción obtenidos en experimentos independientes (Barrera *et al.*, 2007). Será necesario modelar tanto la epoxidación del D-limoneno (Ecuación II.1) como la descomposición del peróxido de hidrógeno (Ecuación II.2).



En el modelo propuesto se consideró un factor de desactivación para el catalizador de primer orden (Barrera *et al.*, 2007), resultando la siguiente ecuación de diseño (Ecuación II.3) para la epoxidación del limoneno en PW-Amberlita.

$$\frac{dX}{dt} = k[C_{10}H_{16}]_0^{a+b}(1-X)^a(2-X)^b \frac{W}{N_{0,l}} [a^* + (1-a^*) \cdot \exp(-k_d t)] \quad \text{[II.3]}$$

Para la determinación de los parámetros cinéticos, se acude inicialmente a un modelo pseudo-homogéneo del sistema trifásico (Barrera *et al.*, 2006). Este modelo describe adecuadamente el sistema de trabajo si la experimentación se realiza en períodos de tiempo

cortos, pero no tiene en cuenta la modificación que se introduce con el término de desactivación del catalizador, ya que no describe los fenómenos de adsorción que tienen lugar en la superficie de este. (Barrera *et al.*, 2007). Por este motivo, es necesario que el modelo a seguir se base en la adsorción y describa correctamente la epoxidación heterogénea del D-limoneno en condiciones trifásicas empleando PW-Amberlita como catalizador.

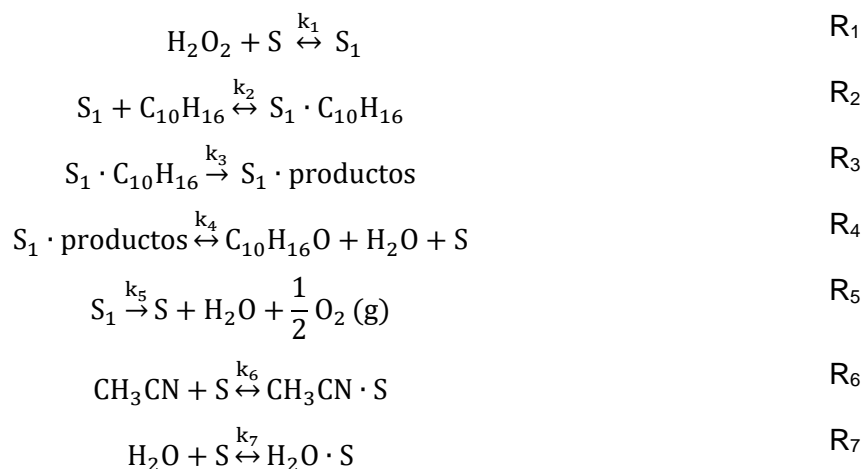
Para llegar a la ecuación de velocidad que se empleará en cálculos posteriores, se acude a dos modelos de estudio, el de *Song y cols.* (Song *et al.*, 1998), que obtiene constantes de equilibrios de adsorción y propone 5 parámetros ajustables: la constante de velocidad de reacción específica y 4 constantes de equilibrio de adsorción; y el de *Pöpken y cols.* que sugiere modificar ligeramente el modelo anterior, ya que no considera correcto estimar un número constante de moles adsorbidos, sino una masa adsorbida por gramo de catalizador (Pöpken *et al.*, 2000).

El mecanismo que se sigue para llegar a la ecuación de velocidad final incluye, además de la reacción de epoxidación y la descomposición del peróxido de hidrógeno en la superficie catalítica previamente descritas en las ecuaciones II.1 y II.2, la desorción de los productos de la superficie catalítica y adsorción de agua en el catalizador.

Dicho mecanismo se compone de una serie de etapas o reacciones elementales, que se describen a continuación (Barrera *et al.*, 2009).

- i. El anión peroxo-PW, $[PW_4O_{16}]^{3-}$ o $[PW_4O_{20}]^{3-}$, S, reacciona con el peróxido de hidrógeno formando el complejo $[PO_4[WO(O_2)_2]_4]^{3-}$, S_1 (Reacción R_1)
- ii. El d-limoneno difunde en la PW-Amberlita y se adsorbe en el complejo S_1 (Reacción R_2)
- iii. En esta etapa tiene lugar una reacción entre el d-limoneno y S_1 donde se produce la transferencia de un átomo de oxígeno (Reacción R_3)
- iv. Se produce una desorción de los productos y se regenera el centro activo del catalizador, el anión peroxo-PW, S (Reacción R_4)
- v. En las condiciones de operación descritas anteriormente (sistema trifásico, 33°C), se produce, debido a efectos catalíticos, la descomposición del peróxido en agua y oxígeno molecular (Reacción R_5)
- vi. Se observa que, tanto el agua como el acetonitrilo pueden adsorberse en el catalizador, aunque no se produce ningún tipo de interacción entre estos y los centros activos del mismo, ya que ninguna de las velocidades de reacción principales (II.1 y II.2) disminuye con la concentración de agua o acetonitrilo. Además, la diferencia de tamaño molecular y características químicas entre limoneno y estos dos compuestos,

reduce la competencia por los centros activos. Por todo ello, se asume que, tanto agua como acetonitrilo se adsorben en S, pero no en S₁ (Reacciones R₆ y R₇)



Considerando la teoría del estado pseudo-estacionario, y suponiendo que la etapa controlante se corresponde con la reacción que tiene lugar en la superficie catalítica, la ecuación final de la velocidad se define a continuación (Barrera *et al.*, 2009).

$$\begin{aligned}
 &(-r_L)_W \\
 &= \frac{k_3 K_H K_L C_T C_H C_L}{1 + K_H C_H + K_H K_L C_H C_L + \frac{k_3 K_H K_L}{k_4} C_H C_L + K_E C_W C_E + K_S C_S + K_W C_W} [=] \left(\frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{g cat}} \right) \quad [\text{II.4}]
 \end{aligned}$$

II.3.1.3 Selección del tipo de reactor.

Tal y como se ha comentado anteriormente, la decisión del reactor empleado para llevar a cabo este proceso a escala industrial resulta de elevada importancia. Cabe destacar nuevamente que, al no haberse implementado a escala industrial hasta el momento, no existen evidencias sobre cuál es el reactor más idóneo para el proceso.

Cuando se elige un equipo de contacto entre varias fases, como es este caso, existe un número elevado de reactores que se puedan adecuar de una u otra forma al proceso. Se ha realizado una selección de los equipos que más se adecúan a las condiciones de operación y las características de la reacción, permitiendo trabajar siempre de forma segura, y, finalmente se ha tomado una decisión en base a las ventajas e inconvenientes de cada uno de ellos.

Se contemplará el proceso trabajando en continuo, ya que en estas condiciones se abaratan los costes de producción frente a la operación en discontinuo o por lotes. Además,

para la producción a escala industrial se recomienda trabajar en continuo (Towler y Sinnott, 2008).

Una vez tomada esta decisión, se barajan 2 tipos de reactores para llevar a cabo el proceso, teniendo en cuenta que se trabaja en fase líquida y en presencia de un catalizador sólido dividido en finas partículas en cuya superficie tiene lugar la reacción.

- Reactor continuo de tanque agitado. Este tipo de reactores son los más adecuados cuando se trabaja con reacciones exotérmicas, ya que la agitación facilita y aumenta la transmisión de calor. Además, se utilizan tanto para llevar a cabo reacciones homogéneas como heterogéneas en las cuales existen en suspensión partículas sólidas de catalizador finas.
- Reactor de lecho fijo. Existen dos tipos de reactores de lecho fijo en función del papel que desempeñen las partículas que conformen el lecho: bien trabajando como reactivo, bien como catalizador en la reacción. En este caso se contempla la segunda opción. Este tipo de equipos son empleados mayoritariamente en reacciones en fase líquida en presencia de gases, y, aunque no es lo habitual, podría ajustarse el proceso descrito a un reactor de lecho fijo por el que circula una única corriente líquida. Cuando se trabaja con grandes caudales, que implican reactores de grandes dimensiones, la transmisión de calor no resulta demasiado efectiva, por lo que para aquellos procesos en los que sea necesaria una velocidad de transferencia de calor elevada, estos reactores no son los más recomendados (Towler y Sinnott, 2008).

Cabe destacar que, cuando se trabaja con reacciones exotérmicas y a temperatura constante, es necesario establecer un buen sistema de refrigeración que se encargue de eliminar la energía generada en el proceso, así como una distribución axial efectiva del catalizador en suspensión (Conesa y Font, 2001).

Se ha tomado la decisión de diseñar un reactor continuo de tanque agitado con refrigeración externa, garantizando, tanto la eliminación de energía liberada por la reacción previamente comentada manteniendo la operación en condiciones isotérmicas, como el diseño de una agitación axial que distribuya las partículas de catalizador de forma efectiva.

II.3.1.4 Dimensionado del reactor.

Al tratarse de un reactor heterogéneo, la variable de diseño que se emplea para su dimensionado es la masa de catalizador. Para calcularla, se acude a la Ecuación II.5, que se corresponde con la ecuación de diseño de un reactor continuo de tanque agitado expresada en función de la masa de catalizador y donde la velocidad de reacción también se encuentra referida a este.

$$\frac{W}{F_{L0}} = \frac{(X_{Lf} - X_{L0})}{(-r_L)_W} \quad \text{[II.5]}$$

Para el cálculo de la masa de catalizador requerida, se ha fijado una conversión final de limoneno del 85%, ya que en las condiciones de operación seleccionadas y empleando tanto H₂O₂ como agente oxidante, como acetonitrilo como disolvente en presencia del catalizador PW-Amberlita, se obtienen conversiones superiores al 80%, llegando a alcanzarse en ocasiones conversiones de hasta un 90% (Barrera *et al.*, 2009). Por este motivo y por los requerimientos del proceso en etapas posteriores, se ha fijado el valor de la conversión en una media entre ambos.

Una vez calculada la masa de catalizador, se debe calcular el volumen de mezcla reaccionante. Para ello, se establece un porcentaje (p/p) del catalizador en el reactor. Este porcentaje ha de ser lo suficientemente pequeño como para que se produzca una agitación efectiva sin que se generen daños ni en el reactor, ni en las partículas de catalizador, pudiendo llegar a producirse en este último caso la degradación del mismo, perdiéndose así eficacia en la reacción. Según fuentes experimentadas, se estima que ese porcentaje (p/p) no ha de sobrepasar el 10%, y, en este caso se ha considerado, de acuerdo información disponible en la bibliografía localizada, que las partículas de catalizador para este sistema constituyen un 2,15% (p/p) del contenido total del reactor (Zapata *et al.*, 2010).

Con esa proporción, se obtiene el volumen de la mezcla de reacción y, partir de ese volumen, se calcula el diámetro del reactor, que coincide, a su vez, con la altura del líquido, al encontrarse el sistema trabajando a presiones moderadas (Walas, 2012).

Para hallar el volumen final del reactor, se considera que la mezcla reaccionante ocupa un 75% del volumen total, de forma que se deja un 25% de espacio libre por razones de seguridad y para garantizar una agitación óptima (Walas, 2012). En la Tabla II. 1 se recogen los resultados obtenidos.

Tabla II. 1. Parámetros obtenidos en el proceso de dimensionado del reactor.

Masa catalizador, W (g)	780,97
Masa líquido + catalizador (g)	36159,04
Masa líquido (g)	35378,06
Densidad líquido (g/L)	853,97
Volumen líquido (L)	41,43
Volumen catalizador (L)	0,35

Tabla II.1. Parámetros obtenidos en el proceso de dimensionado del reactor. Continuación.

Volumen total (L)*	41,78
Diámetro (m)	0,38
h reactor (m)	0,50
Volumen reactor (L)	55,70

*Se ha considerado como volumen "ideal" de mezcla reaccionante, la suma del volumen del líquido y del catalizador, aunque este último podría despreciarse, ya que, además de ser muy inferior al que ocupa la mezcla líquida, al tratarse de partículas de catalizador con cierta porosidad, la mezcla líquida podría difundir hacia el interior de los poros, modificando así el volumen total de masa reaccionante.

Realizados los cálculos, se observa que el tamaño del reactor resulta ser bastante pequeño como para una producción a escala industrial. Esto es debido a que, a pesar de que en el proceso descrito se trata una cantidad de materia prima (cáscaras de naranja) bastante elevada, como son 554,8 kg/h, la cantidad de limoneno extraíble de esa materia prima es de tan solo 23,57 kg/h. Para tratar este flujo, son suficientes equipos de menor capacidad, como los empleados a escala de planta piloto o incluso en ocasiones, a escala de laboratorio.

Los detalles de cálculo relativos a este apartado se facilitan en el apartado II.7.B.2.

II.3.1.5 Agitación.

Una vez dimensionado el reactor, se pasa a calcular la velocidad de agitación óptima, parámetro de elevada importancia en este tipo de reactores continuos. Para ello, es necesario conocer previamente la velocidad de sedimentación de las partículas, ya que la agitación ha de ser superior a dicha velocidad para garantizar que las partículas se encuentren en suspensión.

La velocidad de sedimentación de las partículas de catalizador se define a partir de la Ley de Stokes de la sedimentación (Ecuación II.6).

$$u_s = \frac{g}{18} \cdot \frac{(\rho_p - \rho)}{\mu} \cdot d_p^2 \quad [\text{II.6}]$$

A continuación, se procede a seleccionar el agitador adecuado. La selección del agitador va a depender de la viscosidad, la capacidad del reactor y el tipo de mezcla requerida. En este caso se trabaja con una viscosidad de 0,96 cp (cálculos en apartado II.7.B.3) y se precisa de mezcla axial. Con esos requerimientos se selecciona un agitador de tipo turbina de

palas inclinadas (véase Fig. II. 2) centrado, que permitirá flujo tanto radial como axial y además no supondrá una gran inversión económica (Towler y Sinnott, 2008).

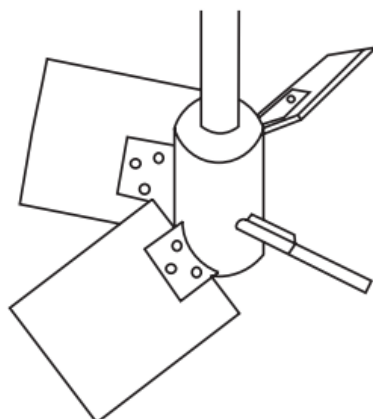


Fig. II. 2. Agitador tipo turbina de palas inclinadas (Towler y Sinnott, 2008).

Una vez seleccionado el agitador adecuado, se procede al dimensionado del mismo. Para ello se acude a los factores de forma de la Fig. II. 3, que serán empleados para el cálculo de la potencia de agitación requerida.

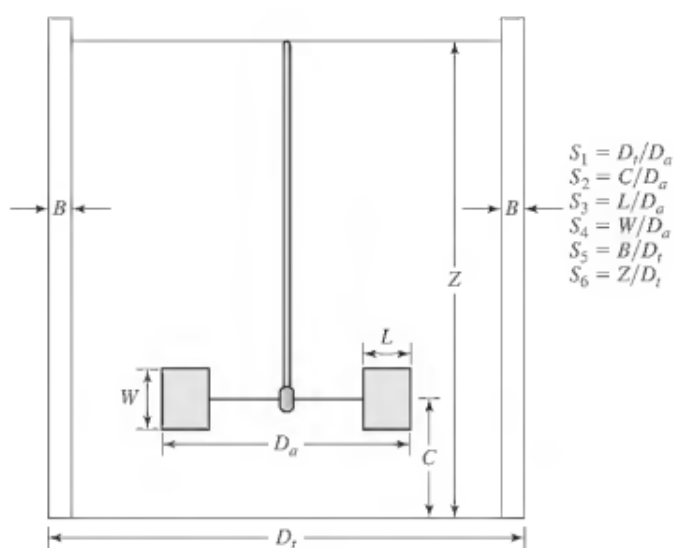


Fig. II. 3. Factores de forma para el dimensionado de la turbina (Peters *et al.*, 2003)

Tabla II. 2 Cálculos relativos al diseño de la agitación del reactor R-II.1

Velocidad de sedimentación de las partículas de catalizador	
u_s (m/s)	0,55
Dimensiones y potencia del agitador seleccionado	
Diámetro, D_a (m)	0,13
Altura del eje, C (m)	0,13

Tabla II.2. Cálculos relativos al diseño de la agitación del reactor R-II.1. Continuación.

Ancho de las palas, L (m)	0,03
Altura de las palas, W (m)	0,02
Altura del líquido, Z (m)	0,38
Ancho de los deflectores, B (m)	0,04
Altura de los deflectores (m)*	0,45
Número de deflectores	4
Velocidad de agitación (rps)	10,16
Potencia de agitación (W)	35,18

*El alto total de los deflectores se calcula como un 90% de la altura total del reactor.

En el apartado II.7.B.3 se facilitan el resto de los cálculos.

II.3.1.6 Sistema de refrigeración con encamisado.

Como se ha comentado con anterioridad, la reacción estudiada se corresponde con una reacción exotérmica, por lo que se desprende energía en forma de calor. En este caso, resulta necesario mantener la temperatura constante durante el transcurso la reacción, ya que se trabaja en condiciones isotérmicas. Para ello, se decide colocar un sistema de refrigeración mediante un encamisado que garantice esos requerimientos, desarrollándose así el proceso de forma óptima.

A continuación (Tabla II. 3), se recoge una tabla resumen de los parámetros calculados para el diseño de dicho encamisado, así como la selección del fluido refrigerante más adecuado. En el apartado II.7.B.4 se facilitan el desarrollo de los cálculos.

Tabla II. 3. Parámetros implicados en el diseño del encamisado del reactor R-II.1.

Q (kJ/h)	-58663
Q (W)	-16295
U (W/m²°C)	350
A (m²)	0,71
T_{a1} (°C)	-33
T_{a2} (°C)	-32
T (°C)	33
ΔT_{ml}	-65,50
λ (kJ/kg)	1370,50
m_c (kg/h)	43
Refrigerante*	NH ₃ criogénico

*Se ha tenido que acudir a NH_3 criogénico como fluido refrigerante ya que, a pesar de que la temperatura de operación es moderada y, en un principio se podría acudir a agua de red para la refrigeración, al existir un área de intercambio tan pequeña, resulta necesario un gradiente de temperatura ΔT_{ml} muy elevado para retirar el calor generado por la reacción. Este gradiente no se puede conseguir con agua, por lo que se ha decidido emplear amoníaco criogénico.

II.3.2 EQUIPOS AUXILIARES

II.3.2.1 Válvula de expansión V-II.1.

Resulta necesario instalar una válvula de expansión isoentálpica a la salida del separador gas-líquido perteneciente al Área I para bajar la presión de 57,15 bar a la correspondiente con la presión de operación en el reactor, 1,013 bar. Se diseñará la válvula suponiendo que sigue un comportamiento lineal y que se encuentra completamente abierta. Para ello, será necesario determinar el coeficiente de flujo o dimensionamiento de la válvula, C_v , a partir de la ecuación siguiente (Masoneilan, 1944)

$$Q = C_v \cdot \sqrt{\frac{\Delta P}{\left(\frac{\rho}{\rho_w}\right)}} \quad [\text{II.7}]$$

Una vez calculado el parámetro C_v , se procede a determinar el diámetro óptimo del orificio o tubería en la que se va a colocar dicha válvula, y, acudiendo a la tabla de catálogos (Apartado II.7.D), el diámetro normalizado de la misma. Los resultados se recogen en la tabla a continuación (Tabla II. 4)

Tabla II. 4 Diseño de la válvula de expansión V-II.1

Cálculo de C_v	
Q (m ³ /h)	0,03
ρ (kg/m ³)	844,5
ρ_w (kg/m ³)	998,2
ρ/ρ_w	0,85
ΔP	56,14
C_v	3,43E-03
Q (m ³ /s)	7,75E-06
$U_{típica}$ en tuberías (m/s)	2,97

Tabla II.4. Dimensionado de la tubería. Continuación

Sección de tubería (m ²)	2,61E-06
Diámetro (m)	1,82E-03
Di ópt (mm)	4,37
D normalizado (mm)*	6

*El diámetro normalizado de la tubería se ha calculado de forma análoga al apartado II.7.B.6.

Realizados todos los cálculos de los parámetros relativos al diseño de la válvula V-II.1, se observa que, tanto el coeficiente de dimensionado de la válvula, como el diámetro normalizado de la tubería, presentan valores muy bajos. Esto es debido a la poca cantidad de caudal que circula por el sistema, ya que, como se ha comentado con anterioridad, a pesar de partir de un flujo elevado de materia prima inicial, como es la cáscara de naranja; la cantidad de materia prima extraída para el proceso contemplado en esta área es muy inferior.

II.3.2.2 Tanques de almacenamiento T-II.1/T-II.2.

Se precisa de dos tanques para almacenar las materias primas auxiliares necesarias para llevar a cabo la reacción de epoxidación. En este caso dichas materias primas se corresponden con el disolvente, acetonitrilo, y el agente oxidante, una disolución de H₂O₂ al 30% (p/p).

Se ha considerado el diseño de los tanques de tal forma que garanticen una autonomía de materias primas correspondiente a la necesaria para 3 días. No se ha considerado un período de tiempo superior ya que, debido a la cercanía de la planta a la red de distribución, resulta una inversión innecesaria la disposición de unos tanques de mayores dimensiones.

Para el diseño de los equipos, se ha supuesto una geometría cilíndrica y una disposición vertical, con una relación óptima entre la altura y el diámetro (H/D) de 1,5. Además, se ha dejado un espacio superior libre del 10% por razones de seguridad (Walas, 2012). Con esas premisas y conocidos los caudales de alimentación y la autonomía requerida, se realiza el cálculo de las dimensiones de ambos tanques, recogido en el apartado II.7.B.5.

Los resultados obtenidos se recogen a continuación, Tabla II. 5.

Tabla II. 5. Dimensiones de los tanques de almacenamiento de materias primas.

	Caudal (m ³ /h)	Autonomía (h)	Volumen (m ³)	Diámetro (m)	Altura (m)
T-II.1 (Acetonitrilo)	0,064	72	5,09	1,57	2,62
T-II.2 (Disolución H ₂ O ₂)	0,024	72	1,89	1,13	1,88

II.3.2.3 Sistemas de impulsión. Bombas B-II.1 y B-II.2.

En esta parte del proceso, tras analizar los equipos presentes en él, resulta necesario instalar dos bombas para impulsar el fluido de trabajo, una a la salida de cada uno de los tanques de almacenamiento. La bomba B-II.1 se considerará a la salida del tanque de almacenamiento de acetonitrilo, y la bomba B-II.2 a la salida del tanque que contiene la disolución de peróxido de hidrógeno. Ambas serán bombas centrífugas de una sola etapa.

Los parámetros de diseño obtenidos se recogen a continuación, en la Tabla II. 6, y el cálculo detallado de los mismos se facilita en el apartado II.7.B.6.

Tabla II. 6 Parámetros característicos de las bombas seleccionadas.

Bomba	B-II.1	B-II.2
Q (m ³ /h)	0,06	0,02
Δz (m)	-0,50	-0,50
ΔP (Pa)	0	0
ΔP_f (kPa)	385,36	492,46
W (J/kg)	495,19	453
η	0,45	0,45
P (W)	15,30	7,24

Si se analizan los resultados obtenidos tras los cálculos, se puede observar que la potencia de bombeo necesaria es muy baja. Ante esta situación, se han analizado las posibles alternativas y se ha decidido impulsar ambos fluidos por gravedad, debido a la diferencia de alturas que existe entre ambos tanques y el reactor.

Para ello, se colocará en cada uno de los tanques una válvula de aguja (Va-II.1/Va-II.2) junto con un caudalímetro (C-II.1/C-II.2), de forma que se pueda regular con facilidad el flujo de trabajo deseado. La ventaja que presenta el manejo de caudales de trabajo tan bajos es el abaratamiento de los costes asociados a equipos auxiliares.

II.3.2.4 Filtro y regeneración del catalizador.

Como se ha comentado anteriormente, el reactor para llevar a cabo la epoxidación del limoneno se trata de un reactor heterogéneo en el que existen unas partículas sólidas en suspensión en un medio líquido. Estas partículas sólidas se corresponden con el catalizador, y poseen un diámetro de 830 μm .

Ante las múltiples posibilidades de que dichas partículas se escapen del reactor, como consecuencia tanto de la agitación, como del flujo continuo de fluido, desencadenando en la pérdida del catalizador, y, por tanto, el descenso de la eficacia de la reacción, e incluso la contaminación de equipos y corrientes anteriores y posteriores, se han barajado varias opciones para evitarlo.

De todas ellas, se ha seleccionado una opción económica y compatible con el trabajo en régimen continuo. Se trata de la instalación de dos rejillas o placas filtrantes, con un tamaño de poro inferior al tamaño de partícula, que haga que estas se queden retenidas en el seno del reactor. Se ha diseñado una agitación adecuada para que estas no se queden pegadas a dicha placa, pudiendo llegar a formarse tortas a medida que transcurre el tiempo.

Resulta necesario el cálculo del diámetro nominal de las tuberías de entrada y salida del reactor, para ajustar el filtro a dicho diámetro. Los cálculos realizados son análogos a los recogidos en el anexo II.7.B.6. A continuación, se muestra una tabla resumen con los resultados obtenidos.

Tabla II. 7. Dimensionado de la tubería de entrada y salida al reactor.

Q (m^3/h)	0,32
u (m/s)	2,96
Sección tubería (m^2)	3,01E-05
Diámetro óptimo (mm)	12
Diámetro normalizado (mm)	15

En cuanto a la desactivación del catalizador, esta se produce por la presencia de óxido de limoneno en el medio de reacción. Dado que la concentración de este compuesto dentro del reactor es mínima, se estima que se podrá trabajar sin mayor problema en régimen continuo para los ciclos de operación establecidos. Finalizado cada uno de los ciclos, se deberá extraer el catalizador y someterlo a una serie de lavados con disolventes para recuperar su actividad catalítica.

Uno de los motivos que lleva a calificar el material activo PW-Amberlita como óptimo para llevar a cabo la catálisis de esta reacción a gran escala, es el elevado porcentaje de recuperación de la actividad catalítica que posee al ser lavado con disolventes. Se puede acudir a 3 disolventes diferentes, etanol, acetona o tolueno, que recuperarán un 95, 97 ó 99% de la actividad catalítica respectivamente. Se ha decidido emplear tolueno, ya que, con él, se recupera el mayor porcentaje de actividad catalítica (Barrera *et al.*, 2009).

II.4. DISEÑO MECÁNICO

En esta sección se desarrolla el diseño mecánico del reactor de epoxidación R-II.1, siendo este el equipo más importante del proceso descrito. Para ello se acudirá al código ASME, estándar generado por una asociación profesional de ingenieros que posee el mismo nombre “*American Society of Mechanical Engineers*” y que regula las reglas de diseño, fabricación e inspección y pruebas en calderas y recipientes a presión (Peters *et al.*, 2003)

Será necesario determinar una serie de parámetros de acuerdo con el código ASME. Para ello, se debe partir de los datos específicos, tanto del reactor, como de las condiciones de operación. Los parámetros empleados, así como los resultados obtenidos se recogen en la Tabla II. 8.

Resulta de elevada importancia seleccionar el material de construcción de forma adecuada, asegurando así unas condiciones de operación óptimas y seguras. Para dicha selección, se debe prestar atención a las características de los compuestos implicados en la reacción. En este caso en concreto se trata de una reacción exotérmica ($\Delta H = -360,81 \text{ kJ/mol}$) donde se trabaja con compuestos corrosivos y altamente explosivos como el H_2O_2 , por lo que se selecciona el acero inoxidable tipo AISI 316 como material de construcción debido a su elevada resistencia frente a altas temperaturas y a que, gracias a su alto contenido en cromo, níquel y molibdeno, se convierte en material muy resistente a la corrosión (Peters *et al.*, 2003)

Los cálculos detallados de esta sección se recogen en el apartado II.7.B.7.

Tabla II. 8. Parámetros del diseño mecánico del equipo según código ASME.

DISEÑO MECÁNICO DEL EQUIPO		
Referencia	R-II.1	
Equipo	Reactor continuo de tanque agitado (CSTR)	
Función	Reacción de epoxidación del D-limoneno	
ESPECIFICACIONES		
Compuestos tratados	Reactivos	C ₁₀ H ₁₆
		H ₂ O ₂ (agente oxidante)
	Disolvente	CH ₃ CN
	Catalizador	PW-Amberlita
CONDICIONES DE OPERACIÓN		
Presión (kPa)	101,33	
Temperatura (°C)	33	
PARÁMETROS DE DISEÑO		
Temperatura (°C)	43	
Presión (kPa)	298,46	
Geometría	Cuerpo	Cilíndrica
	Cabezales	Toro esféricos
Volumen reactor (m³)	0,06	
Diámetro (m)	0,38	
Altura (m)	0,50	
Espesor (m)	9,40E-03	
Material de construcción	Tipo	Acero inoxidable Tipo 316
	Peso (kg)	79,78

II.5. ANÁLISIS DE COSTES

En este apartado se abordará la estimación de los costes de los equipos empleados en la síntesis del óxido de limoneno. Para ello, se acudirá tanto a gráficas en las que se relaciona el coste en función de las dimensiones y el material de construcción seleccionado, como a catálogos de las diferentes casas comerciales.

Como se ha comentado en los apartados anteriores, debido a la magnitud de los caudales con los que se trabaja en esta área del proceso, la estimación del coste de la mayor parte de los equipos involucrados en él se ha tenido que realizar acudiendo a catálogos comerciales disponibles en internet. Esto es debido a que resulta imposible acudir en muchos casos, tanto a gráficas como a ecuaciones, por no encontrarse estos equipos en el intervalo de dimensiones considerado en ellas.

Para aquellos costes calculados mediante gráficas, resulta imprescindible realizar una corrección de estos, ya que los datos obtenidos se corresponden al año 2002, y, debido a que dichos costes se encuentran sujetos a la inflación, resulta necesario actualizarlos. En este caso se llevará a cabo la actualización a partir del índice de costes anuales.

En la Ecuación II.8 se muestra el cálculo del coste actualizado, para el cual se emplean tanto el coste hallado para el año 2002, como el índice de costes, que se corresponde con la relación entre el CEPCI más actualizado y el correspondiente a dicho año 2002. Las siglas CEPCI hacen referencia a “*Chemical Engineering Plant Cost Indexes*” o índices de coste de las plantas de Ingeniería Química.

Se ha decidido emplear como valor de CEPCI actualizado, el último que ha publicado la revista “*Chemical Engineering*”, que se encarga de actualizar mensualmente los costes de las plantas de Ingeniería Química; este dato se corresponde con el calculado para el mes de abril del presente año y se corresponde con 803,4.

$$\text{Coste}_{\text{actualizado}} = \text{Coste}_{2002} \cdot \left(\frac{\text{CEPCI}_{2023}}{\text{CEPCI}_{2002}} \right) \quad [\text{II.8}]$$

Los resultados obtenidos se recogen en la Tabla II. 9.

Tabla II. 9. Costes de adquisición de los equipos del Área II.

EQUIPO	COSTE 2002 (\$)	COSTE 2023 (\$)	COSTE 2023* (€)
R-II.1	7000	14215,87	13078,60
T-II.1	47250	95957,15	88280,58
T-II.2	28500	57878,92	53248,60
Va-II.1	-	-	107,05

Tabla II.9. Costes de adquisición de los equipos. Continuación.			
Va-II.2	-	-	107,05
C-II.1	-	-	347,46
C-II.2	-	-	347,46
V-II.1	-	-	446,87
Catalizador	-	-	173,58
TOTAL			156137,26

*Una vez actualizado el precio en dólares, será necesario transformarlo en euros, multiplicándose por 0,92.

II.6. BIBLIOGRAFÍA

ARENAS, Y.A. y ZAPATA, R.B. Control simulado en Aspen Dynamics para la producción de epóxido de limoneno a escala piloto. *Redes de Ingeniería*, vol. 7 (2016), nº. 2, pp 127-137.

BARRERA ZAPATA, R., VILLA, A.L. y MONTES DE CORREA, C. Kinetic Modeling of Limonene Epoxidation over PW-Amberlite. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 48 (2009), nº 2, pp 1520-5045, ISSN 0888-5885.

BARRERA ZAPATA, R., VILLA, A.L. y MONTES DE CORREA, C. Limonene Epoxidation: Diffusion and Reaction over PW-Amberlite in a Triphasic System. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 45 (2006), nº. 13, pp 1520-5045, ISSN 0888-5885.

CONESA, J.A. y FONT, R.M., *Reactores heterogéneos*, 1ª. Edición, Universidad de Alicante. Servicio de publicaciones, 2001. ISBN 9788479086527.

Felder, R.M. y Rousseau, R.W., 2004. *Principios Elementales de los Procesos Químicos*, 3a. Edición, Limusa Wiley. ISBN 9681861698.

MILLS, A.F. Transferencia de Calor. Irwin, 1995. ISBN 84-8086-194-0.

National Institute of Standards and Technology (NIST,2023). En línea. Disponible en: <https://www.nist.gov/>. [consultado el 08/05/2023]

PETERS, M.S., TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., *Plant design and economics for chemical engineers*. McGraw-Hill, 2003. ISBN 9780072392661.

Plant Cost Index Beta (PCIB) - Chemical Engineering. [en línea], [s.f.]. Disponible en: <https://www.chemengonline.com/plant-cost-index-beta/>. [consultado el 18/06/2023].

PÖPKEN, T., GÖTZE, L. y GMEHLING, J. Reaction Kinetics and Chemical Equilibrium of Homogeneously and Heterogeneously Catalyzed Acetic Acid Esterification with Methanol and Methyl Acetate Hydrolysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 39 (2000), nº. 7, pp 1520-5045, ISSN 0888-5885.

SOARES, C., *Process engineering equipment handbook*. McGraw-Hill, 2002. ISBN 9780070596146.

SONG, W., VENIMADHAVAN, G., MANNING, J.M., MALONE, M.F. y DOHERTY, M.F. Measurement of Residue Curve Maps and Heterogeneous Kinetics in Methyl Acetate

Synthesis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 37 (1998), nº 5, pp 1520-5045, ISSN 0888-5885.

Tioga Pipe - Pipe Supply Company. En línea. Tioga Pipe - Pipe Supply Company. [s. f.]. Disponible en: <https://www.tiogapipe.com/>. [consultado el 14/06/2023].

TOWLER, G.P. y SINNOTT, R.K., *Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design*. Butterworth-Heinemann, 2008. ISBN 9780750684231.

VILLA DE P, A.L., TABORDA A, F. y MONTES DE CORREA, C. Kinetics of limonene epoxidation by hydrogen peroxide on PW-Amberlite. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, vol. 185 (2002), nº. 1-2, ISSN 13811169.

WALAS, S.M., *Chemical process equipment: selection and design*. Third edition. Butterworth-Heinemann, 2012. ISBN 9780123969590.

Wolfram|Alpha: Making the world's knowledge computable. En línea. Wolfram|Alpha: Computational Intelligence. [s. f.]. Disponible en: <https://www.wolframalpha.com/>. [consultado el 22/04/2023].

ZAPATA, R.B., VILLA, A.L., DE CORREA, C.M., RICARDEZ-SANDOVAL, L. y ELKAMEL, A. Dynamic Modeling and Optimization of a Batch Reactor for Limonene Epoxidation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 49 (2010), nº 18, pp 1520-5045, ISSN 0888-5885.

II.7. ANEXOS

II.7.A SÍMBOLOS.

H	Entalpía
X_{i0}	Conversión inicial
X_{if}	Conversión final
V	Volumen
u_s	Velocidad de sedimentación
g	Constante gravitacional
μ	Viscosidad dinámica
D_t	Diámetro del tanque/reactor
D_a	Diámetro del agitador
B	Ancho de los deflectores
N	Velocidad de agitación
N_p	Número de potencia
Re	Número de Reynolds
ε_{abs}	Rugosidad absoluta
ε_{rel}	Rugosidad relativa
f	Factor de fricción
h	Altura
W	Masa de catalizador/Trabajo de la bomba
$(-r_L)_w$	Velocidad de reacción expresada en términos de la masa de catalizador
ρ	Densidad
ρ_p	Densidad de las partículas de catalizador
ρ_w	Densidad del agua
d_p	Diámetro de las partículas de catalizador
Q	Calor
A	Área
U	Coefficiente global de transmisión de calor
T	Temperatura
T_{a1}	Temperatura del fluido refrigerante a la entrada
T_{a2}	Temperatura del fluido refrigerante a la salida
λ	Calor latente
ΔT_{ml}	Incremento de temperatura media logarítmica
m_c	Caudal másico de fluido refrigerante
C_v	Coefficiente de flujo de la válvula
P	Presión

R_i	Reacción/Reactor
c_p	Capacidad calorífica a presión constante
L	Longitud/Limoneno
H	Peróxido de hidrógeno
W	Agua
S	Disolvente (Acetonitrilo)
E	Epóxido de limoneno (Óxido de limoneno)
Q_v	Caudal volumétrico
F	Flujo molar
ϑ	Flujo volumétrico
x_i	Fracción molar del componente i
η	Factor de eficacia
L_{eq}	Longitud equivalente
t_{cuerpo}	Espesor del cuerpo
$t_{cabezales}$	Espesor de los cabezales
E_j	Eficacia de las juntas
C_c	Resistencia a la corrosión
S	Tensión máxima de trabajo admisible
$r = L_a$	Radio
CSTR	Reactor continuo de tanque agitado
OD	Diámetro externo
Va	Válvula de aguja
C	Caudalímetro
V	Válvula de expansión
T	Tanque
Cat	Catalizador
Z	Altura del líquido
L	Ancho de las palas de la turbina
C	Altura del eje con respecto a la base del reactor
R	Constante de los gases ideales
k_3	Constante cinética directa de la reacción de epoxidación del limoneno
k_4	Constante de desorción de los productos en la reacción de epoxidación
k_0	Factor pre-exponencial de la ecuación de Arrhenius
E_a	Energía de activación
K_i	Constante relativa al equilibrio de adsorción del componente i.

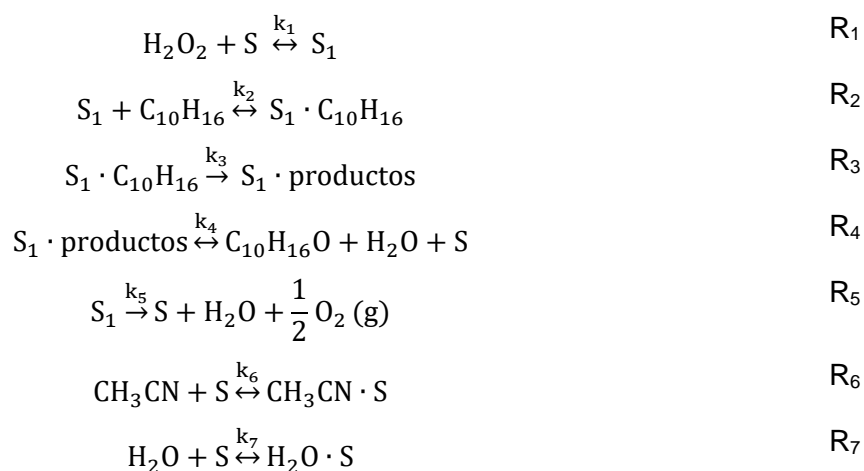
II.7.B CÁLCULOS.

II.7.B.1 Cinética de la reacción.

Tal y como se ha desarrollado en el apartado II.3.1.2, la ecuación cinética que define la reacción de epoxidación limoneno en presencia del catalizador PW-Amberlita, es la siguiente (Barrera *et al.*, 2009):

$$(-r_L)_W = \frac{k_3 K_H K_L C_T C_H C_L}{1 + K_H C_H + K_H K_L C_H C_L + \frac{k_3 K_H K_L}{k_4} C_H C_L + K_E C_W C_E + K_S C_S + K_W C_W} [=] \left(\frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{g cat}} \right) \quad [\text{II.4}]$$

En la Tabla II. 11, se recogen los valores correspondientes a las constantes involucradas en la Ecuación II.4, pero previamente resulta necesario definir cada una de estas. Para ello, se acude a las reacciones elementales que conforman el mecanismo de reacción, R₁, R₂, R₃, R₄, R₅, R₆ y R₇ (Barrera *et al.*, 2009).



Como se puede observar, todas las reacciones son reversibles, a excepción de R₃ y R₅. Para cada una de estas reacciones reversibles, se define la constante de la reacción inversa como k_{-i}, siendo i el número de reacción.

En la Ecuación II.4, se distinguen 7 parámetros ajustables; k₃, que se corresponde con la constante directa de la reacción de epoxidación del limoneno, que depende de la temperatura y sigue la ecuación de Arrhenius, k₄, constante de desorción de los productos y 5 constantes de equilibrios de adsorción, K_H, K_L, K_E, K_S y K_W. A continuación, se procede a definir cada una de ellas (Tabla II. 10)

$$k_3 = k_0 \cdot e^{-E_a/RT}$$

Siendo $k_0 = 1008,3 \text{ L/sg}$, $E_a = 25 \text{ KJ/mol}$ y $R = 8,3 \text{ J/mol K}$.

Tabla II. 10. Constantes relativas a los equilibrios de adsorción.

$K_H = k_1/k_{-1}$	$K_L = k_2/k_{-2}$	$K_S = k_6/k_{-6}$
$K_w = k_7/k_{-7}$		$K_E = k_4/k_{-4}$

Por último, tal y como se ha comentado previamente, se recogen, en la Tabla II. 11 los valores correspondientes a todas las constantes involucradas en la ecuación cinética (Zapata, *et al.*, 2010).

Tabla II. 11. Valores de las constantes involucradas en la ecuación cinética.

Constante	Valor	Unidades
K_H	12,5	L/mol
K_L	19	L/mol
K_S	1,1	L/mol
K_w	0,21	L/mol
K_E	3,1E-05	mol ² /L ²
k_3^*	0,055	L/s gcat
k_4^*	5,8E-05	L/s gcat

*Los valores k_3 y k_4 se corresponden realmente con los cocientes k_3C_T y k_4C_T , por eso se encuentran referidos a los gramos de catalizador.

II.7.B.2 Diseño y dimensionado del reactor.

Tal y como se menciona en el apartado II.3.1.4, la variable de diseño en reactores heterogéneos es la masa de catalizador (W). En este caso se acude a la ecuación de diseño para un reactor CSTR expresada en función de la masa de catalizador (Ecuación II.5)

$$\frac{W}{F_{L0}} = \frac{(X_{Lf} - X_{L0})}{(-r_L)_W} \quad [\text{II.5}]$$

Para hallar la masa de catalizador se debe conocer tanto el flujo molar inicial de limoneno, como el valor de la velocidad de reacción calculado para la conversión fijada. En este caso a la entrada del reactor no existe nada de limoneno convertido por lo que la conversión inicial $X_{L0}=0$.

Se realiza dicho cálculo, partiendo de los flujos molares obtenidos en el balance de materia para la corriente 15, que se corresponde con la de entrada al reactor (Tabla II. 12)

Tabla II. 12 Flujos molares correspondientes a la corriente 15.

Compuesto	F ₀ (mol/h)
Limoneno (L)	191,28
Peróxido de hidrógeno (H)	381,53
Agua (W)	3732
Acetonitrilo (S)	4063
Epóxido de limoneno (E)	5,89

A continuación, se procede a calcular la velocidad de reacción para la conversión de limoneno fijada a la salida del reactor, X_{Lf}=0,85. Para ello se acude a la expresión que la define (Ecuación II.4)

$$(-r_L)_W = \frac{k_3 K_H K_L C_T C_H C_L}{1 + K_H C_H + K_H K_L C_H C_L + \frac{k_3 K_H K_L}{K_4} C_H C_L + K_E C_W C_E + K_S C_S + K_W C_W} [=] \left(\frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{g cat}} \right) \quad [\text{II.4}]$$

Antes de proceder a calcular la velocidad de reacción es necesario conocer las concentraciones de peróxido, limoneno, agua, acetonitrilo y epóxido a la salida del reactor, teniendo en cuenta que la reacción se produce mol a mol. En la siguiente tabla (Tabla II. 13) se definen dichas concentraciones en función, tanto de las concentraciones iniciales de los diferentes compuestos, como de la conversión de limoneno.

Tabla II. 13 Concentraciones finales de los compuestos implicados en la reacción de epoxidación descrita.

Compuesto	Concentración inicial (C _{i0})	Concentración final (C _i)
Limoneno (L)	C _{L0}	C _{L0} ·(1-X _{Lf})
Peróxido de hidrógeno (H)	C _{H0}	C _{H0} ·(C _{L0} ·X _{Lf})
Agua (W)	C _{w0}	C _{w0} +(C _{L0} ·X _{Lf})
Acetonitrilo (S)	C _{S0}	C _{S0}
Epóxido de limoneno (E)	C _{E0}	C _{E0} +C _{L0} ·X _{Lf}

Las concentraciones iniciales de los compuestos se calculan partiendo del flujo molar de cada uno de ellos a la entrada del reactor, y dividiendo éste entre el flujo volumétrico total, definido también para las condiciones de entrada, tal y como se indica a continuación (Ecuación II.9)

$$C_{i0} = \frac{F_{i0}}{\vartheta_0} [=] \frac{\left(\frac{\text{mol}}{\text{h}}\right)}{\left(\frac{\text{L}}{\text{h}}\right)} = \frac{\text{mol}}{\text{L}} \quad [\text{II.9}]$$

Para calcular el flujo volumétrico total, ϑ_0 , es necesario conocer, tanto la densidad, como el peso molecular de cada uno de los compuestos a la temperatura de trabajo (Tabla II. 14)

Una vez calculadas las concentraciones iniciales, se calculan las finales a partir de las ecuaciones descritas en la Tabla II. 13 y se introducen en la Ecuación II.4, junto con los datos de las constantes cinéticas y de adsorción y desorción descritas en el apartado II.7.B.1 para hallar el valor de la velocidad de reacción, y , a continuación, la masa del catalizador W .

Con ese valor W ya calculado, se sabe que constituye el 2,15% de la masa reaccionante total, formada por la mezcla líquida y el propio catalizador. A continuación, se puede calcular la masa reaccionante total como:

$$\text{Masa reaccionante total (g)} = \frac{\text{Masa catalizador (g)}}{\left(\frac{2,15}{100}\right)} \quad [\text{II.10}]$$

Conocida la masa reaccionante total y la masa de catalizador, se obtiene por diferencia la masa de la mezcla líquida. Para hallar el volumen de esta, se acude a la densidad, calculada de la siguiente manera:

$$\rho_{\text{disolución líquida}} = \frac{\sum \vartheta_{i0} \cdot \rho_i}{\vartheta_0} \quad [\text{II.11}]$$

A continuación, se recogen los resultados obtenidos tras el cálculo de las dimensiones del reactor empleado en esta sección (Tabla II. 14, Tabla II. 15)

Tabla II. 14. Concentraciones, densidad y peso molecular de los diferentes compuestos

Compuesto	Concentración inicial (mol/L)	Concentración final (mol/L)	Densidad (g/L)	P.M. (g/mol)
L	0,60	0,09	839,81	136,24
S	12,67	12,67	786,00	41,05
E	0,02	0,52	929,00	152,24
W	11,63	12,14	994,70	18,02
H	1,19	0,68	1440,0	34,01

Tabla II. 15. Dimensionado del reactor.

$(-r_L)_w$ (mol/s g cat)	5,78E-05
F_{L0} (mol/s)	0,053
X_{Lf}	0,85
Masa catalizador (g)	780,97
Densidad catalizador (g/L)	2255
Masa total requerida (g)	36159,04
Masa líquido (g)	35378,06
Densidad líquido (g/L)	853,97
Volumen líquido (L)	41,43
Volumen catalizador (L)	0,35
Volumen mezcla reaccionante (L)	41,78

II.7.B.3 Agitación.

Velocidad de sedimentación

Antes de seleccionar el agitador y la velocidad de agitación adecuadas, es necesario conocer la velocidad de sedimentación de las partículas que se encuentran en suspensión dentro del reactor. Para calcular dicha velocidad se acude a la Ley de Stokes de la sedimentación, que proporciona la velocidad en función del diámetro de partícula, su densidad y la densidad y viscosidad de la disolución líquida en la que se encuentran suspendidas dichas partículas.

$$u_s = \frac{g}{18} \cdot \frac{(\rho_p - \rho)}{\mu} \cdot d_p^2 \quad [\text{II.6}]$$

La densidad de la disolución se calcula de forma análoga a los cálculos del anexo del dimensionado del reactor (Ecuación II.11).

$$\rho_{\text{disolución líquida}} = \frac{\sum \vartheta_{i0} \cdot \rho_i}{\vartheta_0} \quad [\text{II.11}]$$

En cuanto al diámetro de partícula, se estima que para este tipo de reactores en los que existe una disolución líquida con una cantidad de partículas sólidas en suspensión, este valor se encuentra comprendido entre 10 μm y 1mm (Green y Southard, 2019). Se ha considerado un diámetro de partícula de 830 μm .

Por último, se debe estimar la viscosidad de la disolución. Como se trata de una disolución en la que se encuentran presentes varios compuestos en diferentes proporciones, se ha calculado la viscosidad media de la siguiente manera:

$$\mu_{\text{disolución líquida}} = \sum x_i \cdot \mu_i \quad [\text{II.12}]$$

Se introducen todos los parámetros en la ecuación II.6 y se calcula la velocidad de sedimentación de las partículas de catalizador. Los resultados obtenidos se muestran a continuación (Tabla II. 16)

Tabla II. 16. Cálculo de la velocidad de sedimentación de las partículas de catalizador.

ρ (g/L)	853,98
ρ_p (g/L)	2255
g (m/s ²)	9,81
μ (Pa s)	9,64E-04
d_p (m)	8,30E-04
u_s (m/s)	0,55

Dimensionado del agitador.

Una vez calculada la velocidad de sedimentación se aplican los factores de forma (Fig. II. 3) para dimensionar el agitador. Los valores numéricos de los factores de forma aplicados se detallan a continuación (Tabla II. 17). El número correspondiente al factor S_5 , vendrá determinado por la decisión de instalar o no deflectores. En este caso se instalan 4 deflectores (Peters *et al.*, 2003).

Tabla II. 17. Valores numéricos de los factores de forma

S_1	3
S_2	1
S_3	1/4
S_4	1/6
S_5	1/10
S_6	1

Número de potencia, potencia y velocidad de agitación.

El cálculo de la potencia de agitación necesaria vendrá determinado por una serie de correlaciones y gráficas basadas en parámetros adimensionales como el número de potencia N_p y el número de Reynolds R_e , definidos a continuación.

$$N_p = \frac{P}{D_a^5 \cdot N^3 \cdot \rho} \tag{II.13}$$

$$R_e = \frac{N \cdot D_a^2 \cdot \rho}{\mu} \tag{II.14}$$

Para estimar la velocidad de agitación se acude a la Fig. II. 4, donde se especifica este parámetro en función del tipo de agitador. En el caso objeto de estudio se trabaja con una turbina axial centrada con deflectores o baffles. Para este agitador la velocidad media de agitación oscila entre los 2 y 6 m/s. Se toma como dato un valor medio entre ambos 4 m/s.


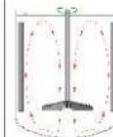
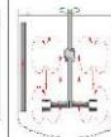
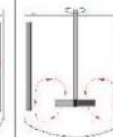
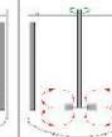
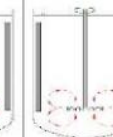

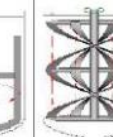
Denominación Denomination	Hélice Propeller	Hidrofoil Hydrofoil	Versafoil Versafoil	Turbina axial Pitched blade turbine	Turbina radial Radial turbine	Cowles Dispenser disc	Ancora Anchor	Cinta helicoidal Helical ribbon
Proporciones geométricas standard Standard Geometries								
Situación Situation	centrada <i>centred</i> descentrada <i>off-centre</i> sin baffles <i>without baffles</i> lateral side-entry	centrada <i>centred</i> descentrada <i>off-centre</i> sin baffles <i>without baffles</i> lateral side-entry	centrada con baffles <i>centred with baffles</i>	centrada con baffles <i>centred with baffles</i>	centrada con baffles <i>centred with baffles</i>	centrada <i>centred</i> descentrada sin baffles <i>off-centre without baffles</i>	centrada sin baffles <i>centred without baffles</i>	centrada sin baffles <i>centred without baffles</i>
Flujo primario Primary flow	axial <i>axial</i>	axial <i>axial</i>	axial <i>axial</i>	axial y radial <i>axial and radial</i>	radial <i>radial</i>	radial <i>radial</i>	tangencial <i>tangential</i>	axial <i>axial</i>
Rango de utilización Range of usage	d/D d/D 3 - 15	0'2 - 0'7	0'5 - 0'98	0'2 - 0'8	0'2 - 0'4	0'1 - 0'5	0'9 - 0'98	0'9 - 0'98
	W Tang (m/s) Tang Vel (m/s)	2 - 10	1 - 12	2 - 6	4 - 10	5 - 20	1 - 5	$u < 2$

Fig. II. 4. Rango de velocidades típicas para los diferentes tipos de agitadores (Soares, 2002).

La velocidad de agitación convertida en velocidad angular (rps ó s^{-1}):

$$N(s^{-1}) = \frac{v(m/s)}{\left(\frac{D_a}{2} (m)\right) \cdot 2\pi} = \frac{4}{\left(\frac{0,13}{2}\right) \cdot 2\pi} = 10,16 s^{-1}$$

Una vez calculada la velocidad de agitación, se procede a calcular tanto el número de Reynolds como el Número de potencia. En este caso, se obtiene un Reynolds superior a 10000, es decir, flujo turbulento; para estas condiciones, el número de potencia N_P es independiente del Reynolds y se corresponde con una constante K_T , tabulada para cada tipo de agitador (Peters *et al.*, 2003). En la Fig. II. 5 se encuentran los valores tabulados de K_T en función del tipo de agitador. Se toma como valor $K_T=1,27$ para turbina con 4 palas inclinadas 45° .

$$N_P = K_T = 1,27$$

Tipo de impulsor	K_L	K_T
Impulsor hélice, tres palas		
Paso 1.0 ⁴³	41	0.32
Paso 1.5 ³⁷	48	0.87
Turbina		
Disco de seis palas ³⁷ ($S_3 = 0.25$, $S_4 = 0.2$)	65	5.75
Seis palas inclinadas ⁴² (45° , $S_4 = 0.2$)	—	1.63
Cuatro palas inclinadas ³⁷ (45° , $S_4 = 0.2$)	44.5	1.27
Paleta plana, dos palas ⁴³ ($S_4 = 0.2$)	36.5	1.70
Impulsor HE-3	43	0.28
Cinta helicoidal	52	—
Ancla ³⁷	300	0.35

Fig. II. 5 Valor de la constante K_T en función del tipo de agitador.

Conocidos ambos parámetros adimensionales se procede al cálculo de la potencia de agitación, que se define a continuación (Ecuación II.15)

$$P = N_P \cdot N^3 \cdot D_a^5 \cdot \rho \quad [\text{II.15}]$$

Los resultados obtenidos se recogen en la tabla siguiente (Tabla II. 18)

Tabla II. 18. Parámetros asociados a la agitación del reactor.

Velocidad agitación (m/s)	4
N (s^{-1} ó rps)	10,16
Re	141390
$N_P=K_T$	1,27
P (W)	35,18

II.7.B.4 Sistema de refrigeración con encamisado.

Lo primero que se debe conocer para calcular el calor desprendido, Q , es la variación de entalpía de reacción (ΔH_r) a la temperatura de operación, que se corresponde, en este caso, con 33°C.

$$(\Delta H_r)_{33^\circ\text{C}} = \Delta H_{r_{T_{\text{ref}}}} + \int_{T_{\text{ref}}}^T c_p dT \quad \text{[II.16]}$$

Donde c_p se corresponde con la capacidad calorífica a presión constante, y T_{ref} se define como temperatura de referencia, que se tomará 25°C. Para hallar el valor de la capacidad calorífica de cada uno de los compuestos implicados se acude a la siguiente ecuación (Felder y Rousseau, 2004)

$$c_p = a + bT + cT^2 + dT^3 \quad \text{[II.17]}$$

Siendo a , b , c y d constantes tabuladas para cada compuesto, y T , la temperatura de operación.

Una vez conocidos los valores de c_p , se procede a calcular la variación de entalpía para las condiciones de operación. Esta variación, se calcula a partir de la Ecuación II.18.

$$\Delta H_r = \sum \Delta H_{f,\text{productos}} - \sum \Delta H_{f,\text{reactivos}} \quad \text{[II.18]}$$

A continuación, se presentan dos tablas resumen (Tabla II. 19 y Tabla II. 20), una con las constantes de cada uno de los compuestos empleadas para el cálculo de c_p ; y otra con los resultados obtenidos tras el cálculo de las entalpías de formación, tanto de reactivos como de productos (ΔH_f), así como la entalpía de reacción calculada para las condiciones de operación (ΔH_r)

Tabla II. 19. Constantes implicadas en el cálculo de c_p para los diferentes compuestos.

Compuesto	T	a	b	c	d	e	f	g	h
C₁₀H₁₆	K	401,6	-2,75	0,011	-1,13E-05	-	-	-	-
H₂O₂*	K	34,26	55,18	-35,15	9,09	-0,42	-149,91	257,06	-136,11
H₂O	°C	0,075	0,00	0,00	0,00	-	-	-	-
C₁₀H₁₆O	K	-191,2	1,94	-1,52E-03	-6,61E-07	-			

*Se han empleado las constantes del intervalo a-h para el cálculo directo de ΔH_f a partir de la Ecuación II.19. (NIST)

$$\Delta H_f = a \cdot T + \frac{b \cdot T^2}{2} + \frac{c \cdot T^3}{3} + \frac{d \cdot T^4}{4} - \frac{e}{T} + f - h \quad \text{[II.19]}$$

Tabla II. 20. Cálculo de las entalpías de formación y reacción a la temperatura de operación.

Compuesto	$\Delta H_{f,33^\circ\text{C}}$ (kJ/mol)
C₁₀H₁₆	-52,533
H₂O₂	-187,467
H₂O	-285,237
C₁₀H₁₆O	-315,574
ΔH_r (kJ/mol)	
T_{ref, 25°C}	-361,01
T_{op, 33°C}	-360,81

Conocida la entalpía de la reacción a la temperatura de operación se calcula el calor desprendido a partir de la ecuación siguiente:

$$Q = F_{L0} \cdot (\Delta H_r) \cdot (X_{Lf} - X_{L0}) \quad \text{[II.20]}$$

Con ese calor Q, y suponiendo un área de intercambio A, igual al área del reactor y una de sus tapas, se despeja el valor del gradiente de temperatura media logarítmica (ΔT_{ml}) de la ecuación II.21.

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ml} = U \cdot A \cdot \frac{(T_{a1} - T_{a2})}{\ln \frac{T - T_{a1}}{T - T_{a2}}} \quad \text{[II.21]}$$

En este caso se ha tomado un valor del coeficiente global de transmisión de calor U típico para tanques agitados con chaqueta igual a 350 W/m²K (Mills,1995).

Por último, con ese valor de (ΔT_{ml}) calculado, se tantean las temperaturas, tanto de entrada (T_{a1}) como de salida (T_{a2}) del fluido refrigerante, y se halla el flujo másico de fluido refrigerante necesario para los requerimientos del sistema (m_c). Como se ha empleado amoníaco criogénico como refrigerante, se acude al calor latente de vaporización para el cálculo del calor, y, por consiguiente, del flujo másico (Ecuación II.22).

$$Q = \dot{m}_c \cdot \lambda \quad [\text{II.22}]$$

II.7.B.5 Tanques de almacenamiento.

Para calcular el volumen de almacenamiento necesario, se acude a la Ecuación II.23, donde V_L hace referencia al volumen ocupado por el líquido en m^3 , Q_v al caudal volumétrico tratado, expresado en m^3/h y t a la autonomía requerida, en horas.

$$V_L = Q_v \cdot t \quad [\text{II.23}]$$

Una vez calculado el volumen del líquido, se considera que ese volumen se corresponde con un 90% del volumen total del tanque, puesto que se deja un 10% de espacio libre por razones de seguridad. Conocido dicho volumen, se calculan tanto el diámetro como la altura del tanque, teniendo en cuenta una relación H/D de 1,5, a partir de la Ecuación II.24 (Walas, 2012).

$$V_T = \frac{V_L}{0,9} = \frac{\pi}{4} \cdot D_T^2 \cdot h_T = \frac{\pi}{4} \cdot D_T^2 \cdot (1,5 \cdot D_T) \rightarrow D_T = \sqrt[3]{\frac{V_T \cdot 4}{\pi \cdot 1,5}} \quad [\text{II.24}]$$

II.7.B.6 Sistemas de impulsión.

Lo primero que se debe realizar para diseñar una bomba, es calcular el trabajo teórico requerido (W). Para ello, se acude al balance de la Ecuación II.25.

$$g \cdot \Delta z + \frac{\Delta P}{\rho} - \frac{\Delta P_f}{\rho} - W = 0 \quad [\text{II.25}]$$

Donde Δz , expresado en metros, representa la diferencia de alturas entre el punto inicial y el punto final de bombeo, ΔP la diferencia de presión, y ΔP_f (Pa) la caída de presión debida a la fricción del sistema, compuesto por tuberías y accesorios.

Para calcular esta caída de presión se acude a la Ecuación II.26 (Towler y Sinnott, 2008):

$$\Delta P_f = 8f \frac{L_{eq_{total}}}{D_i} \frac{\rho u^2}{2} \quad [\text{II.26}]$$

Siendo f el factor de fricción, que se encuentra relacionado con la rugosidad relativa de cada material y el número de Reynolds.

Ambos parámetros se calculan a partir de las ecuaciones II.27 y II.28. Posteriormente se acude al diagrama de Moody (Fig. II. 6) o a la Ecuación II.29, presentada posteriormente y se halla el factor de fricción previamente mencionado, f .

$$\varepsilon_{\text{rel}} = \frac{\varepsilon_{\text{abs}}}{D_i} \quad \text{[II.27]}$$

$$\text{Re} = \frac{D_i u \rho}{\mu} \quad \text{[II.28]}$$

La rugosidad relativa se encuentra relacionada con la rugosidad absoluta, que es característica de cada tipo de material. En este caso se opta por emplear acero inoxidable tipo AISI 316, debido a las características del fluido de trabajo. Este material presenta una rugosidad absoluta de 0,015 mm.

Cabe destacar que, cuando se trabaja con $\text{Re} > 4000$, existe una ecuación matemática para estimar de forma más exacta el factor de fricción. La ecuación es la siguiente:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4 \cdot \log \left[0,27 \cdot \frac{\varepsilon_{\text{abs}}}{D} + \left(\frac{7}{\text{Re}} \right)^{0,9} \right] \quad \text{[II.29]}$$

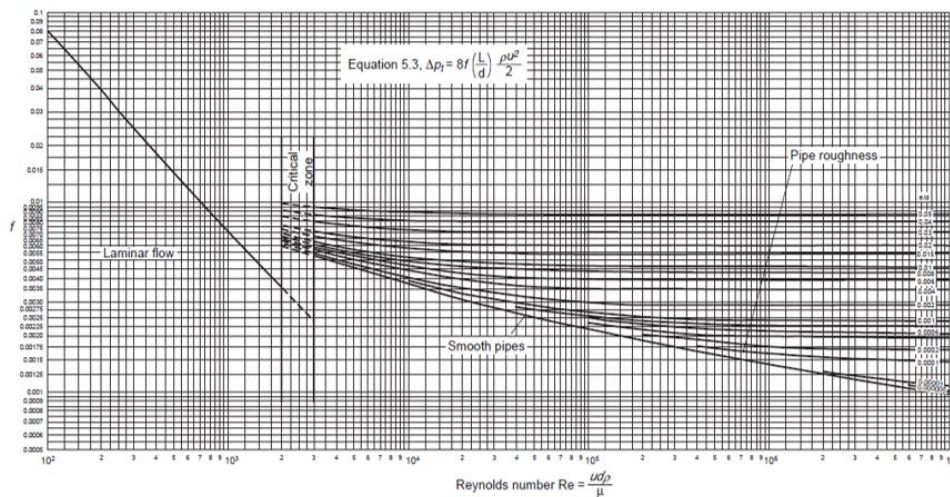


Fig. II. 6 Diagrama de Moody. Obtención del factor de fricción- f (Towler y Sinnott, 2008)

A continuación, es necesario calcular el diámetro óptimo de la tubería, para posteriormente obtener un valor de la L_{eq} . Se acude a la Fig. II. 7, donde, a partir del régimen de flujo, determinado por el número de Reynolds, la densidad y el caudal volumétrico de trabajo, se obtiene el valor del parámetro deseado.

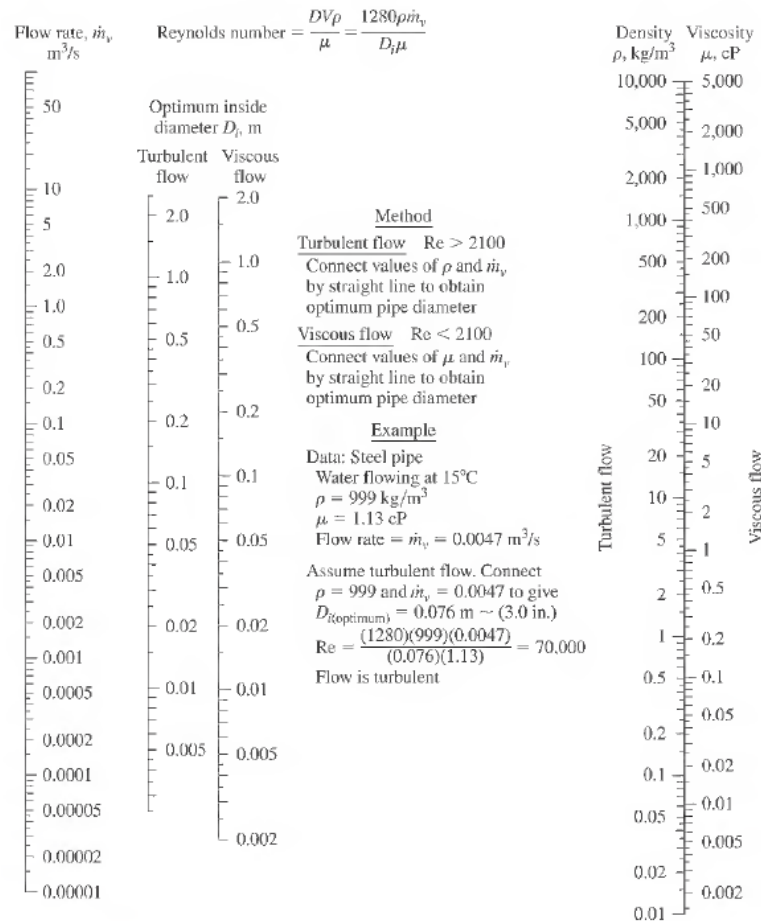


Fig. II. 7 Cálculo del diámetro óptimo (Peters *et al.*, 2003).

Una vez determinado el diámetro óptimo, se acude al catálogo universal de tuberías (II.7.D) y se escoge el diámetro normalizado más próximo a este. Con este valor se procederá a realizar el resto de los cálculos relativos a las bombas.

La longitud equivalente L_{eq} , se compone, además de la tubería, de la suma de las longitudes equivalentes del resto de los accesorios colocados en esa tubería, que se halla multiplicando el número extraído de la tabla por el diámetro nominal previamente obtenido.

En el caso de las bombas de trabajo B-II.1 y B-II.2, se han seleccionado los mismos accesorios, ya que la trayectoria de sus tuberías es idéntica. Estos accesorios se corresponden con una unión tipo “T”, cuatro codos estándar de 90°, la entrada al reactor, definida como “*tank inlet*” y una válvula de compuerta. El cálculo de la longitud equivalente, o lo que es lo mismo, la longitud de tubería recta que genera la misma caída de presión que estos accesorios se realiza a partir de la Tabla II. 21.

Tabla II. 21. Longitud equivalente en función de los distintos accesorios (Towler y Sinnott, 2008).

Fitting or Valve	K, Number of Velocity Heads	Number of Equivalent Pipe Diameters
45° standard elbow	0.35	15
45° long radius elbow	0.2	10
90° standard radius elbow	0.6–0.8	30–40
90° standard long elbow	0.45	23
90° square elbow	1.5	75
Tee-entry from leg	1.2	60
Tee-entry into leg	1.8	90
Union and coupling	0.04	2
Sharp reduction (tank outlet)	0.5	25
Sudden expansion (tank inlet)	1.0	50
Gate valve		
fully open	0.15	7.5
1/4 open	16	800
1/2 open	4	200
3/4 open	1	40
Globe valve, bevel seat-		
fully open	6	300
1/2 open	8.5	450
Globe valve, plug disk-		
fully open	9	450
1/2 open	36	1800
1/4 open	112	5600
Plug valve - open	0.4	18

Calculada la longitud equivalente total, se halla el trabajo de las bombas; y a partir de este, acudiendo a la Ecuación II.30, la potencia requerida. Esta potencia, deberá llevar incluida una eficiencia (η), que dependerá de cada tipo de bomba. Se ha seleccionado una bomba centrífuga de una sola etapa por ser este tipo de equipos los más comunes en la industria química. Para estas bombas la eficiencia es de un 45% (Walas, 2012).

$$\text{Potencia} = \frac{W_{\text{bomba}} G}{\eta} \quad [\text{II.30}]$$

En la Tabla II. 22 se recogen los resultados obtenidos en el cálculo desarrollado.

Tabla II. 22. Cálculos detallados relativos al diseño de las bombas.

	B-II.1	B-II.2
D _{opt} (mm)	5,70	4,19
D _i (mm)	6	6
L _{eq,total} (m)	11,20	11,20
u (m/s)	3,04	2,78
Re	3,89E+04	1,92E+04
f	7,1E-03	7,8E-03
Δz (m)	-0,50	-0,50

Tabla II.22. Cálculos detallados relativos al diseño de las bombas. Continuación.

ΔP (Pa)	0	0
ΔP_f (kPa)	385,36	492,46
W (J/kg)	495,19	453
η	0,45	0,45
P (W)	15,30	7,24

II.7.B.7 Diseño mecánico.

Tal y como se menciona en el apartado II.4, relativo al diseño mecánico, este se realiza al CSTR donde se lleva a cabo la síntesis del óxido de limoneno mediante una reacción de epoxidación.

El reactor objeto de estudio presenta un diámetro interno de 0,38 m. Este valor, cuando se trabaja de forma óptima en reactores de tanque agitado y con presiones moderadas, se corresponde con la altura del líquido (Walas, 2012).

Una vez conocido el diámetro, se realiza el cálculo del volumen de diseño del equipo. Para ello, se aplica un factor de seguridad que sobredimensiona el reactor, con la finalidad de garantizar, además de la propia seguridad del proceso, una agitación eficaz sin pérdidas y salpicaduras (Walas, 2012). El factor de seguridad considerado en este caso es 0,25 (25% sobredimensionado), lo que implica que, la altura del líquido supone un 75% de la altura total del reactor. Para esas especificaciones, la altura de diseño, teniendo en cuenta solo el cuerpo cilíndrico, sin cabezales, se calcula de la siguiente manera (Ecuación II.31)

$$\text{Altura de diseño (m)} = \frac{h_{\text{líquido}}}{0,75} \quad [\text{II.31}]$$

La altura de diseño obtenida es de 0,50 m.

Para realizar el cálculo del volumen de diseño, resulta necesario aplicar nuevamente el factor de seguridad (Ecuación II.32). Este volumen se corresponde con 0,06 m³ y se calcula como:

$$\text{Volumen diseño (m}^3\text{)} = \frac{\pi \cdot d^2 \cdot h_{\text{líquido}}}{4 \cdot 0,75} = \frac{\pi \cdot d^3}{4 \cdot 0,75} \quad [\text{II.32}]$$

Acudiendo nuevamente al diámetro, se pasa a realizar el cálculo del espesor, tanto del cuerpo, como de los cabezales. Como se indica en el apartado II.4, se ha seleccionado la

geometría más comúnmente empleada en este tipo de equipos, cilíndrica para el cuerpo y toro esférica para los cabezales (Peters *et al.*, 2003)

Antes de calcular los espesores, es necesario establecer una temperatura y presión de diseño. Como la temperatura de operación se encuentra dentro del rango considerado 20°F- 650°F (28,89°C - 343,33°C), se define la temperatura de diseño como 50°F (10°C) superior a la de operación (Walas, 2012), por tanto, dicha temperatura se corresponde con 43°C. En cuanto a la presión, se opera 101,33 kPa. Por razones de seguridad, se considera que la presión de diseño es un 10% superior a la presión máxima de operación, siendo esta última 25 psi (170 kPa) superior a la de operación. La presión de diseño es, por tanto 298,46 kPa (Walas, 2012).

Para calcular el espesor del cuerpo cilíndrico se acude a la Ecuación II.33, habiéndose cumplido previamente la condición límite indicada en la Ecuación II.34 (Peters *et al.*, 2003).

$$t_{\text{cuerpo}} = \frac{P r_i}{S E_j - 0,6 P} + C_c \quad \text{[II.33]}$$

$$P \leq 0,385 S E_j \quad \text{[II.34]}$$

Una vez calculado el espesor del cuerpo cilíndrico, se realiza el cálculo del espesor de los cabezales. Para una geometría toro esférica, el espesor se calcula como se indica en la Ecuación II.35 (Peters *et al.*, 2003).

$$t_{\text{cabezales}} = \frac{0,885 P L_a}{S E_j - 0,1 P} + C_c \quad \text{[II.35]}$$

Para determinar ambos espesores, es necesario dar valores a los parámetros que aparecen en las ecuaciones anteriores (II.33 y II.35). Estos parámetros hacen referencia a la eficacia de las juntas (E_j), la tensión máxima de trabajo admisible para el material de construcción seleccionado (S) y la resistencia a la corrosión (C_c).

Se han seleccionado juntas de doble soldadura examinadas en todos sus puntos, por lo que el parámetro E_j toma el valor 1 (Tabla II. 24).

La tensión máxima de trabajo admisible, S , depende, tanto del tipo de material escogido, que en este caso se trata de acero inoxidable tipo AISI 316, como de la temperatura de diseño previamente calculada, que es de 43°C (Tabla II. 24). Para la determinación de este parámetro se ha realizado tanto una interpolación lineal, como un ajuste polinómico de 2º

grado con los datos de la tabla (Fig. II. 8), y se ha considerado un valor medio entre los dos resultados obtenidos (Tabla II. 23)

Tabla II. 23. Resultados obtenidos a partir de los dos métodos considerados para el cálculo de la tensión máxima de trabajo admisible, S.

Método	S (kPa)
Interpolación lineal	119.351,34
Ajuste polinómico de 2º grado ($y = 0,1741x^2 - 186,71x + 123319$)	115.612,38
Valor medio considerado	117.481,86

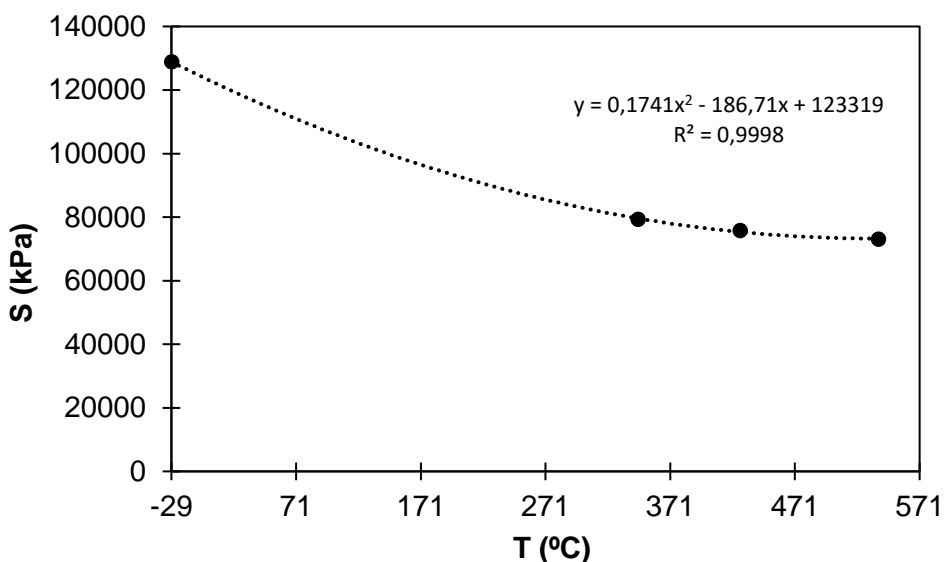


Fig. II. 8. Ajuste polinómico de la tensión máxima de trabajo (S) en función de la temperatura.

Tabla II. 24 Parámetros de diseño para el cálculo del espesor de cuerpo y cabezales del equipo según el código ASME.

Joint efficiencies	Recommended stress values		
	Metal	Temp., °C	S, kPa
For double-welded butt joints If fully radiographed = 1.0 If spot-examined = 0.85 If not radiographed = 0.70	Carbon steel (SA-285, Gr. C)	-29 to 343	94,500
		399	82,700
		454	57,200
In general, for spot examined If electric resistance weld = 0.85 If lap-welded = 0.80 If single-butt-welded = 0.60	Low-alloy steel for resistance to H ₂ and H ₂ S (SA-387, Gr.12Cl.1)	-29 to 427	94,500
		510	75,800
		565	34,500
		649	6,900
	High-tensile steel for heavy-wall vessels (SA-302, Gr.B)	-29 to 399	137,900
		454	115,800
		510	69,000
		538	42,750
	High-alloy steel for cladding and corrosion resistance Stainless 304 (SA-240)	-29	128,900
		343	77,200
427		72,400	
538		66,900	
Stainless 316 (SA-240)	-29	128,900	
	345	79,300	
	427	75,800	
	538	73,100	
Nonferrous metals Copper (SB-11) Aluminum (SB-209, 1100-0)	38	46,200	
	204	20,700	
	38	15,900	
	204	6,900	

En cuanto al dato de resistencia a la corrosión (C_c) se considera un valor de 0,35 pulgadas (0,008 m) para condiciones de corrosión conocidas (Walas, 2012). Parámetros de diseño para el cálculo del espesor de cuerpo y cabezales del equipo según el código ASME.

Una vez introducidos todos los parámetros previamente ajustados en las ecuaciones II.26 y II.28, se obtienen unos espesores de 0,0094 y 0,0093 m para cuerpo cilíndrico y cabezales toro esféricos respectivamente. Por seguridad, se selecciona el mayor de los resultados, en este caso el correspondiente al cuerpo cilíndrico, 0,0094 m.

Con este dato se pasa a calcular la masa de material de construcción necesaria para construir el equipo. Para ello, se considera el valor del volumen total del reactor incluyendo cuerpo y cabezales, y se multiplica este dato por la densidad del material.

Para el cuerpo cilíndrico, se calcula el volumen la superficie lateral del mismo, multiplicada por el espesor, tal y como se indica a continuación (Ecuación II.36)

$$V_{\text{cuerpo cilíndrico}} = \pi r L t \quad [\text{II.36}]$$

Donde la longitud del cilindro, L , se corresponde con la altura total del reactor previamente calculada, 0,50 m.

Para los cabezales, se calcula el volumen de cada uno de ellos a partir de la siguiente ecuación (Ecuación II.37)

$$V_{\text{cabezal toro esférico}} = \pi \frac{\left(OD + \frac{OD}{24} + at\right)^2 t}{4} \quad \text{[II.37]}$$

Siendo OD el diámetro externo, calculado como la suma del diámetro interno más dos veces el espesor. El parámetro a se corresponde con una constante que, para espesores menores de 0,0254 m, toma el valor 2 (Peters *et al.*, 2003).

Por último, se calcula la masa de acero necesaria a partir de la Ecuación II.38, que tiene en cuenta tanto el cuerpo cilíndrico como los dos cabezales. A esta masa se le añade un 20% debido a accesorios (Peters *et al.*, 2003).

$$\text{Masa acero total (kg)} = 1,20 \cdot \left[\rho_{\text{acero}} \left(\pi r L t + 2 \cdot \pi \frac{\left(OD + \frac{OD}{24} + at\right)^2 t}{4} \right) \right] \quad \text{[II.38]}$$

A continuación, se muestra una tabla resumen de los parámetros considerados y los resultados obtenidos (Tabla II. 25)

Tabla II. 25. Parámetros considerados y resultados obtenidos para el diseño mecánico del reactor de epoxidación.

Parámetro	Valor
$P_{\text{diseño}}$ (kPa)	298,46
E_j	1
S (kPa)	117.481,86
C_c (m)	0,009
a	2
h (m)	0,50
D (m)	0,38
$L_a=r_i$ (m)	0,19
OD (m)	0,40
t_{cuerpo} (m)	9,40E-03
t_{cabezal} (m)	9,30E-03

Tabla II.25. Parámetros considerados y resultados obtenidos para el diseño mecánico del reactor de epoxidación. Continuación

Parámetro	Valor
$V_{\text{cuerpo}} \text{ (m}^3\text{)}$	0,006
$V_{\text{total cabezales}} \text{ (m}^3\text{)}$	0,002
$V_{\text{total}} \text{ (m}^3\text{)}$	0,008
$\rho_{\text{acero}} \text{ (kg/m}^3\text{)}$	7980
Masa acero total (kg)	79,78

II.7.C COSTES.

Como se comentó en el apartado relativo al cálculo de costes, para realizar dicho cálculo se ha acudido tanto a gráficas encontradas en la bibliografía, como a precios obtenidos de catálogos comerciales.

Reactor R-II.1.

Para el cálculo del coste que supone la adquisición de este equipo se ha acudido a la Fig. II. 9. En este caso, el valor calculado no resulta ser del todo cierto, ya que el volumen que ocupa el reactor ($0,06 \text{ m}^3$) es algo inferior al volumen mínimo que se puede leer en la gráfica. Esto significa que, existen muchas probabilidades de que el coste sea inferior al calculado, pero lo que se corrobora así es que, como mucho dicho coste será de 13078,60 euros.

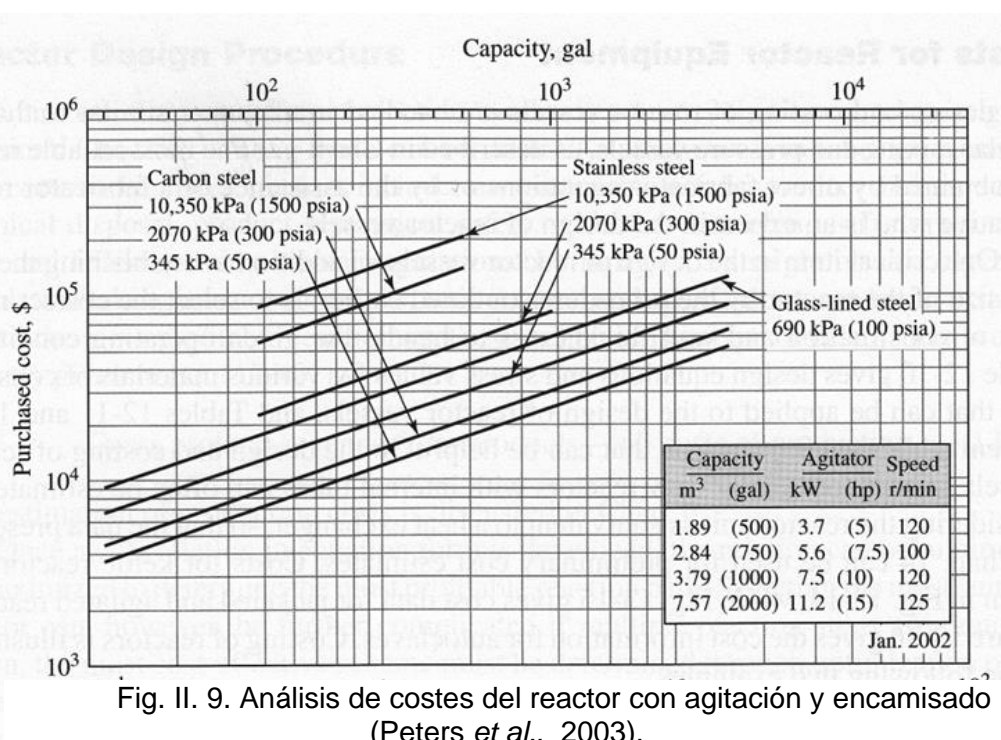


Fig. II. 9. Análisis de costes del reactor con agitación y encamisado (Peters *et al.*, 2003).

Se ha considerado como material Acero Inoxidable y una presión de 345 kPa, por tratarse esta de la más cercana a la presión de operación.

Tanques T-II.1/T-II.2.

Para el cálculo de los costes asociados a los tanques de almacenamiento se acude a la Figura II.10. En este caso resulta necesario realizar un cálculo previo del espesor de dichos tanques para posteriormente corregir los valores obtenidos en la tabla. El procedimiento a seguir para calcular el espesor es análogo al explicado en el apartado II.7. B.7. Con el tanque T-II.2 ocurre algo similar a lo del reactor, ya que la figura sí contempla el volumen de este, pero no lo corta con ninguna de las isóneas correspondientes al material de construcción. En esta ocasión se ha estudiado la tendencia de la isónea correspondiente al Acero Inoxidable tipo AISI 316 y se ha estimado el coste en función de dicha tendencia.

Una vez calculado, el resultado obtenido se ha de corregir con un factor que depende del espesor de cada tanque.

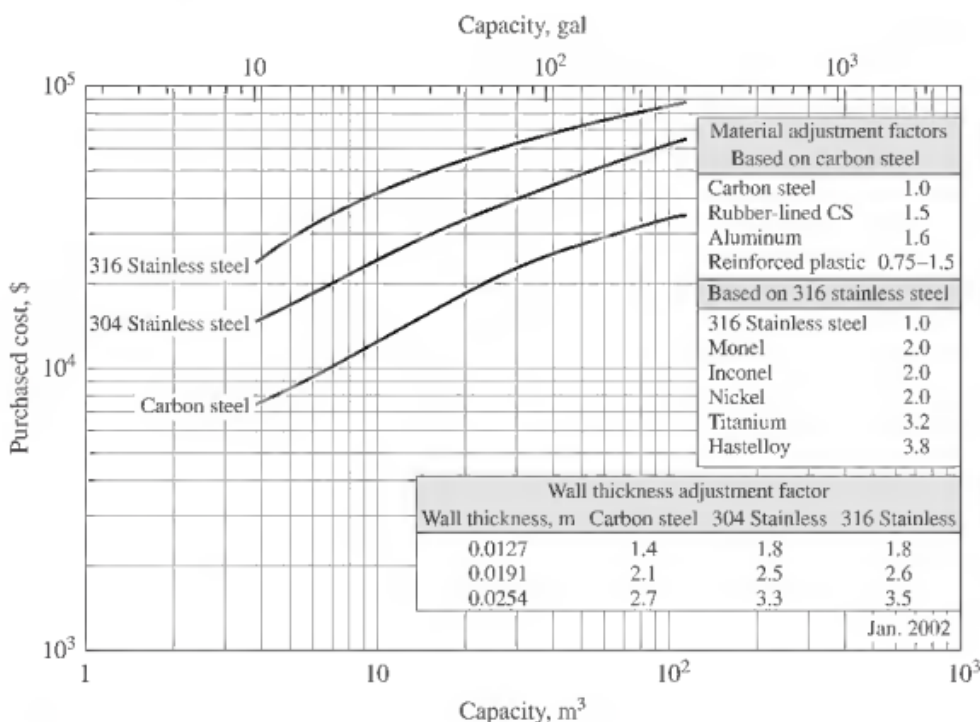


Fig. II. 10 Análisis de costes para los tanques de almacenamiento.

Para estimar los costes del resto de equipos auxiliares y accesorios se ha tenido que acudir a catálogos comerciales, debido a que, como se ha comentado previamente, las dimensiones de los mismos no se encuentran dentro de los rangos considerados en las gráficas y ecuaciones. A continuación, se presentarán los modelos de cada uno de los equipos seleccionados, así como un resumen de sus características técnicas.

Válvulas de aguja Va-II.1/Va-II.2

Se ha optado por unas válvulas de aguja de la marca comercial Peters, modelo Vseries (Needle Valves). A continuación, en la Tabla II. 26 se muestran, tanto las especificaciones técnicas, como una imagen de esta.

Tabla II. 26. Características de las válvulas de aguja seleccionadas.

Specifications

- Pressure Ratings:
 - 316 Stainless Steel:
 - 5000 psig (345 bar) CWP
 - Brass, Steel and Alloy 400:
 - 3000 psig (207 bar) CWP
- Orifice: 0.078" to 0.312" (2.0mm to 7.9mm)
- C_v: 0.12 to 1.90
- Port size: 1/8" to 3/4" (3mm to 12mm)
- Temperature Ratings:
 - Stainless Steel and Alloy 400:
 - 65 °F to 450 °F (-54 °C to 232 °C)



Caudalímetros C-II.1/C-II.2.

En el caso de los caudalímetros, se han seleccionado unos de la casa comercial Key Instruments compatible con los caudales volumétricos de trabajo y las condiciones de operación. De nuevo, se muestra en la Tabla II. 27, tanto una imagen del dispositivo como las especificaciones de este.

Tabla II. 27. Características de los caudalímetros seleccionados.

SPECIFICATIONS	
ACCURACY:	FR2000 Series <ul style="list-style-type: none"> • ± 5% Full Scale FR4000, FR4500 Series <ul style="list-style-type: none"> • ± 3% Full Scale
FLOATS:	Black Glass, Stainless Steel, Aluminum or Black Delrin
METER BODY:	Clear Acrylic
FITTINGS:	Brass or Stainless Steel
ELASTOMERS:	<ul style="list-style-type: none"> • Buna-N with Brass Fittings • Viton O-rings with Stainless Steel fittings
VALVES:	Brass or Stainless Steel Cartridge Type (Optional)
MOUNTING INSERTS:	10-32 UNF x 3/8"
MAXIMUM TEMPERATURE:	150°F (65 °C)
MAXIMUM PRESSURE:	100 PSIG (690 kPa)



Válvula de expansión V-II.1

Por último, para el caso de la válvula de expansión, no se ha encontrado una que se adecúe a las características de diseño calculadas para ella, por lo que se ha seleccionado una de características similares. En este caso de la marca comercial Parker. El precio en este caso es orientativo, ya que esta válvula está diseñada para tratar con caudales inferiores.



Fig. II. 11. Válvula de expansión.

Catalizador.

Resulta necesario estimar los costes relativos al catalizador, ya que estos resultan ser bastante caros. Para ello, se ha consultado la casa comercial Sigma Aldrich, que es una de las distribuidoras de PW-Amberlita. En la Fig. II. 12 se recoge el precio equivalente a 500 gramos de catalizador.

Amberlite® IRA900 chloride form
 ★★★★★ (0) [Escriba un reseña](#)
 chloride form

Número MDL: **MFCD00132712** ID de la sustancia en PubChem: **329752189**

Número de referencia del producto (SKU)	Tamaño de envase	Disponibilidad	Precio	Cantidad
216585-500G	500 G	✓ Disponible para envío el 20 de junio de 2023 Detalles...	110,00 €	<input type="text" value="1"/> <input type="button" value="-"/> <input type="button" value="+"/>

Fig. II. 12 Coste asociado al catalizador PW-Amberlita IRA 900.

II.7.D OTROS.

Tabla II. 28 Catálogo de tuberías.



Philadelphia Regional Center
2450 Wheatcroft Lane
Philadelphia, PA 19137
O 215-831-0700
F 215-533-1645
E sales@tiogapipe.com

Houston Regional Center
14950 Heathrose Forest Parkway,
Suite 200, Houston, TX 77032
O 713-433-2111
F 281-307-0132
E sales@tiogapipe.com

Chattanooga Regional Center
1301 Riverfront Parkway, Suite 108
Chattanooga, TN 37402
O 423-890-3308
F 423-890-0605
E sales@tiogapipe.com

PIPE DIMENSIONS AND WEIGHTS

Available in commercial and nuclear

U.S./METRIC

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID		
		INCH	MM	INCH	MM	LBS/FOOT	KG/METER	INCH	MM	
1/8 6	0.405 10.3	10 STD	40	105	0.049	1.24	0.10	0.28	0.307	7.82
		XS	80	405	0.068	1.73	0.24	0.37	0.269	6.84
		80S	80	805	0.095	2.41	0.31	0.47	0.215	5.84
1/4 8	0.540 13.7	10 STD	40	105	0.065	1.65	0.33	0.49	0.410	10.40
		XS	80	405	0.088	2.24	0.43	0.63	0.364	9.22
		80S	80	805	0.119	3.02	0.54	0.80	0.302	7.66
3/8 10	0.675 17.1	10 STD	40	105	0.065	1.65	0.42	0.63	0.545	13.80
		XS	80	405	0.091	2.31	0.57	0.84	0.493	12.48
		80S	80	805	0.126	3.20	0.74	1.10	0.423	10.70
1/2 15	0.840 21.3	5 STD	40	55	0.065	1.65	0.54	0.80	0.710	18.00
		10 STD	40	105	0.083	2.11	0.67	1.00	0.674	17.08
		XS	80	405	0.109	2.77	0.85	1.27	0.622	15.76
		XS	80	805	0.147	3.73	1.09	1.62	0.546	13.84
		160	40	805	0.188	4.78	1.31	1.95	0.464	11.74
		XX	40	805	0.294	7.47	1.72	2.55	0.252	6.36
3/4 20	1.050 26.7	5 STD	40	55	0.065	1.65	0.69	1.03	0.920	23.40
		10 STD	40	105	0.083	2.11	0.86	1.28	0.884	22.48
		XS	80	405	0.113	2.87	1.13	1.69	0.824	20.96
		XS	80	805	0.154	3.91	1.48	2.20	0.742	18.88
		160	40	805	0.219	5.56	1.95	2.90	0.612	15.58
		XX	40	805	0.308	7.82	2.44	3.64	0.434	11.06
1 25	1.315 33.4	5 STD	40	55	0.065	1.65	0.87	1.29	1.185	30.10
		10 STD	40	105	0.109	2.77	1.41	2.09	1.097	27.86
		XS	80	405	0.133	3.38	1.68	2.50	1.049	26.64
		XS	80	805	0.179	4.55	2.17	3.24	0.957	24.30
		160	40	805	0.250	6.35	2.85	4.24	0.815	20.70
		XX	40	805	0.358	9.09	3.66	5.45	0.599	15.22
1-1/4 32	1.660 42.2	5 STD	40	55	0.065	1.65	1.11	1.65	1.530	38.90
		10 STD	40	105	0.109	2.77	1.81	2.69	1.442	36.66
		XS	80	405	0.140	3.56	2.27	3.39	1.380	35.08
		XS	80	805	0.191	4.85	3.00	4.47	1.278	32.50
		160	40	805	0.250	6.35	3.77	5.61	1.160	29.50
		XX	40	805	0.382	9.70	5.22	7.77	0.896	22.80
1-1/2 40	1.900 48.3	5 STD	40	55	0.065	1.65	1.28	1.90	1.770	45.00
		10 STD	40	105	0.109	2.77	2.09	3.11	1.682	42.76
		XS	80	405	0.145	3.68	2.72	4.05	1.610	40.94
		XS	80	805	0.200	5.08	3.63	5.41	1.500	38.14
		160	40	805	0.281	7.14	4.86	7.25	1.338	34.02
		XX	40	805	0.400	10.15	6.41	9.55	1.100	28.00
2 50	2.375 60.3	5 STD	40	55	0.065	1.65	1.61	2.39	2.245	57.00
		10 STD	40	105	0.109	2.77	2.64	3.93	2.157	54.76
		XS	80	405	0.154	3.91	3.66	5.44	2.067	52.48
		XS	80	805	0.218	5.54	5.03	7.48	1.939	49.22
		160	40	805	0.344	8.74	7.47	11.11	1.687	42.82
		XX	40	805	0.436	11.07	9.04	13.44	1.503	38.16
2-1/2 65	2.875 73.0	5 STD	40	55	0.083	2.11	2.48	3.69	2.709	68.78
		10 STD	40	105	0.120	3.05	3.53	5.26	2.635	66.90
		XS	80	405	0.203	5.16	5.80	8.63	2.469	62.68
		XS	80	805	0.276	7.01	7.67	11.41	2.323	58.98
		160	40	805	0.375	9.53	10.02	14.92	2.125	53.94
		XX	40	805	0.552	14.02	13.71	20.39	1.771	44.96
3 80	3.500 88.9	5 STD	40	55	0.083	2.11	3.03	4.52	3.334	84.68
		10 STD	40	105	0.120	3.05	4.34	6.46	3.260	82.80
		XS	80	405	0.216	5.49	7.58	11.29	2.968	77.92
		XS	80	805	0.300	7.62	10.26	15.27	2.800	73.66
		160	40	805	0.438	11.13	14.34	21.35	2.624	66.64
		XX	40	805	0.600	15.24	18.60	27.68	2.300	58.42
3-1/2 90	4.000 101.6	5 STD	40	55	0.083	2.11	3.48	5.18	3.834	97.38
		10 STD	40	105	0.120	3.05	4.98	7.41	3.760	95.50
		XS	80	405	0.226	5.74	9.12	13.57	3.548	90.12
		XS	80	805	0.318	8.08	12.52	18.64	3.364	85.44
		160	40	805	0.636	16.15	22.87	34.03	2.728	69.30
		XX	40	805	0.883	22.11	30.92	5.84	4.334	110.08
4 100	4.500 114.3	5 STD	40	55	0.120	3.05	5.62	8.37	4.260	108.20
		10 STD	40	105	0.156	3.96	7.24	10.78	4.188	106.38
		XS	80	405	0.237	6.02	10.80	16.08	4.026	102.26
		XS	80	805	0.337	8.56	15.00	22.32	3.826	97.18
		120	40	805	0.438	11.13	19.02	28.32	3.624	92.04
		XX	40	805	0.531	13.49	22.53	33.54	3.438	87.32
4-1/2 115	5.000 127.0	5 STD	40	55	0.147	3.73	7.27	10.67	4.506	114.46
		10 STD	40	105	0.191	4.85	9.53	13.98	4.422	112.64
		XS	80	405	0.281	7.14	13.40	19.58	4.248	108.54
		XS	80	805	0.382	9.70	18.03	26.24	4.200	108.96
		160	40	805	0.710	18.03	32.56	48.45	3.580	90.94
		XX	40	805	1.010	25.65	44.44	64.99	3.000	76.20

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID		
		INCH	MM	INCH	MM	LBS/FOOT	KG/METER	INCH	MM	
5 125	5.563 141.3	5 STD	40	55	0.109	2.77	6.36	9.46	5.345	135.76
		10 STD	40	105	0.134	3.40	7.78	11.56	5.295	134.50
		XS	80	405	0.258	6.55	14.63	21.77	5.047	128.20
		XS	80	805	0.375	9.53	20.60	30.07	4.813	122.24
		120	40	805	0.500	12.70	27.06	40.28	4.563	115.90
		160	40	805	0.625	15.88	32.99	49.12	4.313	109.54
6 150	6.625 168.3	5 STD	40	55	0.109	2.77	7.59	11.31	6.407	162.76
		10 STD	40	105	0.134	3.40	9.20	13.83	6.357	161.50
		XS	80	405	0.258	6.55	14.63	21.77	6.249	158.74
		XS	80	805	0.375	9.53	20.60	30.07	6.065	154.08
		120	40	805	0.432	10.97	28.60	42.56	5.761	146.36
		160	40	805	0.562	14.27	36.43	54.21	5.501	139.76
7 175	7.625 193.7	5 STD	40	55	0.109	2.77	9.92	14.78	8.407	213.56
		10 STD	40	105	0.148	3.76	13.41	19.97	8.329	211.58
		XS	80	405	0.290	7.11	18.99	28.28	8.125	206.40
		XS	80	805	0.432	10.97	28.60	42.56	8.071	205.02
		120	40	805	0.562	14.27	36.43	54.21	7.981	202.74
		160	40	805	0.719	18.26	45.39	67.57	7.825	199.70
8 200	8.625 219.1	5 STD	40	55	0.109	2.77	13.41	19.97	11.880	301.00
		10 STD	40	105	0.148	3.76	17.00	25.16	11.802	299.02
		XS	80	405	0.322	8.18	28.58	42.55	11.643	296.44
		XS	80	805	0.406	10.31	35.67	53.09	11.513	294.48
		120	40	805	0.500	12.70	43.43	64.64	11.390	292.70
		160	40	805	0.594	15.09	51.00	75.92	11.277	290.92
9 225	9.625 244.5	5 STD	40	55	0.109	2.77	18.26	26.67	15.700	400.00
		10 STD	40	105	0.148	3.76	22.80	33.32	15.622	398.02
		XS	80	405	0.322	8.18	28.58	42.55	15.483	395.44
		XS	80	805	0.406	10.31	35.67	53.09	15.353	393.48
		120	40	805	0.500	12.70	43.43	64.64	15.230	391.70
		160	40	805	0.594	15.09	51.00	75.92	15.117	389.92
10 250	10.750 273.0	5 STD	40	55	0.134	3.40	22.80	33.32	19.482	496.20
		10 STD	40	105	0.165	4.19	28.67	42.55	19.404	494.22
		XS	80	405	0.322	8.18	28.58	42.55	19.265	491.64
		XS	80	805	0.406	10.31	35.67	53.09	19.135	489.68
		120	40	805	0.500	12.70	43.43	64.64	19.012	487.90
		160								

II.7.E CONCLUSIONES

Una vez finalizados los cálculos y el diseño del proceso contemplado en esta área, se ha llegado a una serie de conclusiones que, a pesar de haberse mencionado con anterioridad en algunos de los puntos de la memoria, se comentarán a continuación a modo de resumen.

En relación al diseño del reactor de síntesis del óxido de limoneno, R-II.1 (véase Fig. II. 1) y con el fin de manejar el flujo a tratar en esta sección, resulta necesario emplear un reactor relativamente pequeño. Esto hace que las dimensiones obtenidas tras su diseño lo asemejen más a un equipo de trabajo en planta piloto o incluso a escala de laboratorio, que a escala industrial (apartado II.3.1.4).

Esto ocurre porque a pesar de que se parte de una cantidad bastante elevada de cáscara de naranja, materia prima inicial, al someterse a los tratamientos necesarios para extraer el aceite esencial D-limoneno, materia prima de esta sección, se obtienen rendimientos de proceso muy bajos (4,27%).

Como consecuencia, los flujos de materia prima que provienen del tratamiento contemplado en el Área I, y, por tanto, que constituyen parte de la alimentación del reactor previamente mencionado, son muy pequeños en comparación con los caudales tratados normalmente en la industria. Es por eso por lo que, cuando se procede a dimensionar y seleccionar los equipos auxiliares involucrados en el proceso, se obtienen valores de los parámetros de diseño muy pequeños y se decide instalar equipos más sencillos y económicos que realicen la misma función.

Por último, se debe destacar que, al tratarse de un proceso novedoso, que se encuentra actualmente en vías de investigación y desarrollo y, por tanto, no se ha implantado ni testado a nivel industrial, se han tomado las decisiones oportunas en base a los conocimientos adquiridos a lo largo del Grado y a la escasa bibliografía disponible acerca de este tema concreto. No obstante, la implantación de este proceso en la industria una vez desarrollado en base a la investigación y experimentación necesarias, supondría un gran avance a nivel mundial, pudiendo llegar a fabricarse un polímero sin tener que acudir a materias primas no renovables.



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**ÁREA III: PURIFICACIÓN DEL
ÓXIDO DE LIMONENO**

por

Nuria Castaño Menéndez

Oviedo, julio de 2023

ÍNDICE

III.1. INTRODUCCIÓN	212
III.2. DIAGRAMA DE FLUJO	214
III.3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO	216
III.3.1. SELECCIÓN DEL MÉTODO DE SEPARACIÓN	217
III.3.1.1 Decantación y destilación binaria	217
III.3.1.2 Destilación multicomponente	219
III.3.2. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO DE SEPARACIÓN SELECCIONADO	221
III.3.3. COLUMNA DE DESTILACIÓN	223
III.3.4. EQUIPOS AUXILIARES	224
III.3.4.1. Sistema de bombeo B-III.1/B-III.2	224
III.3.4.2 Tanque pulmón T-III.1	224
III.4. DISEÑO MECÁNICO	226
III.5. ANÁLISIS DE COSTES	229
III.6. BIBLIOGRAFÍA	231
III.7. ANEXOS	233
III.A. SÍMBOLOS	233
III.B. CÁLCULOS	234
III.B.1. Diseño y dimensionado del decantador	236
III.B.2. Diseño y dimensionado de la columna de destilación	242
III.B.3. Sistema de bombeo	247
III.B.4. Tanque pulmón	251
III.B.5. Diseño mecánico	252
III.C. COSTES	256
III.D. OTROS	260

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla III.1	Densidades de las fases introducidas al decantador	218
Tabla III.2	Parámetros obtenidos del diseño del decantador	218
Tabla III.3	Volatilidad relativa de cada componente respecto al óxido de limoneno (Zapata <i>et.al.</i> , 2009)	220
Tabla III.4	Parámetros de diseño y de operación obtenidos en la simulación (Zapata <i>et.al.</i> , 2012)	221
Tabla III.5	Simulación del proceso en Aspen Plus (Zapata <i>et.al.</i> , 2012)	222
Tabla III.6	Composición de la corriente de alimentación a la columna	222
Tabla III.7	Composición del destilado y del residuo	223
Tabla III.8	Parámetros de diseño de la columna de destilación D-III.1	223
Tabla III.9	Diseño de las bombas B-III.1 y B-III.2	224
Tabla III.10	Parámetros de diseño del tanque T-III.1	225
Tabla III.11	Diseño mecánico del equipo según el código ASME	228
Tabla III.12	Coste de adquisición de los equipos	230
Tabla III.13	Densidades de los compuestos presentes en la mezcla	237
Tabla III.14	Flujo molar, fracción molar y densidad de cada fase	238
Tabla III.15	Viscosidad de los compuestos de la fase dispersa	238
Tabla III.16	Flujo másico y volumétrico de la fase continua	239
Tabla III.17	Alturas relativas del decantador	240
Tabla III.18	Flujo másico y volumétrico de la fase dispersa	241
Tabla III.19	Dimensiones del decantador	242
Tabla III.20	Volumen específico de los componentes presentes en el destilado	244
Tabla III.21	Diseño de los platos de la columna de destilación	247
Tabla III.22	Longitud equivalente de diversos accesorios (Towler y Sinnott, 2008)	250
Tabla III.23	Parámetros obtenidos en el diseño de las bombas B-III.1 y B-III.2	251
Tabla III.24	Diseño del tanque T-III.1	252
Tabla III.25	Diseño de depósitos a presión según el código ASME (Walas, 2012)	254
Tabla III.26	Cálculo del espesor de las paredes del equipo	255
Tabla III.27	Datos para la determinación del coste de la columna D-III.1	257
Tabla III.28	Cálculo del coste del tanque T-III.1	258
Tabla III.29	Especificaciones de las bombas peristálticas B-III.1 y B-III.2	259
Tabla III.30	Catálogo de tuberías (Tioga, 2013)	260

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. III.1	Diagrama de flujo Área III	215
Fig. III.2	Esquema de un decantador vertical (Towler y Sinnott, 2008)	217
Fig. III.3	Esquema de un decantador horizontal (Towler y Sinnott, 2008)	217
Fig. III.4	Esquema de un plato perforado (Towler y Sinnott, 2008)	245
Fig. III.5	Relación entre el área del vertedero y su longitud (Towler y Sinnott, 2008)	245
Fig. III.6	Relación entre el diámetro de agujeros y la distancia entre ellos (Towler y Sinnott, 2008)	246
Fig. III.7	Diagrama de <i>Moody</i> (Towler y Sinnott, 2008)	248
Fig. III.8	Determinación del diámetro óptimo de tubería (Peters <i>et.al.</i> , 2003)	249
Fig. III.9	Coste de la columna de destilación, incluyendo instalación y auxiliares (Peters <i>et.al.</i> , 2003)	256
Fig. III.10	Factores para el cálculo de la inversión de capital (Walas, 2012)	257
Fig. III.11	Coste del tanque pulmón T-III.1 (Peters <i>et.al.</i> , 2003)	258
Fig. III.12	Esquema de las bombas peristálticas B-III.1 y B-III.2	259

III.1 INTRODUCCIÓN

En esta sección se desarrolla el diseño de un equipo de separación de los componentes que forman el efluente del reactor de epoxidación R-II.1. Dicho efluente se trata de una mezcla no ideal formada por dos fases líquidas inmiscibles. Una de ellas se compone de agua, peróxido de hidrógeno y acetonitrilo, y la otra, de limoneno y óxido de limoneno. Esta operación resulta necesaria debido al elevado grado de pureza del óxido de limoneno requerido en la posterior reacción de síntesis del PCL, siendo este de un 97% o superior.

Como método de separación se selecciona una destilación multicomponente tras haber realizado un análisis de las posibles alternativas de purificación. Entre estas alternativas se han considerado las siguientes:

1. Proceso de decantación seguido de una destilación binaria.

La separación de dos fases líquidas, de líquidos inmiscibles o parcialmente miscibles constituye una de las operaciones más utilizadas en la industria, siendo la decantación el proceso más simple, puesto que es posible gracias al efecto de la gravedad. Esta operación se basa en la diferencia de densidad entre líquidos. Así, mediante esta alternativa se busca la separación de las dos fases líquidas descritas anteriormente, obteniéndose en la parte inferior del decantador la mezcla más densa (limoneno y óxido de limoneno), siendo esta la fase dispersa, mientras que en la parte superior se recoge la mezcla constituida por agua, peróxido de hidrógeno y acetonitrilo, que presenta menor densidad y constituye la fase continua.

Si la decantación se lleva a cabo con éxito, suponiendo una eficacia de separación del 100%, el limoneno y el óxido de limoneno se llevan a una torre de destilación con el fin de recuperar el óxido de limoneno con la pureza deseada en la siguiente etapa del proceso, correspondiente a la síntesis del policarbonato de limoneno (PCL).

2. Destilación multicomponente

Para analizar con detalle esta alternativa, se plantea un cálculo preliminar de los parámetros de diseño del equipo necesario para llevar a cabo esta separación. Al tratarse de una mezcla no ideal, los coeficientes de actividad cobran especial importancia, pero debido a la falta de información acerca de los compuestos con los que se trabaja, resulta complicada su estimación. Por ello, se emplean los datos extraídos de la simulación del proceso de destilación mediante el programa Aspen Plus, disponible en la bibliografía (Zapata *et al.*, 2012) para realizar el dimensionado del equipo y estimar las cantidades recuperadas de cada componente.

III.2 DIAGRAMA DE FLUJO

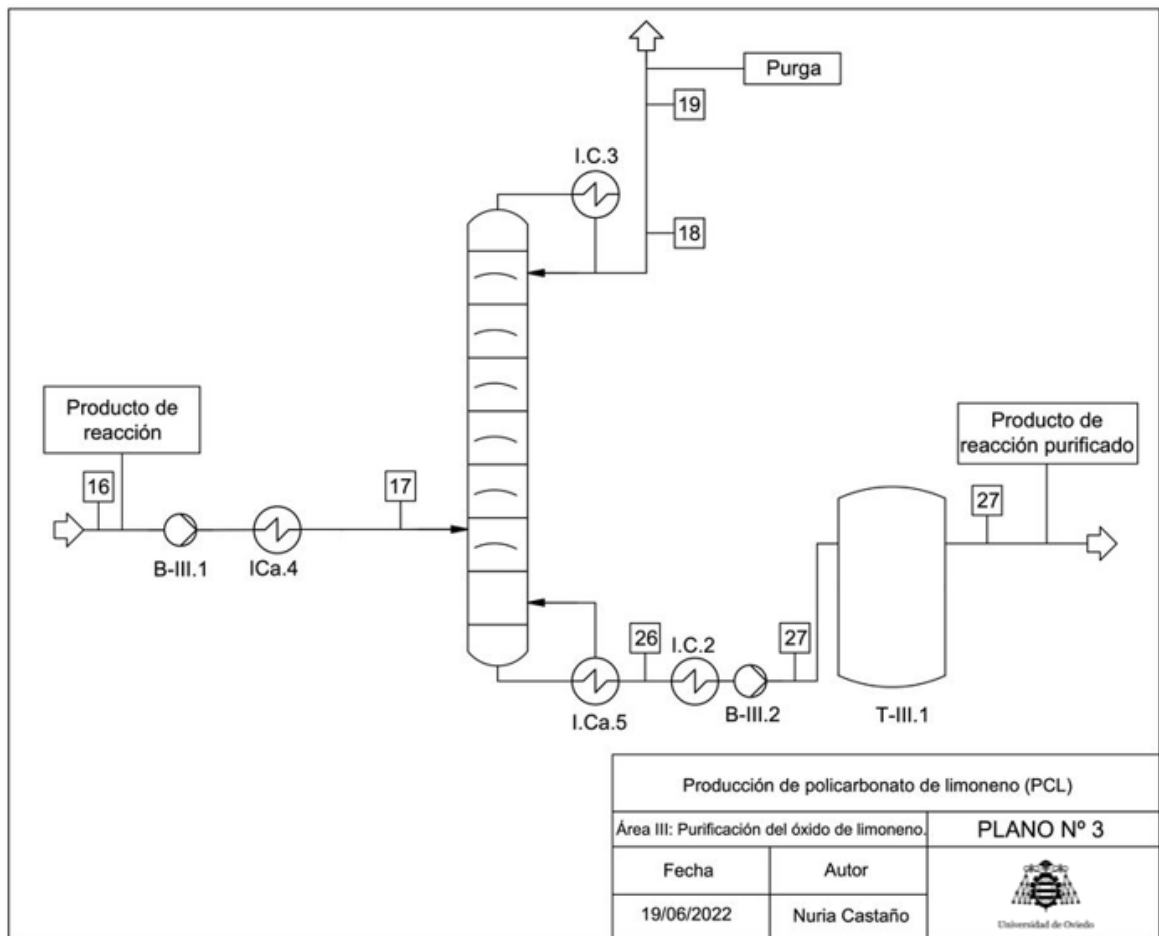


Fig. III.1. Diagrama de flujo del Área III.

III.3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

III.3.1. SELECCIÓN DEL MÉTODO DE SEPARACIÓN

Como se ha descrito anteriormente, se valoran dos alternativas de separación: Una decantación seguida de una destilación binaria ó una destilación multicomponente. En este apartado se describen las ventajas y los inconvenientes que presenta cada una de ellas y que han condicionado la selección de la alternativa.

III.3.1.1. Decantación y destilación binaria

El hecho de que el efluente del reactor esté formado por dos fases inmiscibles, lleva a considerar un proceso de decantación como una posible vía de separación de los componentes. Este proceso se trata de uno de los más utilizados en la industria para la separación de dos fases líquidas, de líquidos inmiscibles o parcialmente miscibles. Además, resulta interesante por su simplicidad, ya que su principio de funcionamiento se basa en la acción de la gravedad.

Existen múltiples formas para los recipientes en los que se realiza la decantación, siendo el recipiente cilíndrico el más habitual y económico (Towler y Sinnott 2008).

En las Figuras III.2 y III.3 se muestra un esquema de los diseños típicos para este tipo de equipo, correspondientes a un decantador vertical y a uno horizontal, respectivamente.

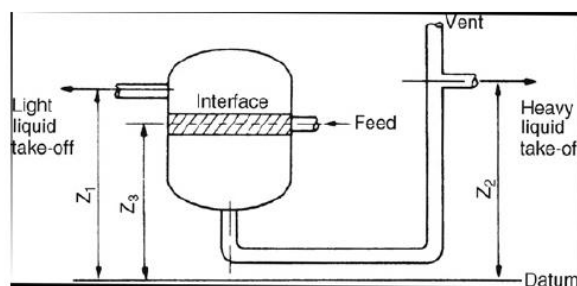


Fig. III.2. Esquema de un decantador vertical (Towler y Sinnott 2008).

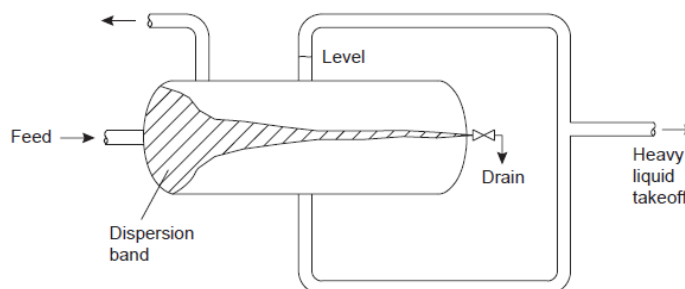


Fig. III.3. Esquema de un decantador horizontal (Towler y Sinnott 2008).

En la corriente de salida del reactor se distingue una fase menos densa, formada por agua, peróxido de hidrógeno y acetonitrilo, y una fase más densa, constituida por limoneno y óxido de limoneno. La primera de ellas se trata de la fase continua, que está en mayor proporción, mientras que la segunda es la denominada fase dispersa.

Tras introducir la mezcla bifásica en el decantador, este proporciona el tiempo de residencia necesario como para que ambas fases se separen, obteniéndose por la parte inferior del equipo la fase más densa y, por la superior, la fase menos densa.

Las densidades de cada una de estas fases se muestran en la Tabla III.1 y su cálculo se desarrolla en el Anexo III.B.1.

Tabla III.1. Densidades de las fases introducidas al decantador

Fase	Componentes	Densidad (kg/m ³)
Más densa (Dispersa)	C ₁₀ H ₁₆	916,02
	C ₁₀ H ₁₆ O	
Menos densa (Continua)	H ₂ O	903,04
	H ₂ O ₂	
	C ₂ H ₃ N	

Tras realizar el diseño del decantador necesario para efectuar esta separación se obtienen valores muy por encima de los aceptables según los recopilados en la bibliografía. Entre ellos, el tiempo de residencia de las gotas en la banda de dispersión (tr_d), cuyo valor recomendado se encuentra entre 2 y 5 minutos con el fin de poder llevar a cabo acciones de control (Towler y Sinnott 2008) y, sin embargo, el valor obtenido para este parámetro es muy inferior, como se muestra en la Tabla III.2. Por este motivo, se descarta la opción de elegir esta alternativa como operación de separación de componentes y, en consecuencia, tampoco se lleva a cabo la destilación binaria posterior.

Por otra parte, tras calcular el diámetro de gota máximo que sería arrastrado (d_c), se observa que es superior a 150 μm , como puede observarse en la Tabla III.2. Esto no es posible, puesto que se considera que, por lo general, las gotas tienen este tamaño (Towler y Sinnott 2008).

Tabla III.2. Parámetros obtenidos del diseño del decantador.

tr_d (min)	0,89
d_c (μm)	287

El procedimiento de cálculo seguido para obtener los parámetros que se muestran en la Tabla III.2 se desarrolla en el Anexo III.B.1.

III.3.1.2. Destilación multicomponente

Una segunda alternativa de separación considerada ha sido un proceso de destilación multicomponente. Con ella, se pretende purificar el óxido de limoneno empleado como materia prima en la síntesis del PCL, mediante su separación del resto de los componentes que forman la alimentación (H_2O , H_2O_2 , $C_{10}H_{16}$ y C_2H_3N).

Para poder conocer cómo va a desarrollarse la destilación, es necesario ordenar los componentes que forman la corriente de alimentación de la columna de destilación siguiendo el orden de su volatilidad relativa (α). Los componentes volátiles se denominan “ligeros”, mientras que los menos volátiles reciben el nombre de “pesados”.

A continuación, debe establecerse cuáles son los componentes clave, puesto que la dificultad de la separación, medida en términos del número de platos necesarios para una determinada relación de reflujo, viene dada por la cantidad de componentes clave en productos.

Se distingue entre componente clave ligero o *Light Key (LK)* y componente clave pesado o *Heavy Key (HK)*. El clave ligero es el componente ligero presente en mayor cantidad en el residuo, mientras que el clave pesado se corresponde con el componente más pesado obtenido en el destilado.

Por otra parte, es posible establecer la volatilidad relativa de un componente i (α_i) con respecto al clave pesado como el cociente entre el coeficiente de distribución de ese componente (m_i), y el coeficiente de distribución del componente clave pesado (m_{hk}), como se muestra en la ecuación III.1, (Treybal, 1968) :

$$\alpha_i = \frac{m_i}{m_{hk}} \quad [III. 1]$$

En cuanto a la estimación del número de platos mínimo a través del método de *Fenske-Underwood*, esta resulta más adecuada en el caso de mezclas ideales. Sin embargo, en este caso se trata de una mezcla no ideal, donde los coeficientes de actividad deben tenerse en cuenta. La expresión que permite calcular el número mínimo de platos por este método viene dado por la ecuación III.2, (Towler y Sinnott 2008):

$$\left[\frac{X_i}{X_r} \right]_d = \alpha_i^{Nm} \left[\frac{X_i}{X_r} \right]_b \quad [III. 2]$$

Donde

$\left[\frac{x_i}{x_r}\right]$ es la relación entre la concentración de cualquier componente i y la concentración de un componente de referencia r , y los sufijos d y b denotan el destilado (*tops*, d) y el residuo (*bottoms*, b).

N_m es el número total de etapas a reflujo total, teniendo en cuenta el calderín.

α_i es la volatilidad relativa del componente i respecto al componente de referencia

Debido a la falta de información sobre las propiedades físicas de los compuestos con los que se trabaja en este proceso y al desconocerse las condiciones de operación de la columna de destilación, se toman los valores de volatilidad relativa de cada compuesto (α_i) con respecto al óxido de limoneno extraídos de la bibliografía, los cuales se consideran constantes a lo largo de la columna (Zapata *et.al.*, 2009). Para su estimación se requiere el empleo de las ecuaciones III.3 y III.4.

$$y_{i,epox} = \frac{y_i P_i^s}{y_{epox} P_{epox}^s} \quad \text{[III. 3]}$$

$$\ln P_i^s = C_{1i} + \frac{C_{2i}}{T + C_{3i}} + C_{4i}T + C_{5i} \ln(T) + C_{6i}T^{C_{7i}} \quad \text{[III. 4]}$$

Siendo $y_{i,epox}$ el coeficiente de actividad de cada compuesto con respecto al óxido de limoneno, T la temperatura ($^{\circ}\text{C}$), P_i^s la presión de vapor de saturación de cada componente (atm) y $C_{1,2,3\dots}$ las constantes de la ecuación de *Antoine* de cada uno de los compuestos presentes en la mezcla.

En la Tabla III.3 se muestran los valores de la volatilidad relativa de cada componente con respecto al clave pesado (óxido de limoneno) citados anteriormente.

Tabla III.3 Volatilidad relativa de cada componente respecto al óxido de limoneno (Zapata *et.al.*, 2009)

Volatilidad relativa (α_i)	
H ₂ O	151
C ₂ H ₃ N	29,12
C ₁₀ H ₁₆	2,77

Las condiciones de operación se han estimado empleando los resultados obtenidos tras la simulación de este proceso de destilación mediante el programa Aspen Plus, recogidos en la bibliografía (Zapata *et.al.*, 2012). Estos parámetros se recogen en la Tabla III.4.

Tabla III.4. Parámetros de diseño y de operación obtenidos en la simulación (Zapata *et.al.*, 2012).

Temperatura de alimentación (°C)	77
Presión (atm)	1
Caída de presión, ΔP (atm)	0
Temperatura condensador (°C)	79,95
Temperatura calderín (°C)	206,15
Número de platos (incluyendo condensador y calderín)	8
Relación de reflujo	3,1

III.3.2. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO DE SEPARACIÓN SELECCIONADO

La separación descrita en los apartados anteriores se efectúa mediante una destilación multicomponente. En base a los resultados obtenidos tras la simulación del proceso de destilación en Aspen Plus (Zapata *et.al.*, 2012), se concluye que el H₂O y el C₂H₃N presentes en la corriente de salida del reactor se obtienen prácticamente en su totalidad en el destilado, junto con un 91% del C₁₀H₁₆ alimentado, mientras que el 95% del C₁₀H₁₆O introducido en la columna se recoge en el residuo.

En la Tabla III.5 se recogen los valores concretos de la cantidad de cada uno de los compuestos presentes en el flujo de alimentación de la columna de destilación, así como sus flujos molares tanto en el destilado como en el residuo, y sus fracciones molares.

Tabla III.5. Simulación del proceso en Aspen Plus (Zapata *et.al.*,2012)

Componente	Flujo molar (kmol/s)			Fracción molar		
	Alimentación	Destilado	Residuo	Alimentación	Destilado	Residuo
H ₂ O	64,44	62,44	3,8·10 ⁻⁸	0,16	0,18	1·10 ⁻⁹
C ₂ H ₃ N	27,98	27,98	8,5·10 ⁻⁵	0,72	0,79	2,4·10 ⁻⁶
C ₁₀ H ₁₆ O	12,09	11,05	1,05	0,03	0,03	0,03
C ₁₀ H ₁₆	35,90	1,52	34,38	0,09	4,3·10 ⁻³	0,97
TOTAL	390,2	354,8	35,43	1	1	1

Cabe destacar que en la Tabla III.5 no aparece el H₂O₂, por tanto, para poder diseñar el equipo en base a los resultados obtenidos de la simulación, no se ha considerado la cantidad de H₂O₂ que entra a la columna.

En la Tabla III.6 se muestra la composición de la alimentación que se pretende separar en concreto en este proyecto.

Tabla III.6. Composición de la corriente de alimentación a la columna

Componente	Alimentación	
	Flujo molar (mol/h)	Fracción molar
H ₂ O	3894	0,47
H ₂ O ₂	219,9	0,03
C ₂ H ₃ N	4063	0,49
C ₁₀ H ₁₆	28,69	3,43·10 ⁻³
C ₁₀ H ₁₆ O	168,5	0,02
TOTAL	8373,09	1

Partiendo de los datos recogidos en la Tabla III.5 y en base a los resultados extraídos de la simulación, se establecen las cantidades de cada compuesto obtenidas tanto en el destilado como en el residuo, considerando un 95% de recuperación del óxido de limoneno. (ver Tabla III.7).

Tabla III.7. Composición del destilado y del residuo

Componente	Flujo molar (mol/h)			Fracción molar		
	Alimentación	Destilado	Residuo	Alimentación	Destilado	Residuo
H ₂ O	3894	3894	$3,8 \cdot 10^{-8}$	0,47	0,49	$2,34 \cdot 10^{-10}$
H ₂ O ₂	219,9	-	-	0,03	-	-
C ₂ H ₃ N	4063	4063	$8,5 \cdot 10^{-5}$	0,49	0,51	$5,23 \cdot 10^{-7}$
C ₁₀ H ₁₆	28,69	26,09	2,60	$3,43 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-3}$	0,02
C ₁₀ H ₁₆ O	168,5	8,42	160,08	0,02	$1 \cdot 10^{-3}$	0,98
TOTAL	8373,09	7991,51	162,68	1	1	1

III.3.3. COLUMNA DE DESTILACIÓN

El tipo de equipo seleccionado para realizar la separación se trata de una columna de platos, puesto que las columnas de relleno son más recomendables cuando se trabaja a vacío o con sistemas que presentan tendencia a formar espumas (Walas 2012).

En cuanto al tipo de plato elegido, se prefiere el empleo de platos perforados, ya que son los más económicos y los más recomendables para la mayor parte de las aplicaciones. Además, presentan la ventaja de ser los que menor caída de presión producen, así como los que permiten un rango de operación más amplio (Towler y Sinnott 2008).

Los resultados obtenidos tras realizar el diseño de la columna se recogen en la Tabla III.8, mientras que el procedimiento de cálculo seguido para obtener estos valores se muestra con detalle en el Anexo III.B.2.

Tabla III.8. Parámetros de diseño de la columna de destilación D-III.1.

Diámetro de la columna (m)	0,54
Número de platos reales	7
Espaciado entre platos (m)	0,64
Altura de la columna (m)	7,19
Diámetro de orificios (mm)	9,53

De acuerdo con las reglas heurísticas, las torres deben diseñarse con una altura de, como máximo, 175 ft (53,34 m) debido a los posibles efectos del viento. Adicionalmente, se

establece otro criterio que sugiere una relación altura/diámetro inferior a 30 (Walas 2012). Si se observan los resultados recogidos en la Tabla III.8 se concluye que cumplen con estas reglas.

III.3.4. EQUIPOS AUXILIARES

III.3.4.1. Sistema de bombeo B-III.1 / B-III.2

En esta etapa del proceso se consideran necesarias dos bombas. La primera de ellas (B-III.1), para impulsar el efluente del reactor hasta la columna de destilación D-III.1, y, la segunda (B-III.2), para llevar el producto obtenido por colas en la columna de destilación hasta el tanque de almacenamiento T-III.1.

Los parámetros de diseño obtenidos para estas bombas se recogen en la Tabla III.9, y el procedimiento de cálculo seguido se explica en el Anexo III.B.3.

Tabla III.9. Diseño de las bombas B-III.1 y B-III.2.

Bomba	B-III.1	B-III.2
Tipo	Centrífuga de una etapa	Centrífuga de una etapa
Q (m ³ /h)	0,32	0,03
Δz (m)	- 4,37	- 3,44
ΔP (Pa)	0	0
ΔP_f (Pa)	272587,32	896,41
W (J/kg)	-356,34	-94,94
η	0,45	0,45
P (W)	88,55	2,98

A la vista de los resultados recogidos en la Tabla III.8, se concluye que los requerimientos de potencia de ambas bombas son excesivamente bajos como para tratarse de una bomba a escala industrial. Por tanto, se decide emplear dos bombas peristálticas para impulsar las corrientes.

III.3.4.2. Tanque pulmón T-III.1

Se precisa de un tanque de almacenamiento (T-III.1) que contenga la corriente obtenida por colas en la columna de destilación D-III.1, correspondiente a la materia prima empleada en la síntesis del PCL.

Considerando para su diseño una relación altura/diámetro de 1,5 (Peters *et.al.*, 2003) y sobredimensionando el equipo un 10% por motivos de seguridad (Walas 2012) se obtienen

los valores recogidos en la Tabla III.10, mientras que los cálculos correspondientes se recogen en el Anexo III.B.4.

Tabla III.10. Parámetros de diseño del tanque T-III.1.

Equipo	T-III.1
$V_{\text{líquido}} \text{ (m}^3\text{)}$	12,81
$V_{\text{tanque}} \text{ (m}^3\text{)}$	14,23
$H_{\text{tanque}} \text{ (m)}$	3,44
$D_{\text{tanque}} \text{ (m)}$	2,29
$t_{\text{llenado}} \text{ (días)}$	60,05
$t_{\text{vaciado}} \text{ (días)}$	30,03

III.4. DISEÑO MECÁNICO

El diseño mecánico de la columna consiste en la determinación de los distintos espesores que la conforman. Este diseño es realizado siguiendo el código ASME de recipientes y calderas a presión (Peters *et.al.*, 2003).

La columna de destilación D-III.1 presenta un diámetro de 0,54 metros y en ella la presión de operación se mantiene constante a una atmósfera a lo largo de toda la columna. En cuanto a las temperaturas, la alimentación se introduce a 77°C, mientras que en el destilado y en el residuo se alcanzan temperaturas de 76,95 °C y 206,15 °C , respectivamente.

El diseño se realiza para las condiciones más desfavorables, siendo estas 206,15 °C y 298,463 kPa. Como material de construcción se selecciona acero inoxidable Tipo 304, compuesto por cromo, níquel y molibdeno, que le aporta resistencia a elevadas temperaturas (hasta 1000 °C) y mejora su resistencia a la corrosión en general (Peters, Timmerhaus y West 2003).

Los parámetros obtenidos tras realizar el diseño mecánico de la columna se recogen en la Tabla III.11 y los cálculos correspondientes se muestran con detalle en el Anexo III.B.5.

Tabla III.11. Diseño mecánico del equipo según el código ASME.

DISEÑO MECÁNICO DEL EQUIPO		
Referencia	D-III.1	
Equipo	Columna de destilación	
Función	Separación de los componentes del efluente del reactor R-II.1	
ESPECIFICACIONES		
Compuestos tratados	H ₂ O	
	C ₂ H ₃ N	
	C ₁₀ H ₁₆	
	C ₁₀ H ₁₆ O	
CONDICIONES DE OPERACIÓN		
Temperatura (°C)	Destilado	76,95
	Residuo	206,15
Presión (kPa)	101,325	
PARÁMETROS DE DISEÑO		
Temperatura (°C)	206,15	
Presión (kPa)	298,463	
Geometría	Cuerpo	Cilíndrica
	Cabezales	Toro esféricos
Diámetro (m)	0,54	
Altura (m)	9,09	
Espesor (m)	9,99·10 ⁻³	
Material de construcción	Tipo	Acero inoxidable Tipo 304
	Peso (kg)	139,85

III.5. ANÁLISIS DE COSTES

La determinación de los costes de los equipos necesarios se realiza utilizando las gráficas y tablas recogidas en el Anexo III.C.

Dichos costes se basan en datos del año 2002, y dado que los materiales de construcción y los costes de mano de obra están sujetos a inflación, es necesario actualizarlos. Uno de los métodos más empleados para ello se basa en los índices de costes.

La ecuación III.5 proporciona el coste actualizado de los equipos mediante el producto del coste en el año 2002 y el índice de costes, siendo este la relación entre el CEPCI (“*Chemical Engineering Plant Cost Index*”) actual y el correspondiente al año 2002 (Towler y Sinnott 2008).

La revista “*Chemical Engineering*” publica mensualmente el valor del índice de costes de las plantas de ingeniería. Así, se toma el valor más actual disponible, correspondiente al mes de abril de 2023, momento en el que el CEPCI resultó ser 803,4 (PCIB, s.f.).

$$\text{Coste}_{2023} = \text{Coste}_{2002} \left(\frac{\text{CEPCI}_{2023}}{\text{CEPCI}_{2002}} \right) \quad [\text{III. 5}]$$

Tabla III.12. Coste de adquisición de los equipos.

EQUIPO	Coste₂₀₀₂ (\$)	Coste₂₀₂₃ (\$)	Coste₂₀₂₃ (€)
Columna de destilación (D-III.1)	5714,19	12033,8	10950,76
Sistema de bombeo			
B-III.1	-	1330,76	1217,05
B-III.2	-	1330,76	1217,05
Tanque de almacenamiento			
T-III.1	39840	83899,66	76348,69
COSTE TOTAL₂₀₂₃ (\$)		89733,54	

III.6. BIBLIOGRAFÍA

Absolute Pipe Roughness (APR) - EnggCyclopedia. En línea. [s.f.] Disponible en: https://enggcyclopedia.com/2011/09/absolute-roughness/?utm_content=cmp-true.

[consultado el 15/06/2023].

BARRERA ZAPATA, R., VILLA, A.L. y MONTES DE CORREA, C., *Modeling and simulation of a batch distillation column for recovering limonene epoxide*, En línea. Revista *EIA*, 2012, 18, 131-141. ISSN: 1791-1237. Disponible en:

<https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=149225098010>. [consultado el 24/05/2023]

BARRERA ZAPATA, R., VILLA, A.L. y MONTES DE CORREA, C, “*Measurement of activity coefficients at infinite dilution for acetonitrile, water, limonene, limonene epoxide and their binary pairs*”. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 275 (2009), pp. 46-51.

CLARÁ, R.A., MARIGLIANO, A.C.G. y SÓLIMO, H.N., 2010. *Physicochemical Properties and vapor-liquid equilibrium data for steam-distilled lemon essential oil*. *Latin American Applied Research*, 40, 61-66.

Plant Cost Index Beta (PCIB) - Chemical Engineering. En línea [s.f.]. Disponible en:

<https://www.chemegonline.com/lant-cost-index-beta/>, [consultado el 20/06/2023]

PETERS, M.S., TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., *Plant design and economics for chemical engineers*. McGraw-Hill, 2003. ISBN 9780072392661.

Tioga Pipe - Pipe Supply Company. En línea. Tioga Pipe - Pipe Supply Company. [s. f.].

Disponible en: <https://www.tiogapipe.com/>. [consultado el 15/06/2023].

TOWLER, G.P. y SINNOTT, R.K., *Chemical engineering design: principles, practice and economics of plant and process design*. Butterworth-Heinemann, 2008. ISBN 9780750684231.

TREYBAL, R.E., *Mass-transfer Operations*. Second edition. McGraw-Hill, 1968. ISBN 9686046348.

WALAS, S.M., *Chemical process equipment: selection and design*. Third edition. Butterworth-Heinemann, 2012. ISBN 9780123969590.

Wolfram|Alpha: Making the world's knowledge computable. En línea. Wolfram|Alpha:

Computational Intelligence. [s. f.]. Disponible en: <https://www.wolframalpha.com/>. [consultado el 27/04/2023].

III.7. ANEXOS

III.A. SÍMBOLOS

α_i	Volatilidad relativa
A_a	Área activa
A_c	Sección de la columna
A_d	Área de descenso
A_h	Área ocupada por los orificios
A_i	Área de la interfase
A_p	Área perforada
ΔP	Caída de presión
ΔP_c	Caída de presión en la columna
ΔP_f	Caída de presión debida a la fricción
Δz	Diferencia de altura
C_c	Tolerancia a la corrosión
C_p	Calor específico
D	Flujo molar de destilado
D_c	Diámetro de la columna de destilación
d_c	Diámetro de las gotas de la fase continua
d_d	Diámetro de las gotas de fase dispersa
d_h	Diámetro de orificios
$D_{\text{ópt}}$	Diámetro óptimo
ρ_v	Densidad del vapor
ρ_i	Densidad del componente i
d_n	Diámetro nominal
ε	Rugosidad
E_j	Eficacia de las juntas
F_s	Factor de vapor
F_i	Flujo molar del componente i
g	Constante de gravitación universal
h_c	Altura de la columna de destilación
h_d	Altura de la banda de dispersión
L	Flujo molar de líquido
L_c	Caudal volumétrico de la fase continua
L_{eq}	Longitud equivalente

l_p	Distancia entre orificios
l_w	Longitud del vertedero
η	Eficacia
N	Número de etapas
N_o	Número de orificios
OD	Diámetro externo
PM_i	Peso molecular componente i
P_i^s	Presión de vapor de saturación
R	Relación de reflujo
Re	Número de Reynolds
S	Tensión máxima de trabajo que soporta el material de construcción
t	Espesor de las paredes
t_{rd}	Tiempo de residencia de las gotas en la banda de dispersión
u_c	Velocidad de la fase continua
u_d	Velocidad de sedimentación de las gotas de fase dispersa
\check{u}_v	Velocidad del vapor
V	Flujo molar de vapor
v	Volumen específico
\check{V}	Flujo volumétrico
\check{V}_c	Flujo volumétrico de la fase continua
\check{V}_d	Flujo volumétrico de la fase dispersa
μ_i	Viscosidad dinámica del componente i
W_{bomba}	Trabajo teórico requerido para el bombeo
W_i	Flujo másico del componente i
W_c	Flujo másico de la fase continua
W_d	Flujo másico de la fase dispersa
x_i	Fracción molar del componente i
λ_v	Calor latente de vaporización
z	Altura

III.B. CÁLCULOS

III.B.1. Diseño y dimensionado del decantador

De forma general, los decantadores son diseñados para operar en continuo. Sin embargo, en caso de instalar varias unidades de decantación operando por lotes, los criterios de diseño aplicados son los mismos que si la operación es en continuo, como en el caso descrito en este proyecto.

El dimensionado del decantador se realiza bajo la premisa de que la velocidad de la fase continua (u_c) debe ser inferior a la velocidad de sedimentación de las gotas de fase dispersa (u_d).

Suponiendo flujo de tapón, se calcula la velocidad de la fase continua como el cociente entre el flujo volumétrico de la fase continua (L_c) y el área de la interfase (A_i), tal y como indica la ecuación III.6 (Towler y Sinnott 2008):

$$u_c = \frac{L_c}{A_i} < u_d \quad \text{[III. 6]}$$

El cálculo de la velocidad de sedimentación de las gotas de fase dispersa se lleva a cabo aplicando la Ley de Stokes, que viene dada por la ecuación III.7 (Towler y Sinnott 2008):

$$u_d = \frac{d_d^2 g (\rho_d - \rho_c)}{18 \mu_c} \quad \text{[III. 7]}$$

Donde,

De forma preliminar, se selecciona un diámetro de gota de 150 μm , puesto que es inferior a los tamaños de gota normalmente presentes en la alimentación de los decantadores. Además, si tras aplicar la ley de Stokes para el cálculo de u_d se obtiene un valor de esta velocidad de sedimentación de gotas de la fase dispersa superior a $4 \cdot 10^{-3}$ m/s, se toma un valor de $4 \cdot 10^{-3}$ m/s (Towler y Sinnott 2008).

En cuanto a la densidad de cada una de las fases, se calcula su valor como el sumatorio del producto de la fracción en masa de cada componente en cada una de las fases por su densidad, como se indica a continuación en las ecuaciones III.8 y III.9:

$$\rho_c = \sum_i w_{i_c} \cdot \rho_{i_c} = \sum_i \frac{m_{i_c}}{m_{total_c}} \cdot \rho_{i_c} \quad \text{[III. 8]}$$

$$\rho_c = \sum_i w_{id} \cdot \rho_{id} = \sum_i \frac{m_{id}}{m_{totald}} \cdot \rho_{id} \quad [\text{III. 9}]$$

Siendo ρ_c la densidad de la fase continua y ρ_d la densidad de la fase dispersa, ambas en kg/m^3 .

En la Tabla III.13 se muestran las densidades de cada uno de los componentes implicados en la mezcla a la temperatura de salida del reactor, siendo esta 33°C . Por otra parte, el valor obtenido para la densidad de cada una de las fases tras aplicar las ecuaciones III.6 y III.7 se recogen en la Tabla III.14.

Tabla III.13. Densidades de los compuestos presentes en la mezcla.

Compuesto	Densidad (kg/m^3)
H ₂ O	994,76
H ₂ O ₂	1440
C ₂ H ₃ N	786
C ₁₀ H ₁₆	839,81
C ₁₀ H ₁₆ O	929

Todas estas densidades han sido extraídas de la web *Wolfram Alpha*, salvo en el caso de la densidad del limoneno (C₁₀H₁₆), para cuyo cálculo se ha empleado la ecuación III.10, que expresa la densidad en función de la temperatura (Clará *et.al.*, 2010).

$$\rho \text{ (kg/m}^3\text{)} = 1073,1 - 0,762 \cdot T \text{ (K)} \quad [\text{III. 10}]$$

Tabla III.14. Flujo molar, fracción molar y densidad de cada fase.

Compuesto	Flujo molar (mol/h)		Fracción molar		Densidad (kg/m ³)	
	Fase	Fase	Fase	Fase	Fase	Fase
	continua	dispersa	continua	dispersa	continua	dispersa
H ₂ O	3894	-	0,476	-		
H ₂ O ₂	218,9	-	0,027	-		
C ₂ H ₃ N	4063	-	0,497	-	903,04	916,02
C ₁₀ H ₁₆	-	28,69	-	0,145		
C ₁₀ H ₁₆ O	-	168,5	-	0,855		
TOTAL	8175,9	197,19	1	1		

A continuación, se calcula la viscosidad de la fase continua (μ_c), haciendo uso de la ecuación III.11 y de los datos recogidos en la Tabla III.15, que representan la viscosidad dinámica de cada uno de los compuestos que constituyen la fase continua, tomando una temperatura de 33°C .

$$\mu_c = \sum_i x_{i_c} \cdot \mu_i \quad \text{[III. 11]}$$

Tabla III.15. Viscosidad de los compuestos de la fase dispersa.

Compuesto	Viscosidad dinámica, μ (Ns/m ²)
H ₂ O	$7,49 \cdot 10^{-4}$
H ₂ O ₂	$1,21 \cdot 10^{-3}$
C ₂ H ₃ N	$3,5 \cdot 10^{-4}$

De esta forma, se obtiene un valor de la viscosidad dinámica de la fase dispersa de $5,63 \cdot 10^{-4}$ Ns/m².

Aplicando la ecuación III.7, se calcula el valor de la velocidad de sedimentación de las gotas de fase dispersa (u_d) de $1,12 \cdot 10^{-3}$ m/s.

Si la disposición del decantador es vertical, el cálculo del área de la interfase viene dado por la ecuación III.12 (Towler y Sinnott 2008):

$$A_i = \pi r^2 \quad \text{[III. 12]}$$

Siendo,

A_i = área de la interfase, m^2 .

r = radio del cilindro, m.

El área de la interfase puede calcularse como el cociente entre el caudal volumétrico de fase continua (\check{V}_c) entre la velocidad de sedimentación de las gotas de fase dispersa (u_d) obtenido anteriormente.

En la ecuación III.13 se describe el cálculo del flujo másico de la fase continua, como el sumatorio del producto entre el peso molecular de cada uno de los compuestos que constituyen esta fase por su flujo molar, en kg/s.

Por otra parte, el cálculo del caudal volumétrico de la fase continua (m^3/s) se realiza a través de la ecuación III.14, correspondiente al cociente entre el flujo másico de la fase continua y su densidad.

$$W_c = \sum_i \frac{PM_i \cdot F_{i_c}}{3600 \cdot 1000} \quad \text{[III. 13]}$$

$$\check{V}_c = \frac{W_c}{\rho_c} \quad \text{[III. 14]}$$

Los datos empleados para realizar estos cálculos se recogen en la Tabla III.16.

Tabla III.16. Flujo másico y volumétrico de la fase continua

Fase continua				
Compuesto	Peso molecular, P_M (g/mol)	Flujo molar, F (mol/h)	Flujo másico, W_c (kg/s)	Flujo volumétrico, Q_c (m^3/s)
H ₂ O	18	3894		
H ₂ O ₂	34,01	218,9	0,07	$7,52 \cdot 10^{-5}$
C ₂ H ₃ N	41,05	4063		

Así, resulta un área interfacial, A_i , de $0,07 m^2$.

Tras haber calculado el área interfacial (A_i), es posible determinar el diámetro del cilindro (d), así como su altura (h), considerando que una altura estimada como el doble del diámetro es un valor razonable para un decantador vertical (Towler y Sinnott 2008).

El diámetro del cilindro resulta $0,30 m$, mientras que su altura es de $0,6 m$.

A partir de la altura , pueden estimarse los valores de z_1 , z_2 y z_3 , mediante las ecuaciones III.15, III.16 y III.17 (Towler y Sinnott 2008):

$$z_1 = 0.9 \cdot h \quad \text{[III. 15]}$$

$$z_2 = \frac{(z_1 - z_3)\rho_1}{\rho_2} + z_3 \quad \text{[III. 16]}$$

$$z_3 = 0.5 \cdot h \quad \text{[III. 17]}$$

Se considera que z_1 se corresponde con un 90% de la altura del cilindro, mientras que z_3 se toma como la mitad de la altura, h .

El valor de z_2 es obtenido mediante el balance de presiones que se muestra a continuación:

$$(z_1 - z_3) \cdot \rho_1 \cdot g + z_3 \cdot \rho_2 \cdot g = z_2 \cdot \rho_2 \cdot g$$

Las diferentes alturas relativas a diferentes puntos obtenidas se muestran en la Tabla III.17.

Tabla III.17. Alturas relativas del decantador

z_1 (m)	0,54
z_2 (m)	0,30
z_3 (m)	0,55

Por otra parte, se considera que la banda de dispersión (h_d) se corresponde con un 10% de la altura del cilindro. Este parámetro se corresponde con la zona en la que tiene lugar la coalescencia y comienzan a separarse las fases (Towler y Sinnott 2008). El valor obtenido para este parámetro es de 0,06 m.

A su vez, la banda de dispersión permite calcular el tiempo de residencia de las gotas en ella, a través de la ecuación III.18. El tiempo de residencia recomendado se encuentra entre 2 y 5 minutos con el fin de poder realizar labores de control satisfactoriamente (Towler y Sinnott 2008):

$$tr_d = \frac{h_d}{u_d} \quad \text{[III. 18]}$$

El tiempo de residencia de las gotas en la banda de dispersión obtenido es de 0,89 minutos. Por tanto, resulta inferior al recomendado.

Es conveniente calcular el tamaño de las gotas de fase continua que podrían ser arrastradas por la fase dispersa, aplicando de nuevo la Ley de Stokes (ecuación III.7). Se considera satisfactorio un diámetro de gotas de fase continua inferior a 150 μm (Towler y Sinnott 2008).

Se despeja el tamaño de gota de fase continua de la ecuación III.7, resultando la ecuación III.19:

$$d_d = \left[\frac{u_d 18 \mu_c}{g(\rho_d - \rho_c)} \right]^{1/2} \quad \text{[III. 19]}$$

Para poder calcular el diámetro de las gotas de fase continua a partir de la ecuación III.19, es necesario calcular previamente la velocidad de la fase dispersa (v_d), siendo esta igual al cociente entre el caudal volumétrico de fase dispersa (\check{V}_d) y el área interfacial (A_i). Para calcular \check{V}_d se aplican las siguientes ecuaciones:

$$W_d = \sum_i \frac{PM_i \cdot F_{id}}{3600 \cdot 1000} \quad \text{[III. 20]}$$

$$\check{V}_d = \frac{W_d}{\rho_d} \quad \text{[III. 21]}$$

Tabla III.18. Flujo másico y volumétrico de la fase dispersa

Compuesto	Fase dispersa			
	Peso molecular, P_M (g/mol)	Flujo molar, F (mol/h)	Flujo másico, W_d (kg/s)	Flujo volumétrico, Q_d (m^3/s)
$\text{C}_{10}\text{H}_{16}$	136,25	28,69	0,01	$8,96 \cdot 10^{-6}$
$\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}$	152,23	168,5		

$$v_d = \frac{8,79 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}}{0,07 \text{ m}^2} = 1,28 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$$

$$d_d = \left[\frac{1,28 \cdot 10^{-5} \cdot 18 \cdot 5,63 \cdot 10^{-4}}{9,81 \cdot (916,02 - 903,04)} \right]^{1/2} = 2,87 \cdot 10^{-4} \text{ m} = 287 \mu\text{m}$$

El tamaño de gota de fase continua que puede ser arrastrado por la fase dispersa es superior a los 150 μm establecidos al principio, por lo que las gotas de fase continua serán

arrastradas por la fase dispersa. Esto hace que la decantación no sea factible para llevar a cabo esta separación.

Tabla III.19. Dimensiones del decantador

Diámetro, d (m)	0,30
Altura, h (m)	0,60
Altura desde el punto de referencia hasta el desbordamiento del líquido ligero, z_1 (m)	0,54
Altura desde el punto de referencia hasta el desbordamiento del líquido pesado, z_2 (m)	0,30
Altura desde el punto de referencia hasta la interfase, z_3 (m)	0,55

III.B.2. Diseño y dimensionado de la columna de destilación

III.B.2.1 Número de platos

Para la estimación del número de platos necesarios se requiere el empleo de la ecuación de *Fenske-Underwood* (ec. III.2) y de los datos recogidos en las Tablas III.3 y III.7. Se considera que los valores de la volatilidad relativa se corresponden con un valor medio que puede considerarse constante (Zapata *et.al.*, 2009).

El óxido de limoneno se identifica como el componente clave pesado, mientras que se establece que el acetonitrilo sea el componente clave ligero debido al valor de su volatilidad relativa y a que se encuentra presente en mayor cantidad en el residuo.

Tras aplicar la ecuación III.2, se determina que el número de platos mínimo (N_{\min}) es 6,11. Al este número de platos es necesario descontarle el plato correspondiente al calderín, puesto que, al estar trabajando con un condensador total, el calderín no supone una etapa de equilibrio, sino que en él únicamente se está produciendo un cambio de fase. A continuación, a los platos resultantes se les aplica la eficacia de plato para poder calcular el número de platos reales. Esta eficacia se encuentra entre un 60 y un 90% en el caso de soluciones acuosas (Walas 2012), por lo que se considera la mezcla a separar como una disolución acuosa y se toma un valor medio de eficacia de plato de un 75%. Así, el número de platos reales resulta ser de 6,81, que se aproximan a un total de 7 platos.

III.B.2.2 Diámetro de la columna

En este apartado se describen los cálculos realizados para obtener el valor del diámetro de la columna. Dicho diámetro será calculado para las condiciones del destilado.

En primer lugar, se calcula la cantidad de vapor producido a la salida de la columna, donde será condensado en su totalidad, regresando posteriormente una parte a la columna y otra, separándose como destilado, tal y como se indica en la ecuación III.22.

$$V = L + D \quad \text{[III. 22]}$$

Por otra parte, debe tenerse en cuenta el concepto de relación de reflujo (R), correspondiente a la relación molar entre el líquido que es regresado a la columna y el que se separa como destilado (Treybal 1968). Esta relación viene descrita por la ecuación III.23:

$$R = \frac{L}{D} \quad \text{[III. 23]}$$

De esta forma, es posible relacionar las ecuaciones III.22 y III.23 y, a partir de los datos recogidos en la Tabla III.7 es posible calcular el flujo molar de vapor obtenido en la parte superior de la columna a partir de la ecuación III.22:

$$V = D (R+1) \quad \text{[III. 24]}$$

Así, se obtiene un valor de 32760,39 mol/h de vapor.

A continuación, se calcula el flujo volumétrico de vapor. Para ello, es necesario determinar previamente el volumen específico del producto obtenido en el destilado, puesto que el flujo volumétrico puede obtenerse como el producto del flujo molar de vapor y el volumen específico del vapor.

El cálculo del volumen específico del vapor se realiza a partir de la ecuación III.25, teniendo en cuenta el volumen específico de cada uno de los compuestos que forman el destilado, así como su fracción molar. Estos datos se recogen en la Tabla III.20.

$$v = \sum_i x_i v_i \quad \text{[III. 25]}$$

Tabla III.20. Volumen específico de los componentes presentes en el destilado

Destilado		
Compuesto	Fracción molar	Volumen específico (m ³ /mol)
H ₂ O	0,49	0,02
C ₂ H ₃ N	0,51	0,05
C ₁₀ H ₁₆	0,03	0,17
C ₁₀ H ₁₆ O	0,01	0,16

Como resultado, se obtiene un volumen específico de 0,036 m³/mol.

A continuación, se calcula el flujo volumétrico de vapor como el producto entre el flujo molar de vapor y su volumen específico. Así, el flujo volumétrico de vapor resulta ser de 0,33 m³/s.

La máxima eficacia de los platos se obtiene para un valor del factor de vapor (F_s) entre 1 y 1,2 ft/s (Walas 2012). Por ello, se toma un valor medio de 1,1 ft/s.

A partir de la ecuación III.26 es posible determinar el valor de la velocidad del vapor a través de la columna. Para ello, es necesario calcular previamente la densidad del vapor, siendo esta 0,84 kg/m³.

$$F_s = \check{u}_v \sqrt{\rho_v} \quad [\text{III. 26}]$$

De esta forma, la velocidad con la que circula el vapor por la columna es de 4,80 m/s.

El cociente entre el flujo volumétrico de vapor y su velocidad proporciona el valor de la sección para el flujo, de la que se puede obtener el diámetro de la columna, siendo este 0,54 m.

III.B.2.3 Altura de la columna

Por razones de accesibilidad, el espaciado entre platos suele encontrarse entre 20 y 30 pulgadas (Walas 2012), por lo que se toma un valor medio de 25 pulgadas, correspondiente a 0,64 metros. Por otra parte, es necesario dejar un espacio libre para el líquido y para el vapor, por lo que se adicionan 4 ft en la parte superior de la columna y 6 ft en la parte inferior (Walas 2012). De esta manera, la altura de la columna resulta ser de 7,19 m.

III.B.2.4 Diseño de los platos

Como se ha indicado en el apartado III.3.3.1, se seleccionan platos de tipo perforado por ser los más económicos y los más recomendables para la mayor parte de las aplicaciones (Towler y Sinnott 2008). En la Figura III.4 se muestra un esquema de este tipo de platos. En ellos, el líquido pasa de un plato a otro a través de una serie de canales verticales denominados *downcomers*.

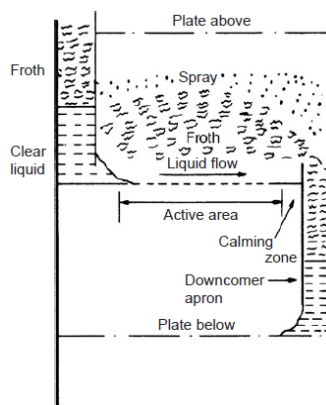


Fig. III.4. Esquema de un plato perforado (Towler y Sinnott 2008).

El área del canal de descenso (A_d) se corresponde con un 12% del área total, y también puede calcularse a partir de la Figura III.5, en la que se relaciona la longitud del vertedero (l_w) con su área.

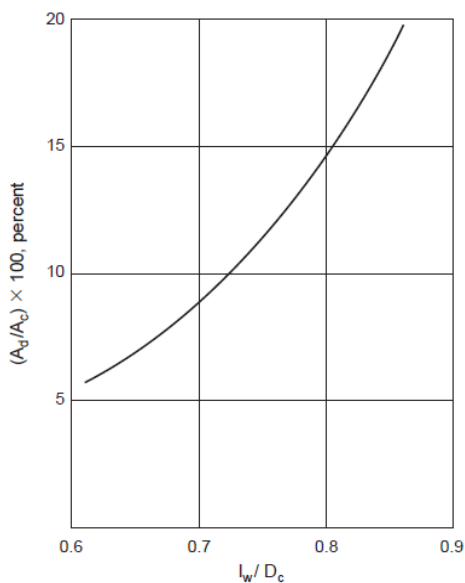


Fig. III.5. Relación entre el área del vertedero y su longitud (Towler y Sinnott 2008).

Se puede considerar que la longitud del vertedero se encuentra entre 0,6 y 8,85 veces el valor del diámetro de la columna. Por tanto, se toma un valor medio de 0,725 y se calcula l_w , resultando 0,39 m.

Una vez calculada la longitud del vertedero y haciendo uso de la Figura III.5 se determina que el área de descenso es de 0,020 m².

A continuación, se calcula el área correspondiente a la superficie perforada (A_p). Para ello, se emplea la Figura III.6, que relaciona el diámetro de los agujeros con la distancia entre ellos.

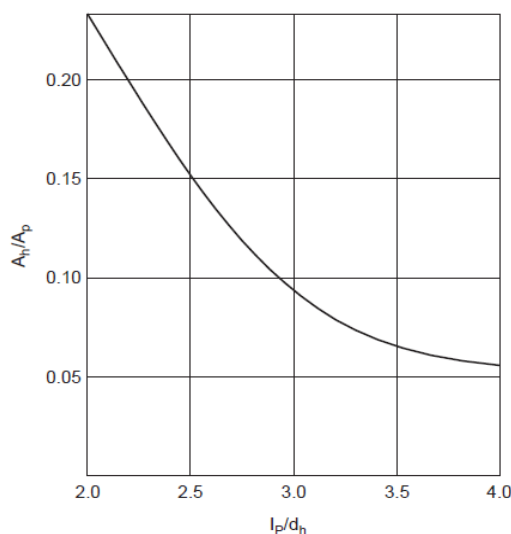


Fig. III.6. Relación entre el diámetro de agujeros y la distancia entre ellos (Towler y Sinnott, 2008).

Para el cálculo del diámetro de los orificios de los platos (d_h), se toma un valor medio entre las 0,20 y 0,50 pulgadas recomendadas (Walas 2012), resultando un diámetro de orificio de 0,375 pulgadas, correspondiente a 9,53 mm.

En cuanto a la distancia entre las perforaciones (l_p), esta no debe ser inferior al doble del diámetro de los orificios (Towler y Sinnott 2008). Por tanto, se considera que l_p es 19,05 mm.

Haciendo uso de las ecuaciones III.27 y III.28 es posible estimar cuál es la superficie ocupada por los orificios (A_h).

$$A_a = A_c - 2A_d \quad [\text{III. 27}]$$

$$A_h = 0,1A_a \quad [\text{III. 28}]$$

Así, el área ocupada por los orificios es de 0,019 m². Con este valor, se acude a la Figura III.6 y se determina que el área perforada es 0,074 m².

A continuación, se calcula el número de orificios necesarios como el cociente entre el área ocupada por los orificios y la superficie de un orificio, tal y como se indica en la ecuación III.29:

$$N_o = \frac{A_h}{\frac{\pi}{4} d_h^2} \quad [\text{III. 29}]$$

Tras aplicar la ecuación III.29, se concluye que son necesarios 246 orificios.

En la Tabla III.21 se resumen todos los valores citados anteriormente, correspondientes al diseño de los platos de la columna.

Tabla III.21. Diseño de los platos de la columna de destilación.

A_c (m ²)	0,23
A_d (m ²)	0,02
A_h (m ²)	0,02
A_p (m ²)	0,07
l_p (mm)	19,05
d_h (mm)	9,53
l_w (mm)	0,39
A_a (m ²)	0,19
N_o	246

III.B.3. Sistema de bombeo

El trabajo teórico requerido para el bombeo (W_{bomba}) se realiza a partir del balance que se muestra en la ecuación III.30.

$$g\Delta z + \frac{\Delta P}{\rho} - \frac{\Delta P_f}{\rho} - W = 0 \quad [\text{III. 30}]$$

Donde Δz se corresponde con la diferencia de alturas (m) entre el punto inicial y el final, ΔP la diferencia de presión entre ambos puntos (Pa) y ΔP_f la caída de presión ocasionada por la fricción provocada por la propia tubería y los accesorios (Pa).

Esta pérdida de presión debida a la fricción se calcula a partir de la ecuación III.31, donde f es el factor de fricción, que depende de la rugosidad relativa y del número de Reynolds. Estos parámetros se calculan a partir de las ecuaciones III.32 y III.33.

$$\Delta P_f = 8f \frac{L_{eqtotal}}{D_i} \frac{\rho u^2}{2} \tag{III.31}$$

$$\epsilon_{rel} = \frac{\epsilon_{abs}}{\rho} \tag{III.32}$$

$$Re = \frac{D_i u \rho}{\mu} \tag{III.33}$$

Para calcular la rugosidad relativa es necesario conocer el valor de la rugosidad absoluta, que depende del tipo de material de construcción, en este caso, acero inoxidable 316, cuya rugosidad absoluta es de 0,015 mm (APR, s.f.).

Tras realizar el cálculo de la rugosidad relativa y del número de Reynolds, se acude al diagrama de Moody (Fig. III.7) para determinar el factor de fricción.

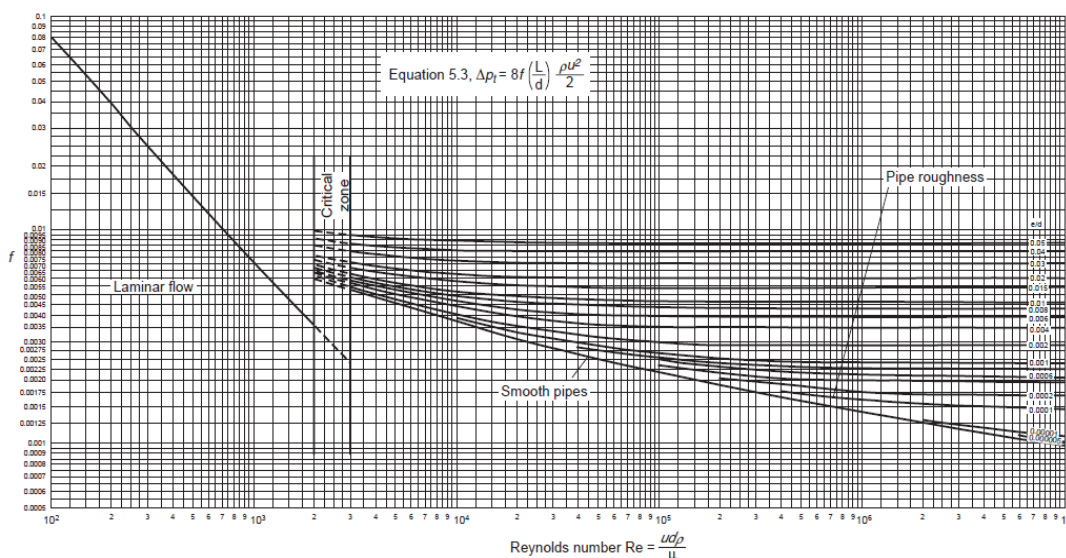


Fig. III.7. Diagrama de Moody (Towler y Sinnott 2008)

El cálculo del diámetro óptimo se lleva a cabo a partir del nomograma mostrado en la Figura III.8, donde, en función del tipo de régimen de flujo y del caudal volumétrico con el que se trabaje, se obtiene el valor del tamaño óptimo de tubería.

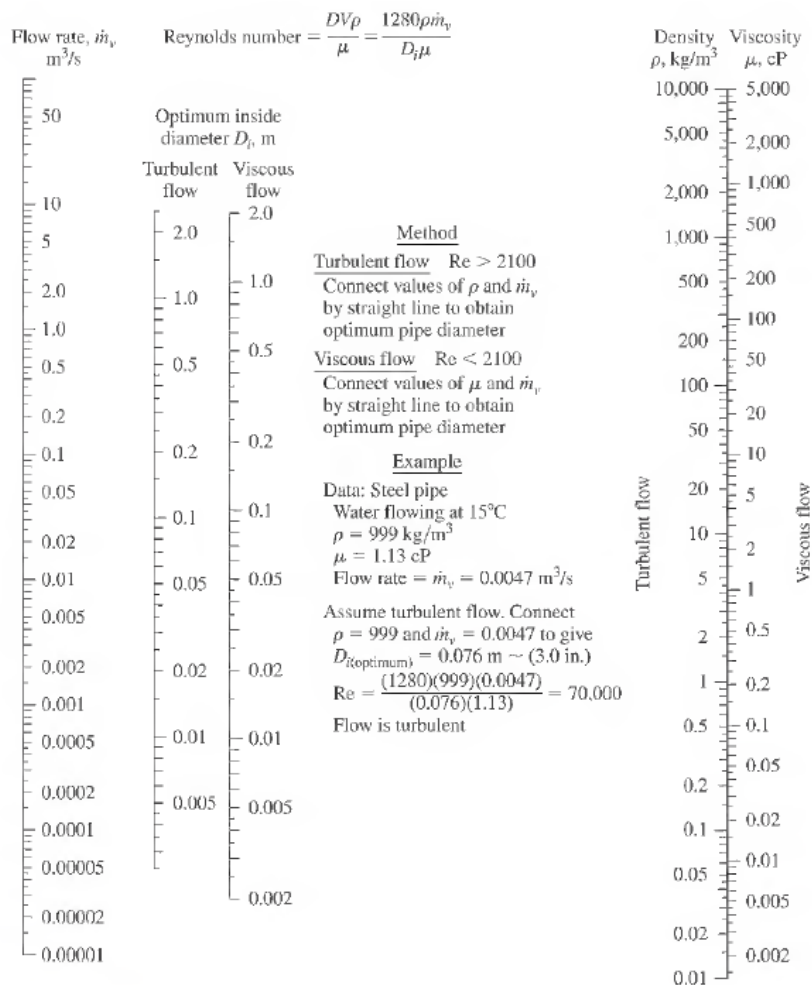


Fig. III.8. Determinación del diámetro óptimo de tubería (Peters *et al.*, 2003)

Una vez establecido el diámetro óptimo, debe acudir al catálogo de tuberías (Tioga, 2013), que se muestra en la Tabla III.30, recogida en el Anexo III.D para seleccionar el tamaño nominal de tubería más próximo. Dicho valor será el que se emplee en el resto de los cálculos realizados, entre ellos, la longitud equivalente (L_{eq}). Esta longitud viene dada por la suma de la longitud de la propia tubería más la longitud equivalente de los accesorios, determinada a partir de la Tabla III.22.

La longitud equivalente representa la relación entre la longitud efectiva (L') y el diámetro interno de la tubería considerado, de manera que para obtener la longitud efectiva es necesario multiplicar la longitud equivalente extraída de la Tabla III.22 por el diámetro óptimo de la tubería calculado anteriormente.

En el caso de la primera bomba, se tienen en cuenta como accesorios una válvula de puerta completamente abierta, tres codos estándar y la propia entrada a la columna, mientras que para la bomba B-III.2 se considera una válvula de puerta completamente abierta y cuatro

codos estándar, además de la entrada del fluido al tanque de almacenamiento T-III.1. La longitud de la propia tubería se estima en unos 7 metros, sin superar el valor superior recomendado, siendo este 12 metros .

Tabla III.22. Longitud equivalente de diversos accesorios (Towler y Sinnott 2008).

Fitting or Valve	K, Number of Velocity Heads	Number of Equivalent Pipe Diameters
45° standard elbow	0.35	15
45° long radius elbow	0.2	10
90° standard radius elbow	0.6–0.8	30–40
90° standard long elbow	0.45	23
90° square elbow	1.5	75
Tee-entry from leg	1.2	60
Tee-entry into leg	1.8	90
Union and coupling	0.04	2
Sharp reduction (tank outlet)	0.5	25
Sudden expansion (tank inlet)	1.0	50
Gate valve		
fully open	0.15	7.5
1/4 open	16	800
1/2 open	4	200
3/4 open	1	40
Globe valve, bevel seat-		
fully open	6	300
1/2 open	8.5	450
Globe valve, plug disk-		
fully open	9	450
1/2 open	36	1800
1/4 open	112	5600
Plug valve - open	0.4	18

Tras calcular el trabajo teórico, puede determinarse la potencia necesaria de las bombas mediante la ecuación III.34, donde G se corresponde con el flujo másico a impulsar (kg/s), y la eficacia (η) depende del tipo de bomba seleccionado.

Se selecciona una bomba centrífuga de una etapa, siendo esta el tipo de bomba más empleado en la industria de procesos químicos (Towler y Sinnott 2008).

En este caso, se ha elegido un valor de la eficacia de un 45%, puesto que es el indicado en la bibliografía para bombas centrífugas de una etapa trabajando con caudales de 100 gpm, siendo este el valor más bajo de caudal volumétrico disponible en la bibliografía consultada (Walas 2012).

$$\text{Potencia} = \frac{W_{\text{bomba}}G}{\eta} \quad [\text{III. 34}]$$

En la Tabla III.23 se recogen los valores obtenidos para cada uno de los parámetros descritos anteriormente.

Tabla III.23. Parámetros obtenidos en el diseño de las bombas B-III.1 y B-III.2.

Parámetro	B-III.1	B-III.2
d_n (mm)	10	6
Δz (m)	- 3,73	-3,44
ΔP (Pa)	0	0
ε_{rel}	$2 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-3}$
f	0,01	$3,5 \cdot 10^{-3}$
Re	61947,60	8388,54
L_{eq} (m)	8,98	8,19
ΔP_f (Pa)	272587,32	896,41
W (J/kg)	- 350,1	-194,94
P (W)	58	2,98

III.B.4. Tanque pulmón

Mediante la ecuación III.35 es posible determinar el volumen del tanque T-III.1, teniendo en cuenta la premisa indicada en la ecuación III.36.

$$V_{\text{tanque}} = \Pi \frac{D_{\text{tanque}}^2}{4} H_{\text{tanque}} \quad \text{[III. 35]}$$

$$\frac{H_{\text{tanque}}}{D_{\text{tanque}}} = 1,5 \quad \text{[III. 36]}$$

Dado que la siguiente etapa del proceso (síntesis del PCL) opera en discontinuo, produciendo un lote cada 16 horas, es necesario estimar el tiempo de llenado y vaciado del tanque T-III.1.

A partir del flujo molar (mol/h) es posible determinar el flujo molar diario introducido al tanque, así como el flujo de descarga diario, resultando este del producto entre el flujo molar y las 16 horas diarias empleadas en la producción de un lote de PCL. La diferencia entre ambos se corresponde con el flujo acumulado (mol/día) en T-III.1.

El tiempo de llenado (días) se obtiene mediante el cociente entre los moles de la mezcla líquida presentes en el tanque y los moles acumulados en un día, mientras que el

tiempo necesario para vaciar el tanque (días) resulta del cociente entre los moles de mezcla líquida contenidos en el tanque y los moles diarios descargados.

Los resultados obtenidos tras realizar los cálculos descritos anteriormente se recogen en la Tabla III.24.

Tabla III.24. Diseño del tanque T-III.1.

$V_{\text{tanque}} \text{ (m}^3\text{)}$	14,23
$V_{\text{líquido}} \text{ (m}^3\text{)}$	12,81
Líquido (mol)	78161,59
Flujo molar (mol/h)	162,7
Flujo molar diario (mol/día)	3904,8
Flujo molar descarga (mol/día)	2603,2
Flujo molar acumulado (mol/día)	1301,6
$t_{\text{llenado}} \text{ (días)}$	60,05
$t_{\text{vaciado}} \text{ (días)}$	30,03

A la vista de los resultados que se muestran en la Tabla III.23, se concluye que son necesarios dos meses para el llenado del tanque, mientras que en un mes sería posible su vaciado.

III.B.5. Diseño mecánico

Tomando un diámetro interno de 0,54 m para la columna de destilación, como se ha mencionado en el apartado III.4 y considerando que la columna tiene geometría cilíndrica, se procede a calcular el espesor de dicho cuerpo cilíndrico, empleando para ello la ecuación III.38, aplicable en el caso de cumplirse la condición descrita en la ecuación III.37.

Como temperatura de diseño se considera la del calderín, siendo esta 206,15 °C, por ser la más elevada, y, por tanto, el caso más desfavorable. En cuanto a la presión de diseño, se toma un valor de 298,46 kPa, obtenido tras adicionarle un 10 % a la presión máxima de operación, siendo esta 25 psia por encima de la presión normal de operación, en este caso, 1 atm (Walas 2012).

$$P \leq 0,385SE_j \quad \text{[III. 37]}$$

$$t = \frac{Pr_i}{SE_j - 0,6P} + C_c \quad \text{[III. 38]}$$

A continuación, se realiza el cálculo del espesor de los cabezales, para los cuales se selecciona una geometría toro esférica, por ser los más comunes (Peters *et.al.*, 2003). Para ello se hace uso de la ecuación III.39.

$$t = \frac{0,885PL_a}{SE_j - 0,1P} + C_c \quad \text{[III.39]}$$

Resulta necesario establecer los valores de determinados parámetros que aparecen en las ecuaciones III.36 y III.37 para poder determinar los correspondientes espesores. Entre estos parámetros se encuentran la eficacia de las juntas (E_j) y la tensión máxima de trabajo admisible para el material de construcción (S), cuyos valores se extraen de la Tabla III.23.

En cuanto a la eficacia de las juntas, se considera que estas presentan doble soldadura y están examinadas en todos sus puntos, por lo que E_j toma un valor de 1.

La tensión máxima de trabajo (S) depende tanto de la temperatura de diseño como del tipo de material empleado, en este caso, acero inoxidable Tipo 304. Se elige este material puesto que se trabaja con compuestos orgánicos, que pueden ocasionar la corrosión del material de construcción. Así, de la Tabla III.25 se extrae un valor de S de 72400 kPa.

Por último, se considera un valor de resistencia a la corrosión (C_c) de 0,35 pulgadas para condiciones de corrosión conocidas (Walas 2012).

Tabla III.25. Diseño de depósitos a presión según el código ASME (Walas 2012).

Joint efficiencies	Recommended stress values			
	Metal	Temp., °C	S, kPa	
For double-welded butt joints If fully radiographed = 1.0 If spot-examined = 0.85 If not radiographed = 0.70	Carbon steel (SA-285, Gr. C)	-29 to 343	94,500	
		399	82,700	
		454	57,200	
In general, for spot examined If electric resistance weld = 0.85 If lap-welded = 0.80 If single-butt-welded = 0.60	Low-alloy steel for resistance to H ₂ and H ₂ S (SA-387, Gr.12C1.1)	-29 to 427	94,500	
		510	75,800	
		565	34,500	
		649	6,900	
	High-tensile steel for heavy-wall vessels (SA-302, Gr.B)	-29 to 399	137,900	
		454	115,800	
		510	69,000	
		538	42,750	
	High-alloy steel for cladding and corrosion resistance	-29	128,900	
		343	77,200	
	Stainless 304 (SA-240)	427	72,400	
		538	66,900	
		-29	128,900	
		345	79,300	
	Stainless 316 (SA-240)	427	75,800	
		538	73,100	
		538	73,100	
	Nonferrous metals			
		Copper (SB-11)	38	46,200
		Aluminum	204	20,700
		Aluminum (SB-209, 1100-0)	38	15,900
		204	6,900	

Tras introducir estos valores en las ecuaciones III.36 y III.37, se calculan el espesor tanto del cuerpo cilíndrico como de los cabezales toro esféricos del equipo, siendo estos 0,0097 m y 0,0096 m, respectivamente.

Entre estos dos valores, se selecciona el mayor de ellos por motivos de seguridad. Por tanto, se toma un valor de espesor de las paredes de 0,0097 m. Con este valor se realiza el cálculo de la masa acero necesaria para construir el equipo. Para ello, se calcula el volumen total de la columna de destilación y se multiplica por la densidad del acero. Este volumen total se corresponde con la suma del volumen del cuerpo cilíndrico y el de los dos cabezales toro esféricos.

Para el cuerpo cilíndrico, puesto que el espesor es muy inferior a las dimensiones de la columna, se calcula su volumen como el producto de su superficie lateral por el espesor, como indica la ecuación III.40.

$$V_{\text{cuerpo cilíndrico}} = \pi r L t \quad [\text{III.40}]$$

Donde la longitud del cilindro, L, se supone igual al diámetro, puesto que son las proporciones óptimas cuando no se trabaja a presiones elevadas (Walas 2012).

En cuanto al cálculo del volumen de cada uno de los cabezales toro esféricos, este puede realizarse a partir de la ecuación III.41 (Walas 2012):

$$V_{\text{cabezal toro esférico}} = \Pi \frac{\left(OD + \frac{OD}{24} + at\right)^2 t}{4} \quad \text{[III. 41]}$$

El diámetro externo (OD) se corresponde con la suma del diámetro interno más dos veces el espesor, resultando su valor 0,557 m, mientras que a se trata de una constante que toma el valor de 2, puesto que el espesor es menor de 0,0254 m (Walas 2012).

Así, la masa de acero necesaria viene dada por la ecuación III.42:

$$\text{Peso acero (kg)} = \rho_{\text{acero}} \left(\Pi r L t + 2 \frac{\left(OD + \frac{OD}{24} + at\right)^2 t}{4} \right) \quad \text{[III. 42]}$$

Finalmente, al peso de acero obtenido se le adiciona un 20%, correspondiente a los accesorios.

En la Tabla III.26 se muestran los datos utilizados para realizar los cálculos y se recogen los resultados obtenidos.

Tabla III.26. Cálculo del espesor de las paredes del equipo.

S (kPa)	72400
Ej	1
P (kPa)	298,46
C _c (m)	8,89·10 ⁻³
a	2
OD (m)	0,56
t _{cilindro} (m)	9,99·10 ⁻³
t _{cabezal toro esférico} (m)	9,87·10 ⁻³
V _{cilindro} (m ³)	8,99·10 ⁻³
V _{cabezal toro esférico} (m ³)	2,81·10 ⁻³
V _{total} (m ³)	0,06
ρ _{acero} (kg/m ³)	7980
Peso total (kg)	139,85

III.C. COSTES

Algunos de los costes de los equipos se estiman a partir de gráficas y tablas basados en datos del año 2002, por lo que es necesario actualizarlos, ya que, tanto los materiales de construcción como la mano de obra están sujetos a la inflación. Para ello, se hace uso de la ecuación III.3.

Se ven afectados por este aspecto la columna de destilación (D-III.1), el tanque de almacenamiento (T-III.1) y los cambiadores de calor. Sin embargo, el coste de las bombas B-III.1 y B-III.2 no se ve afectado ya que se extrae de un catálogo actual.

Columna de destilación D-III.1: Su coste se estima a partir de la Figura III.9 (Peters *et al.*, 2003). Para conocerlo, es necesario haber calculado previamente el diámetro de la columna, el tipo de platos empleados y el material de construcción. De esta forma, se obtiene el coste de la columna por cada plato, incluyendo instalación y auxiliares. Por ello, al coste total se le resta el coste correspondiente a la instalación. Dicho coste se calcula a partir de Figura III.10, donde, en función del tipo de planta, se estiman los distintos factores para el cálculo de la inversión de capital, basados en el coste del equipo entregado. (Peters, *et al.*, 2003). En este caso, se selecciona una planta que procesa fluidos (*Fluid processing plant*), por lo que el coste de instalación supondrá un 47% sobre el equipo entregado.

Los datos empleados para la estimación del coste de la columna se recogen en la Tabla III.27, así como el coste total obtenido.

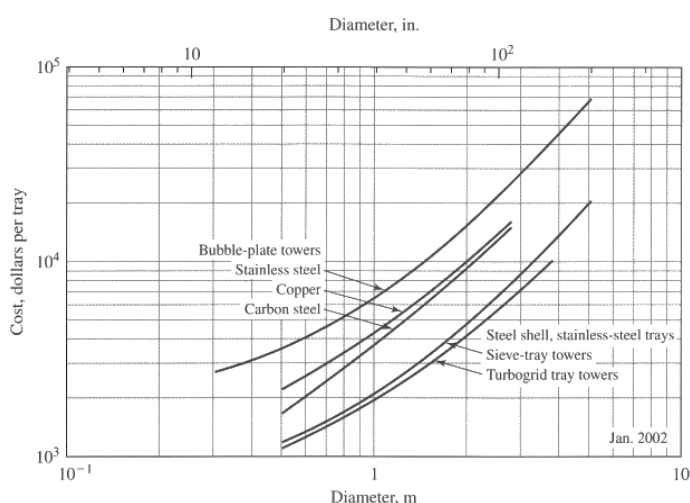


Fig. III.9. Coste de la columna de destilación D-III.1, incluyendo instalación y auxiliares (Peters *et al.*, 2003).

	Percent of delivered-equipment cost for		
	Solid processing plant [†]	Solid-fluid processing plant [†]	Fluid processing plant [‡]
Direct costs			
Purchased equipment delivered (including fabricated equipment, process machinery, pumps, and compressors)	100	100	100
Purchased-equipment installation	45	39	47
Instrumentation and controls (installed)	18	26	36
Piping (installed)	16	31	68
Electrical systems (installed)	10	10	11
Buildings (including services)	25	29	18
Yard improvements	15	12	10
Service facilities (installed)	40	55	70
Total direct plant cost	269	302	360
Indirect costs			
Engineering and supervision	33	32	33
Construction expenses	39	34	41
Legal expenses	4	4	4
Contractor's fee	17	19	22
Contingency	35	37	44
Total indirect plant cost	128	126	144
Fixed-capital investment	397	428	504
Working capital (15% of total capital investment)	70	75	89
Total capital investment	467	503	593

[†]Because of the extra expense involved in supplying service facilities, storage facilities, loading terminals, transportation facilities, and other necessary utilities at a completely undeveloped site, the fixed-capital investment for a new plant located at an undeveloped site may be as much as 100 percent greater than that for an equivalent plant constructed as an addition to the existing plant.

[‡]See Table 6-6 for descriptions of types of process plants.

Fig. III.10. Factores para el cálculo de la inversión de capital (Peters *et al.*, 2003)

Tabla III.27. Datos para determinación del coste de la columna D-III.1.

Diámetro columna (m)	0,54
Tipo de platos	Perforados
Material de construcción	Acero inoxidable Tipo 316
(Coste compra + instalación + auxiliares) ₂₀₀₂ , \$	12000
(Coste compra)₂₀₀₂, \$	5714,19

Tanque pulmón, T-III.1: Su coste se calcula a partir de la Fig. III.11 (Peters *et al.*, 2003), en función de la capacidad del tanque (m^3) y del material de construcción. Es aplicable a espesores de $6,35 \cdot 10^{-3}$ m, sin embargo, para espesores mayores, en la parte derecha inferior de esta gráfica se observan una serie de factores de ajuste que dependen del tipo de material. Por ello, previamente se calcula el espesor del tanque aplicando el código ASME, siguiendo el mismo procedimiento que en el apartado III.4. De esta forma, mediante una interpolación lineal a partir de los datos de dicha tabla es posible obtener el valor de este factor de ajuste y así, determinar el coste de compra del tanque, que aumentará a medida que aumenta su espesor.

El material de construcción seleccionado es acero inoxidable Tipo 304 por prevención, ya que, aunque no se ha encontrado información acerca del carácter corrosivo del óxido de limoneno, se trata de un compuesto orgánico, pudiendo ocasionar la corrosión del material.

Los datos empleados para el cálculo del coste del tanque T-III.1 se recogen en la Tabla III.28.

Tabla III.28. Cálculo del coste del tanque T-III.1.

Volumen (m ³)	14,23
Material de construcción	Acero inoxidable Tipo 304
Espesor (m)	0,01
Factor de ajuste	1,66
(Coste compra)₂₀₀₂, \$	39840

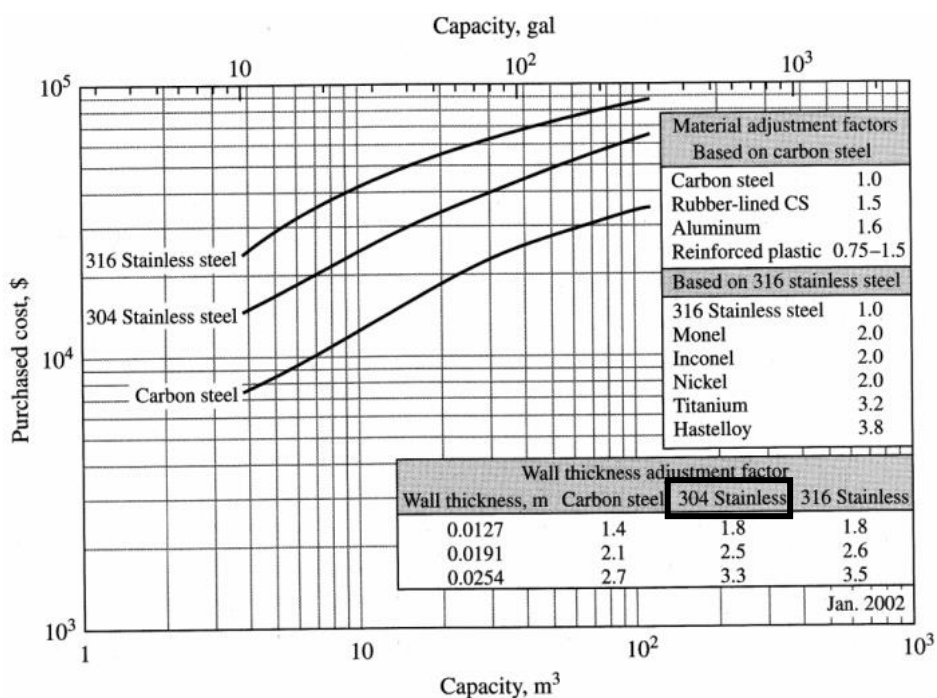


Fig. III.11. Coste del tanque pulmón T-III.1 (Peters *et al.*, 2003).

Bombas B-III.1 y B-III.2: Como sistema de bombeo se decide emplear dos bombas peristálticas, debido a que los caudales a impulsar son bajos, así como los requerimientos de potencia calculados en el apartado III.B.4. Para ello, se acude al catálogo de bombas peristálticas de la empresa *Drifton*, dedicada al suministro de material industrial y de laboratorio, y se eligen dos bombas modelo M6-6L, con las características que se muestran

en la Tabla III.29, donde también se recoge su precio de compra en la actualidad, al que debe aplicarse el 21% de IVA.

En la Figura III.12 puede observarse un esquema del sistema de bombeo seleccionado.



Fig. III.12. Esquema de las bombas peristálticas B-III.1 y B-III.2.

Tabla III.29. Especificaciones de las bombas peristálticas B-III.1 y B-III.2.

Modelo	M6-6L
Material de construcción	Carcasa Acero inoxidable 304
	Cabezal PPS (sulfuro de polifenileno): resistente a la corrosión de disolvente orgánico
Ámbito de trabajo	Producción industrial, pruebas a escala de planta piloto, transferencia de líquidos con alta precisión
Rango de flujo (mL/min)	0,3-6000
Consumo de energía, W	< 80
Rango de T satisfactorio, °C	0-40
(Coste compra)₂₀₂₃ IVA excluido, €	1105,30

III.D. OTROS

Tabla III.30. Catálogo de tuberías (Tioga, 2013).



Philadelphia Regional Center
2450 Wheatshoaf Lane
Philadelphia, PA 19137
O 215-831-0700
F 215-533-1645
E sales@tiogapipe.com

Houston Regional Center
14950 Heathrow Forest Parkway,
Suite 390, Houston, TX 77032
O 713-433-2111
F 281-397-0132
E sales@tiogapipe.com

Chattanooga Regional Center
1301 Riverfront Parkway, Suite 108
Chattanooga, TN 37402
O 423-899-3398
F 423-899-9695
E sales@tiogapipe.com

PIPE DIMENSIONS AND WEIGHTS

Available in commercial and nuclear

U.S./METRIC

NOMINAL PIPE SIZE	OD		SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID	
	INCH	MM	ASME		INCH	MM	LBS/FOOT	KG/METER	INCH	MM
			10	40						
1/8 6	0.405 10.3	10 STD XS	40	105	0.049	1.24	0.19	0.28	0.307	7.82
			80	805	0.058	1.73	0.24	0.37	0.269	6.84
			80	805	0.095	2.41	0.31	0.47	0.215	5.84
1/4 8	0.540 13.7	10 STD XS	40	105	0.065	1.65	0.33	0.49	0.410	10.40
			40	405	0.088	2.24	0.43	0.63	0.364	9.22
			80	805	0.119	3.02	0.54	0.80	0.302	7.66
3/8 10	0.675 17.1	10 STD XS	40	105	0.065	1.65	0.42	0.63	0.545	13.80
			40	405	0.091	2.31	0.57	0.84	0.493	12.48
			80	805	0.126	3.20	0.74	1.10	0.423	10.70
1/2 15	0.840 21.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.065	1.65	0.54	0.80	0.710	18.00
			105	805	0.083	2.11	0.67	1.00	0.674	17.08
			40	405	0.109	2.77	0.85	1.27	0.622	15.76
3/4 20	1.050 26.7	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.065	1.65	0.69	1.03	0.920	23.40
			105	805	0.083	2.11	0.86	1.28	0.884	22.48
			40	405	0.113	2.87	1.13	1.69	0.824	20.96
1 25	1.315 33.4	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.065	1.65	0.87	1.29	1.185	30.10
			105	805	0.109	2.77	1.41	2.09	1.097	27.86
			40	405	0.133	3.38	1.68	2.50	1.049	26.64
1-1/4 32	1.660 42.2	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.065	1.65	1.11	1.65	1.530	38.90
			105	805	0.109	2.77	1.81	2.69	1.442	36.66
			40	405	0.140	3.56	2.27	3.39	1.380	35.08
1-1/2 40	1.900 48.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.065	1.65	1.28	1.90	1.770	45.00
			105	805	0.109	2.77	2.09	3.11	1.682	42.76
			40	405	0.145	3.68	2.72	4.05	1.610	40.94
2 50	2.375 60.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.065	1.65	1.61	2.39	2.245	57.00
			105	805	0.109	2.77	2.64	3.93	2.157	54.76
			40	405	0.154	3.91	3.66	5.44	2.067	52.48
2-1/2 65	2.875 73.0	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.083	2.11	2.40	3.69	2.709	68.78
			105	805	0.120	3.05	3.53	5.26	2.635	66.90
			40	405	0.203	5.16	5.80	8.63	2.469	62.68
3 80	3.500 88.9	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.083	2.11	3.03	4.52	3.334	84.68
			105	805	0.120	3.05	4.34	6.46	3.260	82.80
			40	405	0.216	5.49	7.58	11.29	3.068	77.92
3-1/2 90	4.000 101.6	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.083	2.11	3.48	5.18	3.834	97.38
			105	805	0.120	3.05	4.98	7.41	3.760	95.50
			40	405	0.226	5.74	9.12	13.57	3.548	90.12
4 100	4.500 114.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.083	2.11	3.92	5.84	4.334	110.08
			105	805	0.120	3.05	5.62	8.37	4.260	108.20
			40	405	0.156	3.96	7.24	10.78	4.188	106.38
4-1/2 115	5.000 127.0	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.083	2.11	4.36	6.36	4.734	123.84
			105	805	0.120	3.05	6.14	8.97	4.660	121.96
			40	405	0.237	6.02	10.80	16.08	4.026	102.26

NOMINAL PIPE SIZE	OD		SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID	
	INCH	MM	ASME		INCH	MM	LBS/FOOT	KG/METER	INCH	MM
			10	40						
5 125	5.563 141.3	5 10 STD XS	40	105	0.109	2.77	6.36	9.46	5.345	135.76
			80	805	0.134	3.40	7.78	11.56	5.295	134.50
			80	805	0.258	6.55	14.63	21.77	5.047	128.20
6 150	6.625 168.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	7.59	11.31	6.407	162.76
			105	805	0.134	3.40	9.30	13.83	6.357	161.50
			40	405	0.188	4.78	12.94	19.28	6.249	158.74
7 175	7.625 193.7	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	8.81	13.00	7.023	178.40
			105	805	0.134	3.40	10.70	15.83	6.973	177.14
			40	405	0.223	5.66	15.14	22.12	6.865	175.30
8 200	8.625 219.1	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	9.92	14.78	8.407	213.56
			105	805	0.134	3.40	12.11	17.61	8.357	212.30
			40	405	0.250	6.35	22.38	33.32	8.125	206.40
9 225	9.625 244.5	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	11.13	16.36	9.207	232.00
			105	805	0.134	3.40	13.41	19.37	9.157	230.74
			40	405	0.322	8.18	28.58	42.55	9.061	228.74
10 250	10.750 273.0	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	12.41	18.04	10.023	252.00
			105	805	0.134	3.40	14.79	21.37	9.973	250.74
			40	405	0.250	6.35	28.06	41.76	10.250	260.30
11 275	11.750 298.5	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	13.79	20.00	10.899	276.00
			105	805	0.134	3.40	16.27	23.69	10.849	274.74
			40	405	0.375	9.53	45.60	67.91	11.000	279.44
12 300	12.750 323.8	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	15.17	22.06	11.775	297.00
			105	805	0.134	3.40	17.75	25.75	11.725	295.74
			40	405	0.500	12.70	60.13	89.51	10.750	273.10
14 350	14.000 355.6	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	16.65	24.11	12.651	321.00
			105	805	0.134	3.40	19.33	28.12	12.601	319.74
			40	405	1.125	28.58	139.81	208.08	10.500	266.64



Universidad de Oviedo

TRABAJO FIN DE GRADO
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

**ÁREA IV: SÍNTESIS DEL
POLICARBONATO DE LIMONENO**

Por

Candela Rodríguez Gutiérrez

Oviedo, Julio de 2023

ÍNDICE

IV.1. INTRODUCCIÓN	267
IV.2. DIAGRAMA DE FLUJO Y BALANCES DE MATERIA	270
IV.3. DISEÑO DEL PROCESO	274
IV.3.1. Reactor de síntesis	275
IV.3.1.1. Reacción de síntesis del PCL.	275
IV.3.1.2. Selección del reactor	276
IV.3.1.3. Dimensionado del reactor de síntesis	277
IV.3.1.4. Diseño del sistema de agitación	279
IV.3.1.5. Tiempo de ciclo	281
IV.3.1.6. Número de reactores utilizados	282
IV.3.1.7. Material del reactor y agitador	283
IV.3.2. Recirculación	283
IV.3.3. Separador de fases	283
IV.3.3.1. Introducción	283
IV.3.3.2. Velocidad de sedimentación	284
IV.3.3.3. Dimensionado del separador vertical	284
IV.3.4. Precipitador	285
IV.3.4.1. Introducción	285
IV.3.4.2. Tanque de mezcla	286
IV.3.4.3. Hidrociclón	288
IV.3.5. Intercambiador de calor	290
IV.3.6. Equipos auxiliares	291
IV.3.6.1. Compresores	291
IV.3.6.2. Bombas	292
IV.3.6.3. Tanques de almacenamiento	293
IV.3.6.4. Válvulas	294
IV.4. DISEÑO MECÁNICO	295
IV.5. ANÁLISIS DE COSTES	299
IV.7. BIBLIOGRAFÍA	300
IV. ANEXO	303
IV.A. SÍMBOLOS	304
IV.B. CÁLCULOS	305
IV.B.1. Dimensionado del reactor de síntesis	305

IV.B.2. Diseño del separador	310
IV.B.3. Diseño del sistema de precipitación	311
IV.B.4. Diseño del intercambiador de calor	316
IV.B.5. Diseño equipos auxiliares	318
IV.B.5. Método ASME	324
IV.B.5. Coste de equipos del proceso	326
IV.C. OTROS	336
IV.D. COSTE INTERCAMBIADORES DE CALOR	344

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura IV.1. Mecanismo postulado para la copolimerización entre el CO ₂ y el OL con (BDI)ZnOAc como catalizador	269
Figura IV.2. Catalizador Zn-β-diiminato [ZnOAc(BDI)]	269
Figura IV.3. Diagrama de flujo global del área IV	271
Figura IV.4. Diagrama de flujo en detalle del área IV	272
Figura IV.5. Representación esquemática del reactor	278
Figura IV.6. Rodetes de mezcla: (a) hélice marina de tres palas; (b) turbina abierta de palas rectas; (c) turbina de disco con palas; (d) turbina abierta de palas curvas	279
Figura IV.7. Agitador tipo cinta helicoidal simple	280
Figura IV.8. Diagrama de Gantt para el área IV	282
Figura IV.9. Proporciones típicas de un separador gas-líquido vertical	284
Figura IV.10. Medidas de un agitador de turbina	287
Figura IV.11. Proporciones típicas de un hidrocilcón	289
Figura IV.12. Guía para la selección del agitador	306
Figura IV.13. Número de potencia frente a número de Reynolds para turbinas de seis palas	313
Figura IV.14. Determinación del d ₅₀ de una separación de partículas deseada	315
Figura IV.15. Diámetro de cámara D _C a partir del caudal, las propiedades físicas, y el tamaño de partícula d ₅₀	316
Figura IV.16. Selección del tipo de compresor	319
Figura IV.17. Nomograma para la estimación del diámetro óptimo interno de tubería	321
Figura IV.18. Coste de reactores agitados con encamisado	326
Figura IV.19. Coste de columna vertical	327
Figura IV.20. Coste de ciclones y otros equipos para la separación de sólidos	328
Figura IV.21. Coste de tanques de mezcla y almacenamiento	329
Figura IV.22. Coste de grandes depósitos	330
Figura IV.23. Coste de bombas de diafragma, centrífugas y rotativas	331
Figura IV.24. Coste de válvulas	332

Figura IV.25. Coste de intercambiadores de calor de múltiples tubos	333
Figura IV.26. Coste de compresores	334
Figura IV.27. Coste de ventiladores	335
Figura IV.30. Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas	338
Figuro IV.30. Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas. Continuación	339
Figura IV.30. Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas. Continuación	340
Figura IV.31. Tablas TEMA para la determinación del número de tubos real del intercambiador de calor.	341
Figura IV.32. Coste adquisición intercambiadores de tubos múltiples	344

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla IV.1. Balances de materia y energía del área IV	273
Tabla IV.2. Dimensiones del reactor de síntesis de PCL.	278
Tabla IV.3. Valores obtenidos para el diseño del desnebulizador.	285
Tabla IV.4. Dimensiones del tanque de mezcla para la precipitación por adición de metanol	286
Tabla IV.5. Proporciones obtenidas para el hidrociclón	289
Tabla IV.6. Parámetros obtenidos para el intercambiador IC-IV.1	290
Tabla IV.7. Parámetros obtenidos para el intercambiador IC-IV.1. Continuación	291
Tabla IV.8. Parámetros de diseño del compresor	292
Tabla IV.9. Parámetros de diseño de las bombas	293
Tabla IV.10. Dimensiones de los tanques de almacenamiento	294
Tabla IV.11. Parámetros del diseño mecánico del equipo según el código ASME	297
Tabla IV.12. Costes equipos área IV	299
Tabla IV.13. Valores obtenidos para el diseño del agitador	308
Tabla IV.14. Valores típicos del coeficiente global de transmisión de calor	309
Tabla IV.15. Parámetros obtenidos para el encamisado del reactor	310
Tabla IV.16. Valores obtenidos para el diseño del agitador	312
Tabla IV.17. Longitud equivalente para distintos accesorios	322
Tabla IV.18. Cálculos potencia de la bomba, B-IV.1	323
Tabla IV.19. Catálogo de tuberías	336
Tabla IV.20. Catálogo de tuberías, continuación	337
Tabla IV.21. Coste de adquisición de los equipos	342
Tabla IV.22. Coste de adquisición de los equipos. Continuación	343
Tabla IV.23. Coste de los intercambiadores de calor	345

IV.1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años, se han llevado a cabo diversos estudios enfocados en la obtención de policarbonato de limoneno con el propósito de obtener bioplásticos y reducir la dependencia de los combustibles fósiles. Después de haber revisado los principales estudios, se ha optado por seguir el de Haustein *et al.* debido tanto a información disponible como a menor complejidad respecto al resto.

Haustein *et al.* investigaron la reacción de polimerización entre el CO₂ y el OL para la obtención de policarbonato de limoneno (PCL) en un medio de reacción de tolueno consiguiendo buenas propiedades térmicas.

Esta reacción de síntesis es una reacción bifásica exotérmica de polimerización con catálisis homogénea, en la cual el dióxido de carbono y el óxido de limoneno (OL) actúan como reaccionantes.

Normalmente, las reacciones de polimerización se clasifican en dos grandes grupos: polimerizaciones por pasos y polimerizaciones en cadena o de adición. En la polimerización por pasos los monómeros se unen uno a uno mediante reacciones secuenciales para formar el polímero, de esta manera se forman enlaces químicos entre las unidades monoméricas. Por otra parte, en la polimerización en cadena, la cadena polimérica se va incrementando de monómero en monómero, es decir, implica la adición sucesiva de monómeros a una cadena de crecimiento, a parte en este caso de polimerización se requiere un agente iniciador para que se produzca.

Haustein *et al.* han postulado un mecanismo de reacción el cual se muestra en la Figura IV.1, observando esta, puede concluirse que el mecanismo de la reacción presente es de crecimiento en cadena, en el que se distinguen dos etapas: la iniciación y la propagación en la cual va aumentando la cadena de polímero. Además, este tipo de polimerización es una copolimerización debido a que se unen dos monómeros distintos para obtener una cadena polimérica que contendrá unidades repetitivas de ambos monómeros.

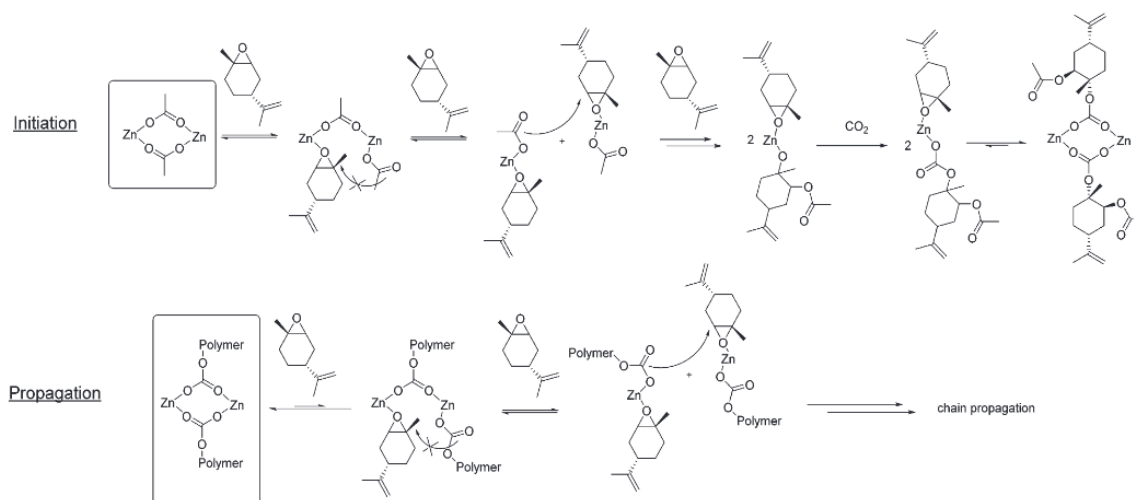


Figura IV.1. Mecanismo postulado para la copolimerización entre el CO_2 y el OL con $(\text{BDI})\text{ZnOAc}$ como catalizador (Hauenstein et al. 2016).

Generalmente estas polimerizaciones requieren del uso de catalizadores. Éstos suelen ser complejos metálicos con ligandos quirales, del tipo sales con metales de transición $[\text{ZnOAc}(\text{BDI})]$. En este caso el catalizador utilizado es el complejo Zn- β -diiminato $[\text{ZnOAc}(\text{BDI})]$, puede verse en la Figura IV.2.

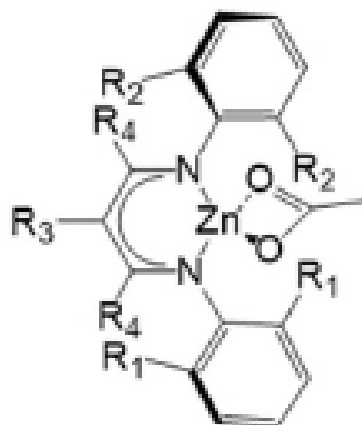


Figura IV.2. Catalizador Zn- β -diiminato $[\text{ZnOAc}(\text{BDI})]$ (Byrne et al. 2004).

Por último, cabe destacar la complejidad general de las reacciones de síntesis de polímeros debido a sus cambios de viscosidad y altos tiempos de reacción. De hecho, las reacciones de polimerización comienzan con una viscosidad parecida a la del agua ($1 \text{ mPa}\cdot\text{s}$) y pueden acabar con una altas viscosidades ($10\text{-}1000 \text{ Pa}\cdot\text{s}$) (Meyer et al. 2003).

IV.2. DIAGRAMA DE FLUJO

La producción del policarbonato se realiza por lotes. Debido a la producción deseada y al gran tiempo de reacción necesario se utilizan tres reactores, los cuales, funcionan todos igual, utilizando las mismas cargas y teniendo las mismas características. Por ello, se presenta un primer diagrama de flujo global donde aparecen los tres reactores (Figura IV.3), y un segundo diagrama más detallado donde solo se representa un reactor (Figura IV.4) y a partir del cual se hace el balance de materia para que no sea repetitivo.

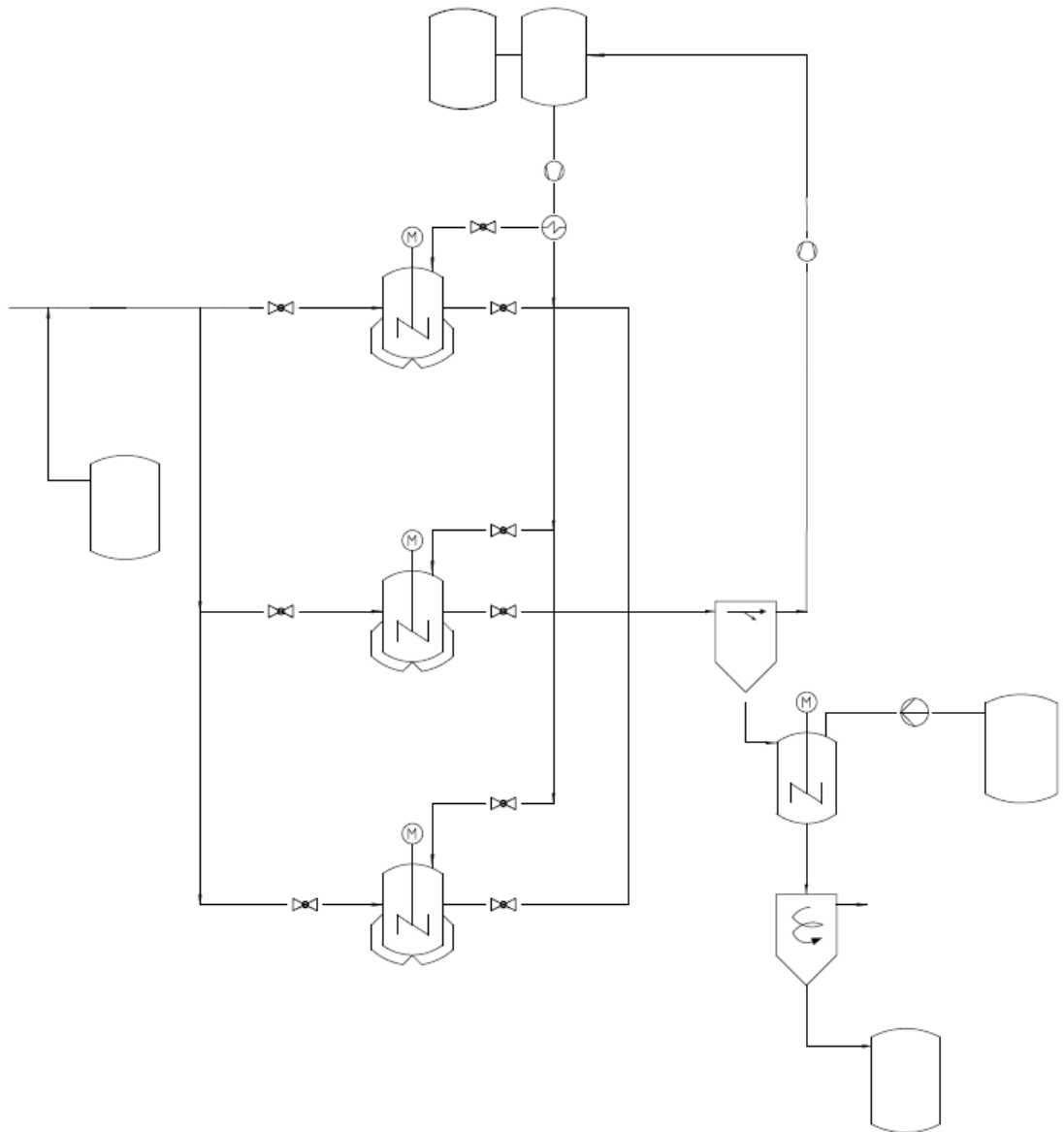


Figura IV.3. Diagrama de flujo global del área IV.

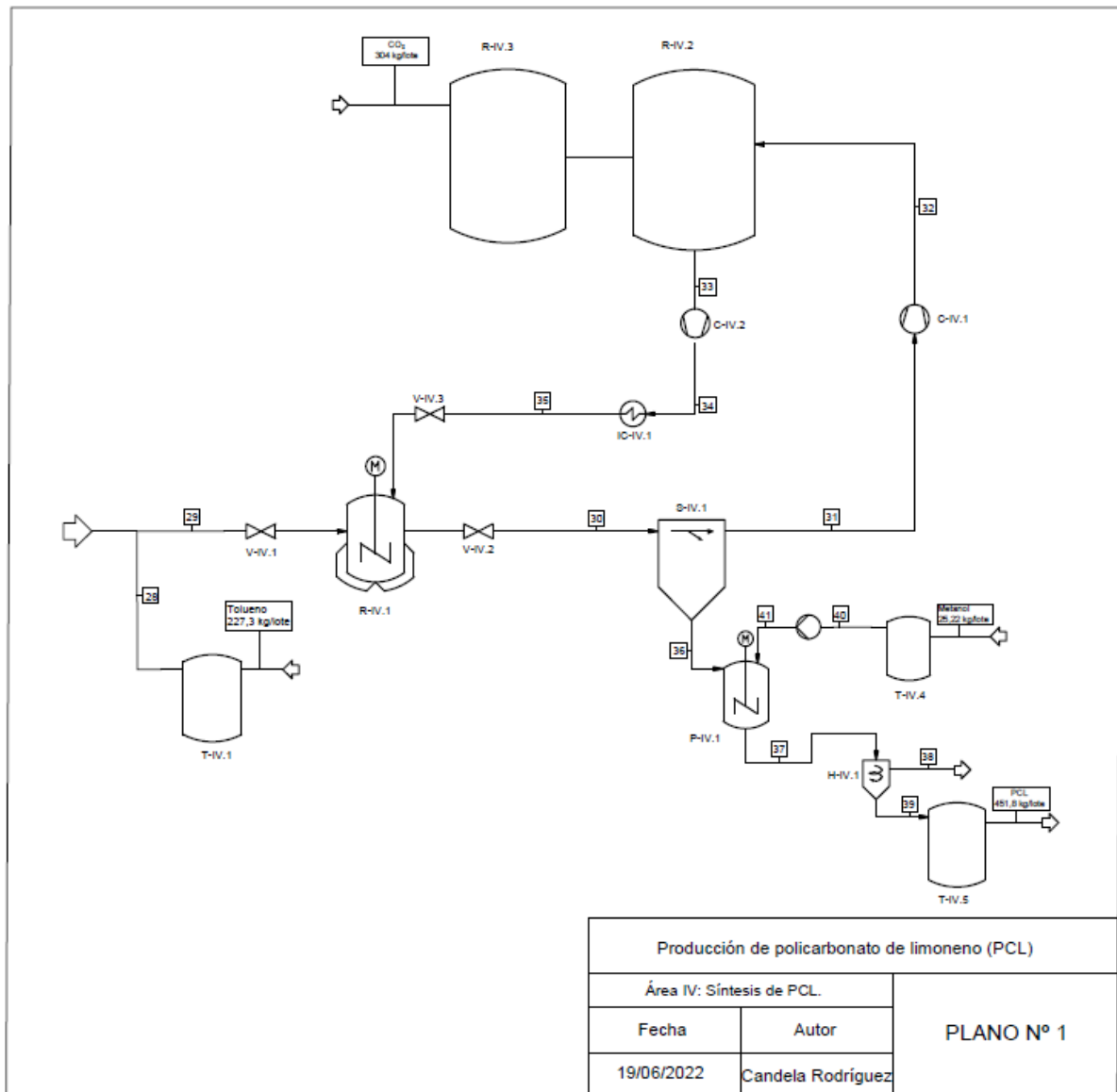


Figura IV.4. Diagrama de flujo en detalle del área IV.

Tabla IV.1. Balances de materia y energía del área IV.4

ÁREA IV: SÍNTESIS DE POLICARBONATO DE LIMONENO (PCL)									
Compuesto		27	28	29	30	31	32	33	34
Flujo molar (mol/lote)	CO ₂	0	0	0	572.357	572.357	572.357	574.662	574.662
	C ₁₀ H ₁₆	41,64	0	41,64	41,64	0	0	0	0
	C ₁₀ H ₁₆ O	2.561	0	2.561	256,1	0	0	0	0
	C ₆ H ₅ CH	0	2.404	2.404	2.404	0	0	0	0
	CH ₃ OH	0	0	0	0	0	0	0	0
	PCL	0	0	0	2.305	0	0	0	0
T (K)		298,2	298,2	298,2	298,2	298,2	450,2	298,2	450,2
P (kPa)		101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	202,6	202,6	10.000
H (kJ/mol)		0	0	0	0	0	2,698	-3,389	4,232
Compuesto		35	36	37	38	39	40	41	
Flujo molar (mol/lote)	CO ₂	574.662	0	0	0	0	0	0	
	C ₁₀ H ₁₆	0	41,64	41,64	41,64	0	0	0	
	C ₁₀ H ₁₆ O	0	256,1	256,1	256,1	0	0	0	
	C ₆ H ₅ CH	0	2.404	2.404	2.404	0	0	0	
	CH ₃ OH	0	0	6.914	6.914	0	6.915	6.915	
	PCL	0	2.305	2.305	0	2.305	0	0	
T (K)		298,2	298,2	298,2	298,2	298,2	298,2	298,2	
p (kPa)		10.000	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	101,3	
H (kJ/mol)		-1,855	0	0	0	0	0	0	

*La entalpía se calcula tomando como estado de referencia 25°C y 101,315 kPa

IV.3. DISEÑO DEL PROCESO

IV.3.1. REACTOR DE SINTESIS

IV.3.1.1. Reacción de síntesis del PCL. Cinética y condiciones de operación

El proceso de obtención de PCL, se lleva a cabo mediante una reacción bifásica la cual se encuentra recogida a continuación junto con su entalpía (Meyer et al. 2003)



Las condiciones de operación definidas son 25°C y 10 bar (Hauenstein et al., 2016). Como se ha mencionado anteriormente el proceso se considera exotérmico por ello es preciso instalar un encamisado para retirar el calor generado por la reacción y mantener la temperatura constante. Las conversiones alcanzadas en este proceso son >90% proporcionadas por Hauenstein *et al.*, por ello se va a tomar una conversión del 90%.

La reacción tiene lugar en un medio orgánico, para ello se utiliza tolueno como disolvente, esto es debido a que es necesario que se disuelva bien el catalizador en el óxido de limoneno. Por otra parte, esta reacción se lleva a cabo en presencia de un catalizador característico: complejo de *zinc β-diiminato ((BDI)ZnOAc)*, el cual se disuelve en el óxido de limoneno. Este catalizador es un complejo de coordinación el cual contiene un ion de Zn unido a un ligando *β-diiminato* tridentado (BDI) y un grupo acetato como ligando monodentado. El BDI se une al ion de Zn a través de tres átomos de nitrógeno mientras que el grupo acetato lo hace a través de un átomo de oxígeno. Este tipo de catalizador es relevante sobre todo en la síntesis de polímeros, como puede ser en la síntesis de PCL que se presenta en este proyecto. Este catalizador es estereoselectivo, teniendo una alta actividad catalítica y selectividad hacia la formación del policarbonato de limoneno, de hecho, se han realizado estudios para encontrar las condiciones más apropiadas para esta reacción en concreto (Byrne et al. 2004). El grupo *β-diiminato* se encarga de mejorar la actividad catalítica y la selectividad hacia la formación del policarbonato deseado, por otra parte, el ion de Zn ayuda a la activación del dióxido de carbono.

Cinética

La ecuación utilizada para el cálculo de la velocidad de reacción se muestra a continuación (Hauenstein *et al.* 2016):

$$(-r_{LO}) = k \cdot [LO]^2 [CO_2]^0 [Zn]^1 \quad [IV. 1]$$

Debido a que el catalizador se tiene en estado líquido la concentración de este no puede incluirse en la constante cinética (Hauenstein et al. 2016).

IV.3.1.2. Selección del reactor

Los reactores estudiados donde la reacción de polimerización tendrá lugar han sido, un reactor discontinuo, de tanque agitado y semicontinuo.

Para la elección del reactor se considerarán tres aspectos importantes: las propias características de la reacción que se lleva a cabo, sobre todo desde el punto de vista de la viscosidad, aspectos técnicos y por último aspectos económicos.

Al tratarse de una reacción bifásica, la utilización de un reactor semicontinuo permitiría un buen contacto entre ambas fases, burbujeando el CO_2 a través de la mezcla líquida contenida en el mismo. Por otra parte, el CSTR es menos costoso que el reactor discontinuo y el semicontinuo, además ofrece un buen control de la temperatura y su costo de operación es bajo.

Los discontinuos son más fáciles de mantener y más flexibles en producción, es decir, al permitir la producción por lotes estos pueden ser de diferente tamaño y composición, también se pueden alcanzar porcentajes altos de conversión por unidad de volumen. Por último, es más sencillo el diseño de los reactores discontinuos y el estudio escogido para realizar el diseño de este proceso se basa en un reactor de laboratorio discontinuo por lo que finalmente se ha decidido por el uso de este reactor.

Además, para pequeñas producciones se recomiendan unidades discontinuas y por la investigación en curso de este proceso, el proyecto está más orientado hacia una planta piloto en lugar de hacia una producción a gran escala industrial.

A parte de los reactores mencionados anteriormente existen reactores específicos para las reacciones de polimerización como reactores de polimerización en emulsión, en suspensión y en masa. La existencia de estos reactores es debida a que las polimerizaciones son reacciones bastante complejas en las que pueden intervenir varias fases y hay grandes aumentos de viscosidad. Esto no quiere decir que una polimerización no pueda llevarse a cabo en los reactores previamente mencionados, por ello y por la complejidad que los reactores específicos para polimerización conllevan, se ha elegido el reactor explicado. Por otra parte, debido al problema de la viscosidad se desarrollará una agitación utilizada en polimerizaciones descrita por Aleida Loo Ch *et al.*

Intercambio de calor

La reacción estudiada es una reacción exotérmica por lo que liberará calor, por ello será necesario instalar un encamisado y calcular las necesidades de refrigeración. El calor liberado por la reacción se calcula con la Ecuación IV.2:

$$Q = F_{A0} X_A \Delta H \quad [IV.2]$$

Como fluido refrigerante se utilizará agua ya que la reacción ocurre a 25°C. El flujo de agua necesario se calcula con la Ecuación IV.3:

$$Q = C_{p_{H_2O}} m_{H_2O} \Delta T \quad [IV.3]$$

La elección de un encamisado como método para eliminar el calor producido por la reacción es debido a que este sistema puede proporcionar una amplia área de transferencia térmica. Por otro lado, es un método seguro ya que se evita el contacto entre el fluido del proceso y el medio de intercambio de calor.

IV.3.1.3. Dimensionado del reactor de síntesis

Para el dimensionado del reactor, debido a la falta de datos cinéticos, se ha realizado un cambio de escala a partir de los datos del artículo de Haustein *et al.* en el que se utilizó un reactor discontinuo de 10 L, tiempo de residencia de 72 horas y unas proporciones determinadas de cada reactivo y de catalizador. Con estos datos se extrapolaron las cantidades necesarias de reactivos y las dimensiones del reactor para el presente proyecto. Se realizó también el diseño mecánico del reactor utilizando el código ASME para calderas y recipientes a presión.

En cuanto al tamaño del reactor, con el fin de garantizar el adecuado mezclado de los reactivos y por motivos de seguridad, se requiere sobredimensionar su volumen. Para ello se reserva un espacio adicional del 25% del tamaño del tanque.

En la Tabla IV.2 se presentan las dimensiones del equipo:

Tabla IV.2. Dimensiones del reactor de síntesis de PCL

	R-IV.1
Diámetro reactor (m)	1,35
Altura reactor (m)	2,70
Volumen (m³)	3,86

Se presenta a continuación una figura esquemática de las dimensiones del reactor:

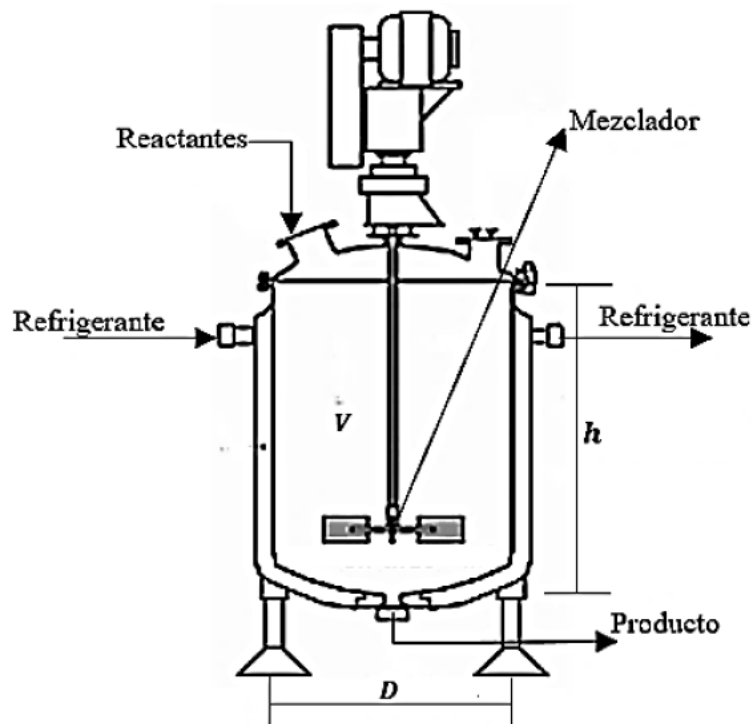


Figura IV.5. Representación esquemática del reactor (Chavez 2023).

Para el cálculo del volumen del reactor simplemente se extrapola el valor del volumen del reactor discontinuo de 10 L descrito por Haustein *et al.* y posteriormente se aplica la Ecuación IV.4, es decir la ecuación para hallar el volumen de un cilindro, y de esta manera se halla el diámetro del tanque.

$$V = \frac{\pi D^2 L}{4} \quad [IV.4]$$

IV.3.1.4. Diseño del sistema de agitación

Los principales tipos de agitadores estudiados para el diseño del reactor fueron los siguientes: hélices (Figura IV.6. (a)), palas y turbinas (Figura IV.6 (b,c,d)) y de cinta helicoidal (Figura IV.7).

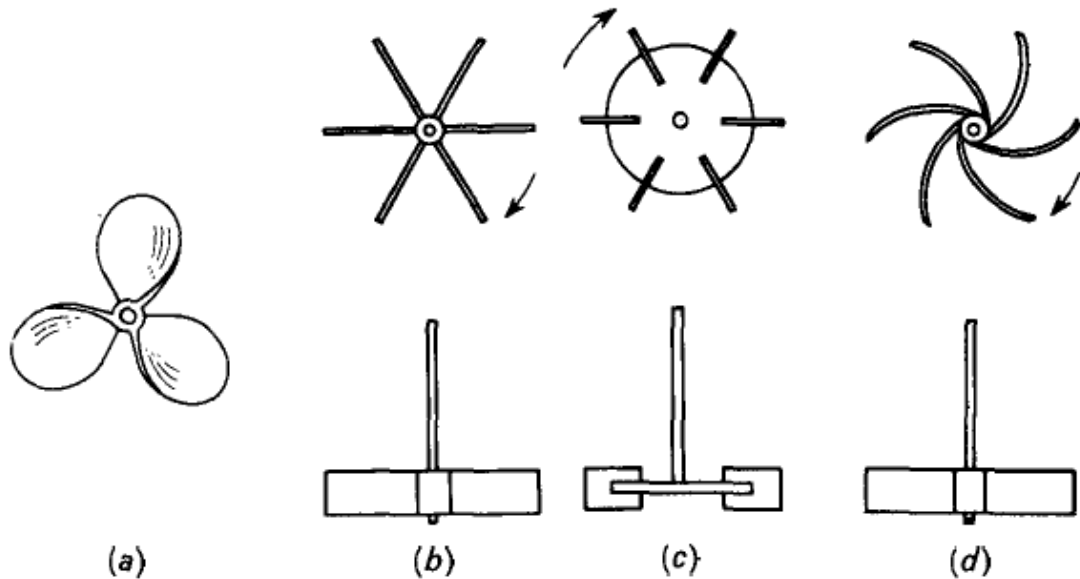


Figura IV.6. Rodetes de mezcla: (a) hélice marina de tres palas; (b) turbina abierta de palas rectas; (c) turbina de disco con palas; (d) turbina abierta de palas curvas (McCabe, Smith y Harriott 2002).

Debido a las necesidades del proceso teniendo en cuenta sobre todo la viscosidad de las reacciones poliméricas se ha optado finalmente por el agitador de cinta helicoidal, el cual se puede ver en la Figura IV.7. Este agitador es utilizado para mezclas de alta viscosidad. Consta de una espiral que puede ser instalada en tanques y depósitos y puede ir acompañado de otros agitadores como de tipo hélice y deflectores o cortacorrientes («Autmix Flow | Serie NC(H)»).

Se han calculado sus dimensiones de acuerdo con las proporciones geométricas encontradas en la bibliografía. En la selección del motor es necesario determinar la potencia para el mezclado a partir de las correlaciones empíricas establecidas para el impulsor.

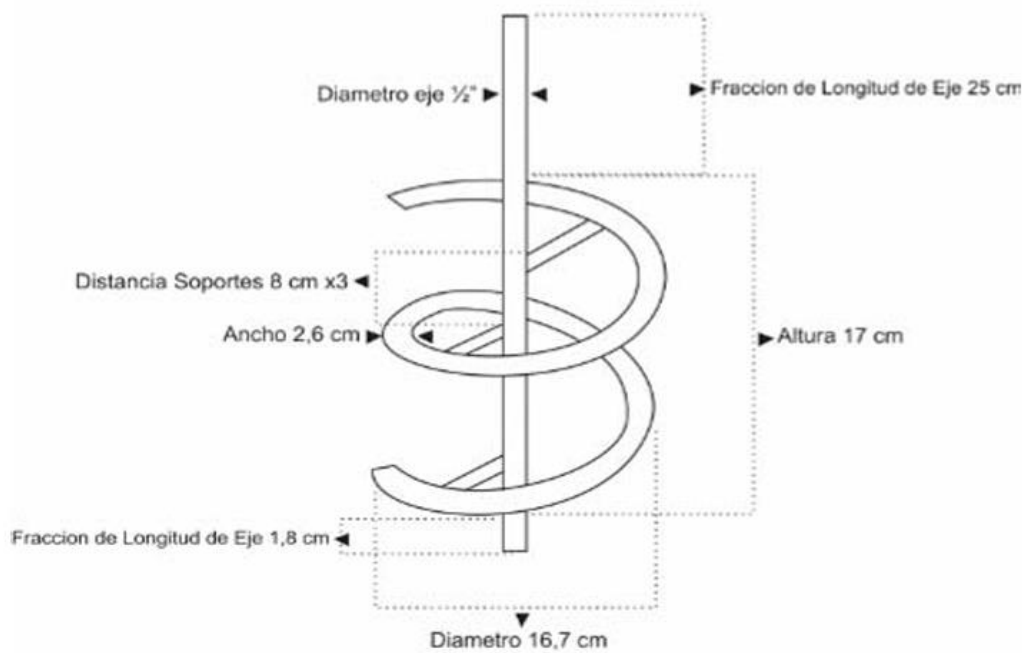


Figura IV.7. Agitador tipo cinta helicoidal simple

Para el cálculo de las dimensiones del agitador, se han utilizado las relaciones geométricas dadas por Kuriyama, Arai y Saito estas vienen descritas en el apartado *IV.B.1.1 Diseño de la agitación del reactor* del anexo.

Para este tipo de agitadores existe un parámetro conocido como paso de cinta helicoidal, S . Este parámetro se refiere al número de vueltas completas que da la cinta helicoidal alrededor del eje del agitador. De esta manera se determina la distancia axial que recorre la cinta helicoidal en una vuelta. Cuanto mayor sea este parámetro mayor grado de agitación y mezcla proporcionará.

Para el cálculo de la potencia consumida por el agitador es necesario fijar la velocidad de giro del propio agitador. Al ser una mezcla con alta viscosidad, el nivel de agitación debe ser bajo, por lo que se recomienda una velocidad de giro menor de 50 rpm, por ello se toma una velocidad de 40 rpm (Chavez 2023).

Previamente es necesario calcular el número de Reynolds (Ecuación IV.5) y confirmar que el régimen existente es laminar ya que las ecuaciones descritas en el apartado *IV.B.1. Dimensionado del reactor de síntesis* del anexo para el cálculo de la potencia son para régimen laminar ($Re < 2500$).

$$Re = \frac{D_A^2 N \rho}{\mu} \quad [IV. 5]$$

IV.3.1.5. Tiempo de ciclo

Como se ha mencionado anteriormente el reactor operará por lotes, es por ello que existirá un tiempo de ciclo que será la suma del tiempo de reacción, del tiempo de carga y descarga de reactivos y del tiempo de limpieza del reactor. Con este tiempo de ciclo, se sabrán los lotes que se producen en un día, es decir, la cantidad de veces que ocurre la reacción en un día. Dependiendo del tiempo de ciclo que será alto debido a que el tiempo de reacción es de 72 horas (3 días), se planteará la opción de utilizar varios reactores trabajando en paralelo de esta manera se intenta que el proceso trabaje en "continuo", aunque finalmente se ha visto que esto es viable.

Para estimar el tiempo de carga, descarga y limpieza del reactor habrá que tener en cuenta varios factores. Entre ellos están el tamaño del reactor, el tipo de material a tratar, el método de carga y descarga, las condiciones de seguridad y el método de limpieza.

Teniendo todos estos factores en cuenta, en el presente proceso el volumen del reactor es de 3,86 m³ por lo que no se considera un reactor grande. Por otro lado, los reaccionantes utilizados no son peligrosos, pero sí que pueden contener peróxido de hidrógeno del área II, aunque en muy pequeñas cantidades por lo que en este caso no sería importante. Como métodos de carga y descarga se utilizarán bombas con un caudal determinado. Por último, la limpieza del reactor será necesaria ya que al ser una reacción de polimerización quedarán residuos de polímero y otros compuestos generados durante el proceso. Además, esta limpieza es importante para mantener la eficacia de operación y evitar la contaminación cruzada entre lotes. Entre los métodos de limpieza más utilizados se encuentran los métodos con vapor a alta presión, química con disolventes u otros agentes químicos, mecánica utilizando dispositivos para raspar los residuos adheridos al tanque y limpieza con agua a presión.

Un método de limpieza que se podría utilizar aprovechando alguna corriente del proceso sería la limpieza con vapor.

Como tiempo de ciclo al ser un reactor de pequeño volumen y por todo lo explicado, se escoge un tiempo de 73 horas, es decir la reacción dura 72 horas y se estima que la descarga, la limpieza y la carga dure 1 hora.

IV.3.1.6. Número de reactores utilizados

Debido a que la reacción es muy larga, teniendo esta una duración de 3 días se plantea el uso de varios reactores en paralelo para poder obtener al menos un lote al día de polímero. Para decidir cuantos utilizar, se desarrolla un diagrama de Gantt, el cual se presenta a continuación:

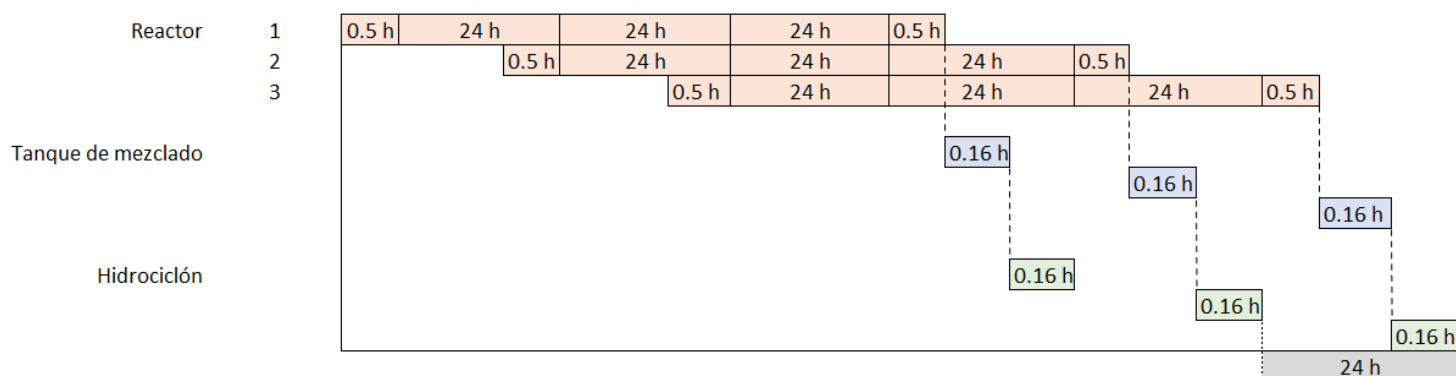


Figura IV.8. Diagrama de Gantt para el área IV.

Como se puede observar en la Figura IV.8, se elige un número de reactores de 3 unidades. Esto es debido a que la duración de la reacción es muy alta, y además hay que sumarle una hora más de carga, descarga y limpieza por ello aparecen 0,5 horas antes y después de las 72 horas de reacción.

La elección de tres reactores es debido a que se ha fijado como objetivo obtener un lote de PCL diaria. Es importante destacar que cada vez que se completan las tres reacciones, se obtiene el siguiente lote a las 25 horas y, después, de nuevo vuelve a ajustarse cada 24 horas. Esto es a causa de que se produce un desajuste al volver a cargar el reactor 1 debido al tiempo necesario de carga.

De todas formas, en la industria de polímeros es difícil obtener siempre la misma cantidad de polímero y el mismo número de lotes.

Por último, como los reactores trabajan de forma paralela no es necesario utilizar varios tanques de mezcla ni hidrociclones debido a que el tiempo de funcionamiento de estos es bajo. Se ha encontrado en la bibliografía que el tiempo de operación, es decir de residencia del efluente para que sea efectiva la operación, va desde segundos hasta minutos, como por falta de información sobre este proceso no se ha encontrado ningún valor se ha estimado un tiempo de 10 minutos (0,16 horas) para ambos equipos.

IV.3.1.7. Material del reactor y agitador

Para determinar el material adecuado del agitador y el reactor se han estudiado las condiciones de todo el proceso, y, al utilizar peróxido de hidrógeno en el área II, se ha decidido que el material elegido sea acero inoxidable Tipo 316 ya que este compuesto (H_2O_2) es muy corrosivo (Durkin et al. 2019)

IV.3.2. RECIRCULACIÓN

La corriente gaseosa de salida del separador,31, está formada prácticamente por CO_2 puro. El objetivo principal de este proceso es maximizar la sostenibilidad, lo cual implica que se buscará reutilizar las materias primas siempre que sea posible, fomentando así su recirculación.

Por ello esta corriente de CO_2 se recirculará al tanque de almacenamiento de este compuesto, posteriormente se hará pasar por un compresor para llegar a los 10 bar requeridos dentro del reactor y se introducirá en el reactor. Además, de esta manera se evitan emisiones de este compuesto a la atmósfera.

IV.3.3. SEPARADOR DE FASES

IV.3.3.1. Introducción

En esta parte del proyecto se abarcará la separación líquido-gas del efluente del reactor. Este efluente del reactor contiene dos fases, el CO_2 no reaccionado y una mezcla líquida formada por el OL no reaccionado, el PCL y el medio de reacción, el tolueno.

Normalmente para la separación de estas dos fases se suele utilizar un desnebulizador vertical u horizontal cuando sea tolerable el arrastre de algunas gotas de líquido. Este desnebulizador consiste en una sedimentación por gravedad (Towler y Sinnott 2019).

En este caso como la separación se realiza para poder reutilizar el CO_2 , y volver a introducirlo en el reactor es importante que no se arrastren gotas de líquido por ello se añade una malla tejida antivaho al desnebulizador, esto hace que aumente la eficacia del separador. Existen muchos tipos de mallas con distintas densidades de malla, espesores y materiales, pero generalmente se utilizan mallas de acero inoxidable de 100 micrómetros de espesor y con una densidad nominal de 150 kg/m³. Además, al utilizar mallas antivaho, se requieren menores volúmenes del recipiente de separación (Towler y Sinnott 2019).

Se utilizará un separador vertical, ya que los horizontales se usan cuando se requiere un gran tiempo de residencia de líquido, y este no es el caso ya que se separan fácilmente las dos fases (Durkin et al. 2019).

IV.3.3.2. Velocidad de sedimentación

Antes de dimensionar el separador es necesario calcular la velocidad de sedimentación de las gotas de líquido. Esta velocidad de sedimentación se denomina u_t , y se calcula con la Ecuación IV.6. (Towler y Sinnott 2019):

$$u_t = 0,07((\rho_L - \rho_v)/\rho_v)^{1/2} \quad [IV.6]$$

Donde ρ_L es la densidad del líquido y ρ_v la del vapor. Si no se utiliza malla antivaho este valor debe multiplicarse por 0,15 para proporcionar un margen de seguridad y tener en cuenta posibles subidas de caudal (Towler y Sinnott 2019).

IV.3.3.3. Dimensionado del separador vertical

Las proporciones típicas de un separador gas-líquido vertical se muestran en la Figura IV.9:

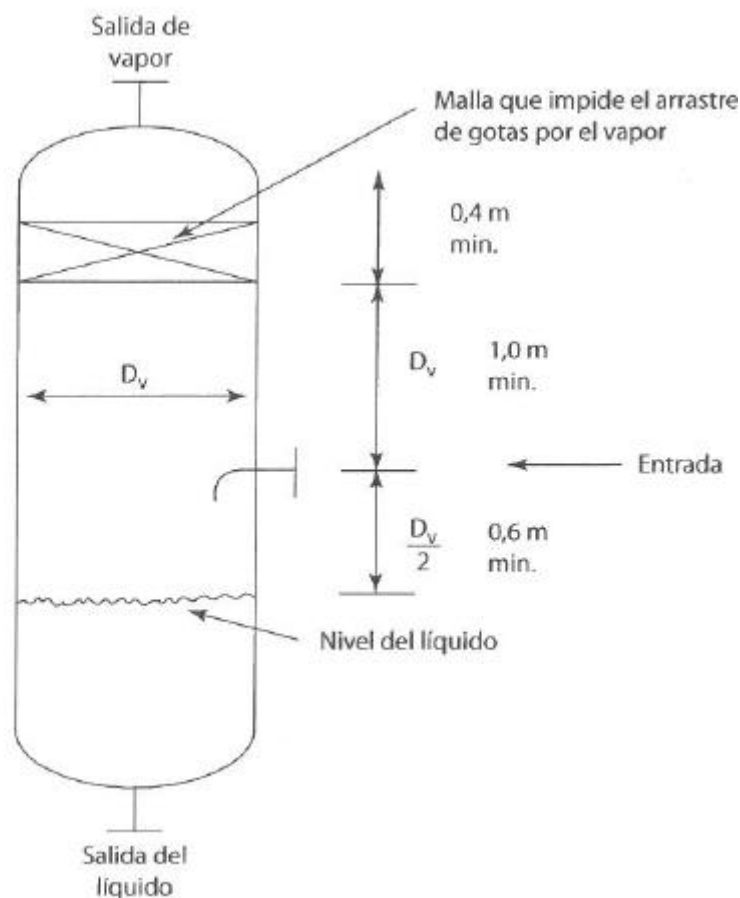


Figura IV.9. Proporciones típicas de un separador gas-líquido vertical (Towler y Sinnott 2019).

El diámetro del separador debe ser lo suficientemente grande como para disminuir la velocidad del gas por debajo de la velocidad a la que las gotas se depositan. El diámetro mínimo viene dado por la Ecuación IV.7 (Towler y Sinnott 2019):

$$D_v = \sqrt{\left(\frac{4 V_v}{\pi u_s}\right)} \quad [IV.7]$$

Donde, D_v es el diámetro mínimo del separador, V_v es el caudal volumétrico del gas y u_s es igual a u_t , es decir, la velocidad de sedimentación previamente hallada si se utiliza una malla antivaho como es el caso.

Normalmente, como tiempo de residencia se estima 10 minutos para que tenga un buen funcionamiento el equipo (Towler y Sinnott 2019). En la Tabla IV.3 se presentan los valores para el dimensionado del equipo obtenidos.

Tabla IV.3. Valores obtenidos para el diseño del desnebulizador

	S-IV.1
Diámetro del recipiente (m)	1,76
Altura del líquido h_L (m)	0,05
Área transversal (m²)	2,44
Altura del equipo (m)	3,09
$D_v/2$ (m)	0,88

IV.3.4. PRECIPITADOR

IV.3.4.1. Introducción

La precipitación es una técnica utilizada en la industria para la recuperación de moléculas orgánicas grandes como productos químicos especiales, compuestos farmacéuticos y de alimentación, proteínas o productos biológicos (Towler y Sinnott 2019).

Existen diferentes técnicas para llevar a cabo la precipitación, como ``desalar`` añadiendo una sal para aumentar la fuerza iónica y provocar la precipitación, cambiando el pH de la disolución por adición de ácido, degradando térmicamente un producto no

deseado para que precipite, añadir tierras de diatomeas, gelatina, carbón activo u otras que pueden absorber especies orgánicas y sedimentar como precipitado.

Por último, otra técnica es la precipitación por adición de metanol, etanol, acetona, acetonitrilo u otros disolventes, en este caso esta última técnica es la utilizada de forma que añadiendo el metanol se cambia la polaridad de la disolución y precipita el producto deseado (Durkin et al. 2019).

Los procesos de precipitación normalmente constan de un tanque de mezclado o mezclador en línea, seguido de un dispositivo de separación de sólido-líquido. Los separadores sólido-líquido más utilizados son los hidrociclones y las centrifugas.

Dentro de las centrifugas se distinguen centrifugas de sedimentación utilizadas para obtener un líquido clarificado y las de filtración, utilizadas para la producción de un sólido puro y seco. Dentro de estos grupos existen una amplia variedad de centrifugas diferentes.

Por otro lado, los hidrociclones son dispositivos de centrifugación con la pared fija, la fuerza centrífuga es generada por el movimiento del líquido en el interior del equipo. El principio de funcionamiento es el mismo que para los ciclones de gas. La ventaja de estos es que son robustos y sencillos y operan sobre un rango de tamaños de partícula de entre 4 y 500 micras (Towler y Sinnott 2019). Por esta última razón (rango de partícula) se ha optado por utilizar un hidrociclón ya que debido a la falta de datos no se conocen los tamaños de partícula obtenidos para el PCL.

IV.3.4.2. Tanque de mezcla

El tanque de mezcla tendrá un volumen igual que el volumen de líquido acumulado en el separador gas-líquido más la cantidad de metanol introducido, ya que la idea es descargar el volumen de líquido del separador por gravedad y añadir el metanol en el tanque de mezcla. Para el diseño de este se siguen heurísticas (Walas 2012) para hallar el diámetro y altura a partir del volumen mencionado y se diseña la agitación.

Tabla IV.4. Dimensiones del tanque de mezcla para la precipitación por adición de metanol

	P-IV.1
Diámetro tanque (m)	0,53
Altura tanque (m)	0,71
Volumen (m³)	0,16

Los distintos tipos de agitadores existentes son los descritos en el apartado *IV.3.1.4. Diseño del sistema de agitación*, y, el elegido en este caso es un diseño de turbina. La elección de esta es debido a que tiene un diseño simple y se puede utilizar para un amplio rango de viscosidades (McCabe, Smith y Harriott 2002).

Las dimensiones del agitador se obtienen con las proporciones típicas para un diseño de turbina, estas son descritas en el apartado *IV. 3.1.4. Diseño del sistema de agitación*. Los parámetros hallados a partir de estas proporciones típicas pueden identificarse en la Figura IV.10 que se muestra a continuación.

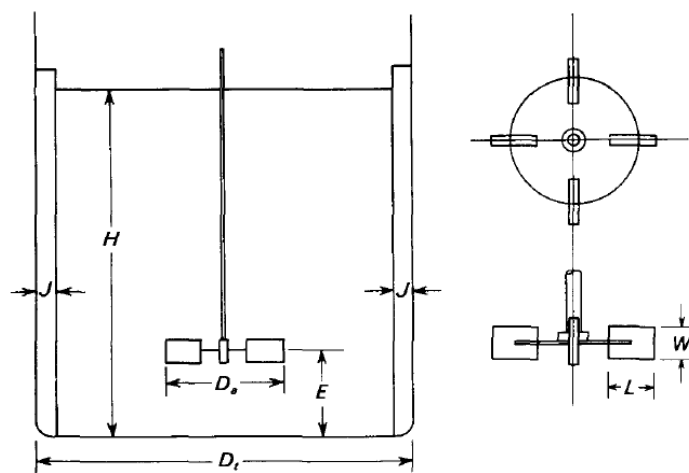


Figura IV.10. Medidas de un agitador de turbina.

El número de placas deflectoras generalmente es de 4, y el número de palas del agitador de 6 u 8 por lo que se ha elegido un valor de 6 palas que es el más común. Se ha seguido este diseño a causa de que estas proporciones estándar son ampliamente aceptadas y usadas (McCabe, Smith y Harriott 2002).

Para el cálculo de la potencia, se utiliza la ecuación IV.8:

$$P = \frac{\rho n^3 D_a^5 N_p}{g_c} \quad [IV.8]$$

Donde, P es la potencia, n es la velocidad de giro, D_a el diámetro del agitador, ρ la densidad, g_c la gravedad y N_p el número de potencia.

Para hallar N_p , el número de potencia se utilizará la Figura IV.13 del anexo, que permite hallar N_p a partir de Reynolds según Bates *et al.*; Rushton *et al.*

Se ha de destacar, que para todos estos cálculos se ha supuesto que el fluido con el que se trabaja es newtoniano.

IV.3.4.3. Hidrociclón

Para estimar el tamaño de hidrociclón se han usado los monogramas de Zanker que se muestran en las Figuras IV.14 y IV.15 del anexo (Towler y Sinnott 2019). De todas formas, estos monogramas sirven para tener una estimación preliminar del tamaño del hidrociclón necesario, pero a la hora de obtenerlo se debería consultar con fabricantes para determinar disposiciones y diseño ya que estas serán diferentes dependiendo de cada aplicación.

Siguiendo el método Zanker, se utiliza un monograma (Figura IV.14 del anexo) para hallar el diámetro de partícula para el cual el ciclón tiene una eficacia del 50 % (d_{50}) a partir del diámetro de partícula que se quiere separar en micras y la eficiencia en relación a las mismas (%).

Una vez hallado el d_{50} , se halla D_c el diámetro de la cámara del hidrociclón en centímetros con el siguiente monograma (Figura IV.15 del anexo). Para obtener este valor es necesario conocer la viscosidad dinámica del líquido, el caudal del líquido, la diferencia de densidades entre el líquido y el sólido y d_{50} . Con todos estos datos se halla D_c y se aplican las proporciones que se ven en la Figura IV.11.

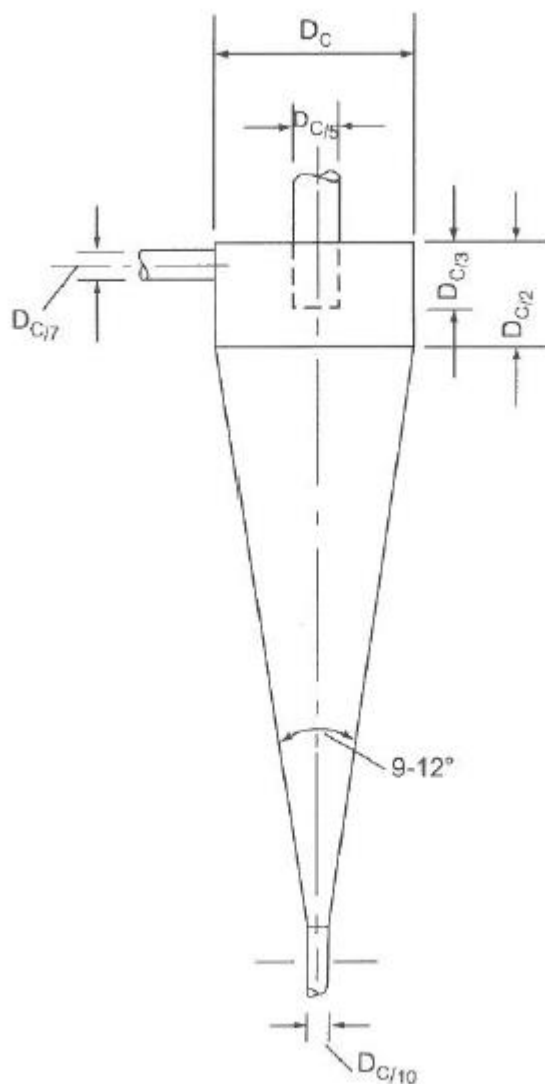


Figura IV.11. Proporciones típicas de un hidrociclón

Las proporciones obtenidas fueron las siguientes:

Tabla IV.5. Proporciones obtenidas para el hidrociclón

	H-IV.1
Dc (cm)	13,00
Dc/5 (cm)	0,03
Dc/7 (cm)	0,02
Dc/3 (cm)	0,04
Dc/2 (cm)	0,07
Dc/10 (cm)	0,01

IV.3.5. INTERCAMBIADOR DE CALOR

Se precisa de un único cambiador en el área IV (IC-IV.1). Para este cambiador será necesario un servicio externo, este será agua de red. Para abordar el diseño del intercambiador primeramente habrá que decidir el tipo de intercambiador de calor más adecuado, así como el número, arreglo y la longitud de los tubos.

Se utilizarán intercambiadores de carcasa y tubos con una disposición de flujo en contracorriente, dado que esto resulta en una transmisión de calor más eficiente (Incropera y De Witt, 1999).

Los resultados obtenidos se recogen en las siguientes tablas:

Tabla IV.6. Parámetros obtenidos para el intercambiador de calor IC-IV.1

Cambiadores		IC-IV.1
Q (kW)		1943
Fluido caliente	Corriente	34
	T_{in} (°C)	177
	T_{out} (°C)	25
Fluido frío	Corriente	Agua de red
	T_{in} (°C)	14
	T_{out} (°C)	24
DISEÑO		
U (W/m²°C)		100
ΔT_{lm}		53,94
Paso		"1:2"
R		15,20
S		0,61
F		0,85
ΔT_{lm} · F		46,17
A_{teórica} (m²)		421
L_{tubos}		5
D_{tubos, nominal} (in)		"3/4"
N_{tubos, teóricos}		1278,34
Pitch		"1 1/4"
N_{tubos, reales}		1330

Tabla IV.7. Parámetros obtenidos para el intercambiador de calor IC-IV.1.

Continuación.

D_{carcasa} (in)	39
A_{tubo} (m ²)	0,33
A_{real} (m ²)	438

IV.3.6. EQUIPOS AUXILIARES

IV.3.6.1. Compresores

Será necesario hacer uso de dos compresores en el proceso.

El compresor C-IV.1, es utilizado para presurizar el reactor con CO₂ a 10 bares que, es la presión necesaria para que se produzca la reacción. Consiste en un compresor centrífugo de una etapa, teniendo este tipo de compresores una eficacia del 75% (Walas 2012).

Por otra parte, el compresor C-IV.2, se coloca a la salida del separador para impulsar el gas, CO₂, de nuevo hacia el depósito de este, con el fin de reutilizarlo. Este compresor es necesario debido a que el depósito al cual se recircula está a cierta altura. Debido a las características necesarias de esta operación en este caso, el compresor elegido fue un ventilador.

El desarrollo de los cálculos para la implementación de ambos impulsores de gases queda recogido en el anexo. Para su diseño se ha tenido que considerar que no puede sobrepasarse la temperatura máxima recomendada, si esto pasase, se produciría la ignición de los lubricantes. La temperatura máxima se obtuvo de heurísticas (Walas 2012), siendo este de 177°C, ya que se recomienda una temperatura comprendida en un rango de 177-204°C. En la Tabla IV.8 se presentan los valores de diseño de los compresores descritos.

Tabla IV.8. Parámetros de diseño del compresor

	C-IV.1	C-IV.2
Caudal de gas (m³/h)	28187,74	28074,73
Etapas (n)	1	1
Relación de compresión (r)	6,54	6,54
T1 (°C)	25	25
T2 (°C)	177	177
P1 (atm)	2	1
Pn (atm)	10	2
Potencia (kW)	2495,60	857,90

IV.3.6.2. Bombas

Se han estudiado cuatro sistemas de bombeo, y se ha encontrado que solo es necesario uno de los estudiados. Estos sistemas estudiados, fueron la impulsión del OL del tanque pulmonal área IV, la impulsión del tolueno al reactor, la impulsión del efluente del reactor al separador y la impulsión del metanol al tanque de mezcla para la precipitación.

Debido a que para la impulsión del OL y del tolueno no se obtuvieron potencias del orden de 10^{-3} kW, se concluyó que no sería necesario el uso de bombas.

Por otro lado, el bombeo del efluente del reactor hacia el separador fluye por la propia gravedad. Por último, el bombeo del metanol sí que es necesario y se obtuvo una potencia más o menos considerable.

Finalmente, para este sistema de bombeo (B-IV.1) a implementar, se ha decidido utilizar una bomba rotativa. Las bombas centrífugas son el tipo de bomba más usado a nivel industrial, además de ser sencillas baratas y de bajo coste de mantenimiento (Couper et al, 2005) pero para la impulsión del metanol no ha podido seleccionarse una bomba centrífuga debido al bajo caudal que maneja.

Para hallar la potencia y carga de la bomba es necesario hacer un balance de energía mecánica en cada tubería donde se ha colocado una bomba, en este balance, aparece la diferencia de altura, la de presión y las pérdidas por fricción. Los cálculos de estos sistemas de bombeo se detallan en el apartado *IV.B.5. Diseño de equipos auxiliares* del anexo.

A continuación, en la Tabla IV.9 se presentan los parámetros de diseño para la bomba:

Tabla IV.9. Parámetros de diseño de las bombas

	B-IV.1
Q (m³/h)	0,64
H (m)	68,26
η (%)	65
Potencia (kW)	0,14

Destacar en este apartado que, para hallar los caudales en m³/h, se ha aplicado la mitad del tiempo de carga y descarga, ya que la primera mitad de este sería para la carga del reactor y la segunda mitad para la descarga. Con esto se concluye que las bombas deben vaciar el reactor en 30 minutos.

IV3.6.3. Tanques de almacenamiento

Son necesarios 5 tanques de almacenamiento, 4 para el almacenamiento de los reactivos del área IV (metanol, tolueno y CO₂), y otro para almacenar el producto producido, es decir, el PCL.

Para el almacenamiento de los reactivos y del producto, se estima una capacidad de los tanques equivalente a la cantidad de reactivo necesaria para una semana de producción, excepto para el CO₂ que debido a su baja densidad son necesarios dos tanques con un tiempo de residencia de 3 días únicamente.

A partir de los balances de materia y el tiempo se obtiene la cantidad de reactivo a almacenar, con ello y estimando un sobredimensionado de los tanques de entre el 10 y el 15% por seguridad se halla el volumen de estos.

El material de construcción utilizado corresponde a acero al carbono ya que es barato y no se trabaja con compuestos corrosivos. En la Tabla IV.10, aparecen las dimensiones de los tanques:

Tabla IV.10. Dimensiones de los tanques de almacenamiento

	τ (días)	Volumen (m ³)	Diámetro (m)	Altura (m)
T-IV.1 (Tolueno)	7	2,15	1,32	1,56
T-IV.2, T-IV.3 (CO₂)	3	23087	30	33,30
T-IV.4 (Metanol)	7	0,30	0,66	0,80
T-IV.5 (PCL)	7	3,34	1,56	1,74

Para el cálculo de las dimensiones de estos se ha utilizado la Ecuación IV.4 en combinación con heurísticas (Walas 2012).

IV.3.6.4. Válvulas

Para el funcionamiento de los reactores discontinuos, es imprescindible contar con válvulas.

Como simplemente se necesita que se corte o abra el paso del flujo, las válvulas seleccionadas son de compuerta.

Estas válvulas tienen un diseño simple y la capacidad de proporcionar un cierre hermético. Normalmente se utilizan en procesos donde se requiere un control ON/OFF del flujo, como en este caso.

IV.4. DISEÑO MECÁNICO

El diseño mecánico consiste en aplicar el código ASME para hallar el espesor de las paredes del reactor de síntesis, y con ello el peso de este. El código ASME se aplica a recipientes y calderas a presión (Peters, Timmerhaus y West 2003)

El reactor tiene un diámetro de 1,35 metros y una altura de 2,7 metros. Con ello se halló un volumen de 3,86 m³. La presión con la que se trabaja es de 10 bares y es constante durante la reacción. Respecto a la temperatura, es constante también durante la reacción y es de 25°C.

Para el diseño mecánico es necesario realizarlo en las condiciones de operación más desfavorables. Por ello es necesario sumar a la temperatura de operación 50°F, de esta manera se halla la temperatura de diseño. Para hallar la presión de diseño, es necesario sumarle a la presión de operación 1,7 bar y a su vez a este valor aplicarle el 110% (Walas 2012). Los valores obtenidos son: 35°C y 1287 kPa.

Por último, como material de construcción se utiliza acero inoxidable Tipo 316, compuesto por cromo, níquel y molibdeno, que le aporta resistencia ante elevadas temperaturas (1000°C), además mejora su resistencia a la corrosión (Peters Timmerhaus y West 2003), aunque en este caso no exista una elevada corrosión.

Tabla IV.11. Parámetros del diseño mecánico del equipo según el código ASME

DISEÑO MECÁNICO		
Referencia	R-III.1	
Equipo	Reactor de síntesis	
Función	Obtención del producto final del proceso (PCL)	
ESPECIFICACIONES		
Compuestos tratados	CO ₂	
	C ₆ H ₅ CH ₃	
	PCL	
	C ₁₀ H ₁₆ O	
CONDICIONES DE OPERACIÓN		
Temperatura (°C)	25	
Presión (kPa)	1000	
PARÁMETROS DE DISEÑO		
Temperatura (°C)	35	
Presión (kPa)	1287	
Geometría	Cuerpo	Cilíndrico
	Cabezales	Toro esféricos
Diámetro (m)	1,35	
Altura (m)	2,70	
Espesor (m)	0,02	
Material de construcción	Tipo	Acero inoxidable Tipo 316
	Peso (kg)	1749

IV.5. ANÁLISIS DE COSTES

La determinación de los costes del área IV, se detalla en el apartado *IV.B.6. Coste de equipos del proceso* del anexo. El valor de estos costes está basado en las gráficas obtenidas de Peters *et al.*, estos costes están en dólares USA y basados en el 2003 por lo que deben cambiarse de moneda y actualizarse utilizando la Ecuación IV.9. En esta ecuación aparece el CEPCI (Chemical Engineering Plant Cost Index) un valor que se va actualizando cada año.

$$Coste_{2023} = Coste_{2002} \left(\frac{CEPCI_{2023}}{CEPCI_{2002}} \right) \quad [IV.9]$$

Es necesario actualizar los costes debido a que cada año fluctúan los precios tanto de los materiales, mano de obra, de transporte, etc, debido a la inflación.

En la Tabla IV.12, se recoge el coste para cada equipo en dólares, posteriormente se suma para obtener un coste global y se pasa a euros para finalmente aplicar el factor de índice de costes.

Tabla IV.12. Costes equipos área IV

Equipo	Coste (\$)
Reactor, R-IV.1, R-IV.2, R-IV.3	240.000
Separador vertical, S-IV.1	18.000
Tanque de precipitación, P-IV.1	4.500
Hidrociclón, H-IV.1	1.500
Tanques de almacenamiento, T-IV	1.831.500
Bomba, B-IV.1	2.380
Compresores, C-IV.1, C-IV.2	601.200
Válvulas, V-IV	5.720
Intercambiador de calor, IC-IV.1	63.177
TOTAL (\$)	2.767.977
TOTAL (€)	2.546.539
TOTAL (M€)	2,54
Coste actualizado (M€)	5,19

Para hacer el cambio de dólares USA a euros, se ha buscado el valor del dólar en euros a 19 de junio de 2023, siendo el valor de 1\$ de 0,92€.

IV.6. BIBLIOGRAFÍA

- ACOSTA BELTRÁN, S.C., DAZA, C.E. y BLANCO JIMÉNEZ, C., 2019. Catalizadores tipo zinc(salen) y su aplicación en la copolimerización entre óxido de limoneno y CO₂. *Scientia et Technica*, vol. 24, no. 2, ISSN 2344-7214, 0122-1701.
- Agitador industrial helicoidal- Autmix Flow | Serie NC(H). [En línea]. [Consultado: 29 mayo 2023]. Disponible en: <https://autmix.com/autmix-flow/agitadores-industriales/de-ancla/agitador-helicoidal-helice-serie-nch>.
- BYRNE, C.M., ALLEN, S.D., LOBKOVSKY, E.B. y COATES, G.W., 2004. Alternating Copolymerization of Limonene Oxide and Carbon Dioxide. *Journal of the American Chemical Society*, vol. 126, no. 37, ISSN 0002-7863, 1520-5126.
- CHAVEZ, A., 2023. Diseño de un reactor químico de polimerización para la producción de ácido poliláctico. *Revista de Iniciación Científica*, vol. 9.
- Citrus: World Markets and Trade. *USDA Foreign Agricultural Service* [En línea], 2023. [Consultado: 7 marzo 2023]. Disponible en: <https://www.fas.usda.gov/data/citrus-world-markets-and-trade>.
- DURKIN, A., I. TAPTYGIN, Q. KONG, M. F. GUNAM RESUL, A. REHMAN, A. M. L. FERNÁNDEZ, A. P. HARVEY, N. SHAH y M. GUO, 2019. Scale-up and Sustainability Evaluation of Biopolymer Production from Citrus Waste Offering Carbon Capture and Utilisation Pathway. [En línea]. *ChemistryOpen*, vol. 8, nº 6, p. 668–688.
- ESCOBAR RAMÍREZ, C.D. y NARANJO TINOCO, C.A., 2021. *Diseño y construcción de un reactor de polimerización para la síntesis de ácido poliláctico* [En línea]. [Consultado: 30 mayo 2023]. Disponible en: <http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/24484>.
- HAUENSTEIN, O., M. REITER, S. AGARWAL, B. RIEGER y A. GREINER, 2016. Bio-based polycarbonate from limonene oxide and CO₂ with high molecular weight, excellent thermal resistance, hardness and transparency. [En línea]. *Green Chemistry*, vol. 18, nº 3, pp. 760-770.
- REHMAN, A, et al, 2019. Highly selective, sustainable synthesis of limonene cyclic carbonate from bio-based limonene oxide and CO₂_ A kinetic study | Elsevier Enhanced Reader. [En línea]. [Consultado: 17 abril 2023]. Disponible en: <https://reader.elsevier.com/reader/sd/pii/S2212982018305146?token=AAE701CADACDA36FD11DD3948BFB50244FD2C3D3B147EC2701CF6AFE77D9FC A027BB00F0B7864197276501F50F52A70E&originRegion=eu-west-1&originCreation=20230417154045>.
- KANNICHE, M., GROS-BONNIVARD, R., JAUD, P., VALLE-MARCOS, J., AMANN, J.-M. y BOUALLOU, C., 2010. Pre-combustion, post-combustion and oxy-combustion in thermal power plant for CO₂ capture. *Applied Thermal Engineering*, vol. 30, no. 1, ISSN 1359-4311.
- KURIYAMA, M., ARAI, K. y SAITO, S., 1983. Mechanism of Heat Transfer to Pseudoplastic Fluids in an Agitated Tank with Helical Ribbon Impeller. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, vol. 16, no. 6.

- LI, C., JOHANSSON, M., BUIJSEN, P., DIJKSTRA, G., SABLON, R.J. y KONING, C.E., 2021. Limonene-derived polycarbonates as biobased UV-curable (powder) coating resins. *Progress in Organic Coatings*, vol. 151, ISSN 0300-9440.
- MCCABE, W.L., SMITH, J.C. y HARRIOTT, P., 2002. *Operaciones unitarias en ingeniería química*. ISBN 978-970-10-3648-8.
- PETERS, M.S., TIMMERHAUS, K.D. y WEST, R.E., 2003. *Plant design and economics for chemical engineers*. 5th ed. New York: McGraw-Hill. McGraw-Hill chemical engineering series, ISBN 978-0-07-239266-1.
- Polymers from Oranges: Design and Feasibility of Polymer Production from Orange Oil Derivatives. [En línea]. [Consultado: 17 abril 2023]. Disponible en: <https://docplayer.net/52754349-Polymers-from-oranges-design-and-feasibility-of-polymer-production-from-orange-oil-derivatives.html>.
- RIAZA BENITO, J., 2014. Captura de CO₂ en centrales termoeléctricas mediante combustión de carbón y biomasa en condiciones de oxidación. En: Accepted: 2014-12-04T10:45:44Z [En línea], [Consultado: 14 febrero 2023]. Disponible en: <https://digibuo.uniovi.es/dspace/handle/10651/28977>.
- SINNOTT, R., TOWLER, G. y COSTA LÓPEZ, J., 2012. *Diseño en ingeniería química / Ray Sinnott, Gavin Towler; [versión española traducida por José Costa López ... et al.]*. [En línea]. [Consultado: 21 abril 2023]. ISBN 978-84-291-7199-0. Disponible en: <https://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&db=cat07109a&AN=tbuo.01206696&site=eds-live>.
- TOWLER, G. y SINNOTT, R.K., 2019. *Diseño en ingeniería química: Serie Ingeniería Química Coulson & Richardson*. ISBN 978-84-291-9504-0.
- WALAS, S.M., 2012. *Chemical process equipment: selection and design*. Third edition. Amsterdam: BH, Butterworth-Heinemann, an imprint of Elsevier. IChemE, ISBN 978-0-12-396959-0.
- WU, Ying, CHEN, X., MA, J., WU, Ye, LIU, D., MI, J. y XIE, W., 2020. System integration for coal-fired power plant with post combustion CO₂ capture: Comparative study for different solid dry sorbents. *Fuel*, vol. 280, ISSN 0016-2361.

IV. ANEXO

IV. A. SÍMBOLOS

F_{A0}	Flujo molar inicial del compuesto A
ΔH	Entalpía de reacción
V	Volumen del recipiente o mezcla al que se haga referencia
D	Diámetro del equipo al que se haga referencia
L	Longitud del equipo al que se haga referencia
E_j	Eficiencia
ε	Rugosidad
f	Factor de fricción
P	Potencia de la bomba
r_i	Radio del recipiente a presión al que se le aplique ASME
C_p	Capacidad calorífica
$D_{i, \text{ópt}}$	Diámetro óptimo
$D_{i \text{ nominal}}$	Diámetro interno nominal
H	Carga de la bomba
ΔP	Caída de presión
ΔP_f	Caída de presión por fricción
ΔP_T	Caída de presión total
Δz	Diferencia de altura
x_A	Conversión del compuesto A
ρ	Densidad
μ	Viscosidad
W	Trabajo de la bomba
τ	Tiempo de residencia
t	Grosor
S (kPa)	Tensión máxima
V_v	Caudal de gas
Q	Calor de reacción
Re	Número de Reynolds
u_t	Velocidad de sedimentación
\dot{m}_{H_2O}	Flujo másico de agua
C_C	Grosor adicional por corrosión
η	Eficacia
n	Número de etapas del compresor

IV. B. CÁLCULOS

IV. B.1. Dimensionado del reactor de síntesis

Para el diseño del reactor se ha hecho un cambio de escala a partir del reactor utilizado en el artículo de Haustein *et al.* El reactor de este artículo tiene un volumen de 10 L y produce una cantidad de PCL de 1,2 kg. En el caso del presente proyecto, a partir del balance de materia realizado al proceso se obtiene que, se desean obtener 463,44 kg de PCL en cada lote, cada 24 horas.

Con estos valores, utilizando la proporción directa se encuentra que el volumen requerido para esta producción es de 3862 L, que equivale a 3,86 m³. Este volumen hace referencia al volumen total con el factor de seguridad incluido.

A partir del volumen obtenido se halla el diámetro con la ecuación (IV.4):

$$V = \frac{\pi D^2 L}{4} \quad [IV.4]$$

Aplicando heurísticas (Walas 2012), en las que se dice que las proporciones óptimas de un reactor de tanque agitado implica que el diámetro del tanque sea igual a la altura del líquido, pero si el tanque trabaja a presión debe ser más estrecho, es decir la altura mayor al diámetro por ello se toma la siguiente relación: $L_{\text{líquido}}=1,5D$. La altura del líquido por seguridad equivale al 75% de la altura total y es por ello que la ecuación para hallar el diámetro de este reactor queda como sigue:

$$V = \frac{\pi D^2 \left(\frac{1,5D}{0,75}\right)}{4} \quad [IV.10]$$

De esta manera se obtienen las proporciones del tanque presentadas en el apartado IV.3.1.3. *Dimensionado del reactor de síntesis.*

IV.B.1.1 Diseño de la agitación del reactor

Para el diseño de la agitación del reactor se sigue el artículo de Aleida Loo Ch. *et al.* En este artículo se diseña un sistema de agitación para un reactor de polimerización en el que se produce ácido poliláctico (bioplástico).

El agitador seleccionado es un agitador de cinta helicoidal debido a las necesidades del proceso como la alta viscosidad. Esto puede comprobarse con la Figura IV.12 (Sinnott, Towler y Costa López 2012).

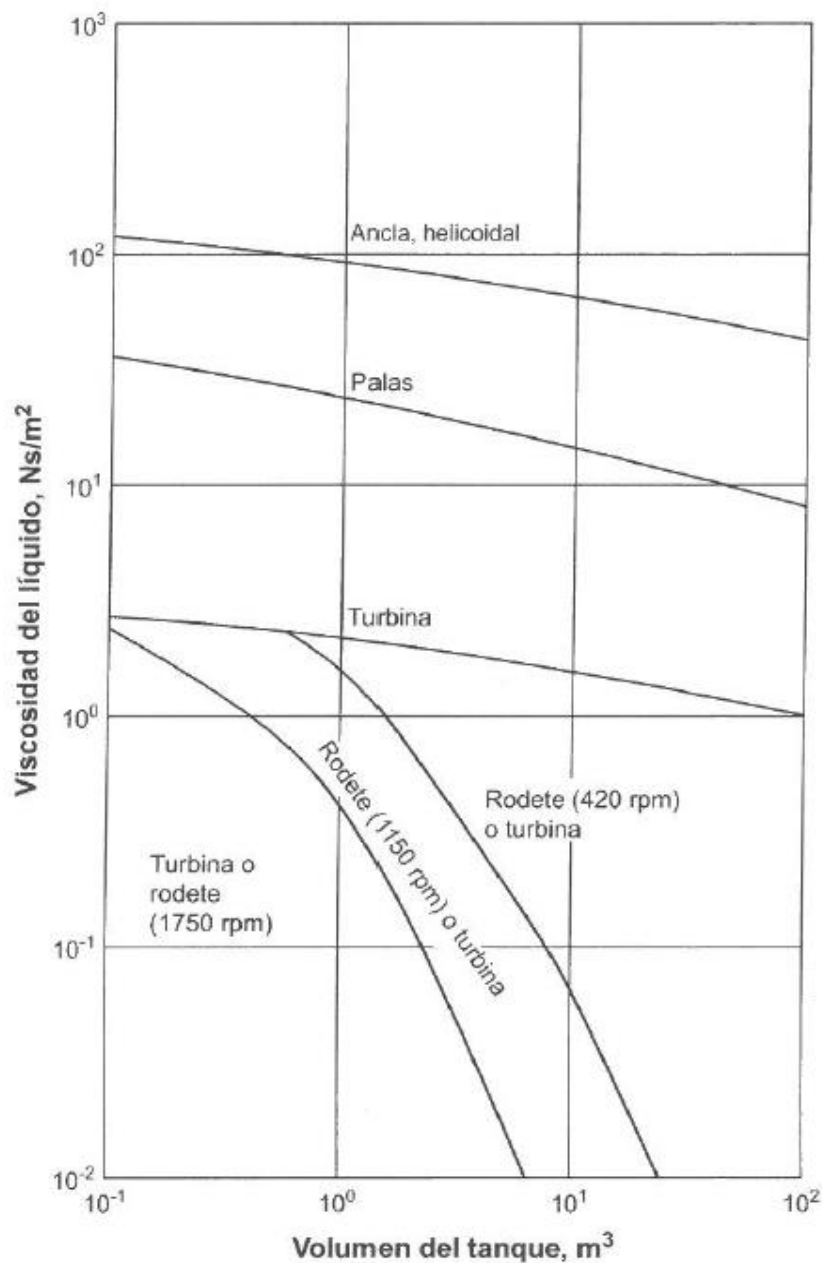


Figura IV.12. Guía para la selección del agitador (Sinnott, Towler y Costa López 2012).

Por seguridad como viscosidad se toma la del PCL (526,63 Pa s), y como volumen, el del reactor de 3,86 m³. Como se puede observar para viscosidades a partir de 100 Ns/m², el agitador ideal es de tipo ancla o helicoidal.

En primer lugar, se hallan las dimensiones del agitador proporcionadas por Kuriyama, Arai y Saito, estas se presentan a continuación:

$$\frac{D_t}{D_A} = 1,12 \quad [IV. 11]$$

$$\frac{S}{D_A} = 1,05 \quad [IV. 12]$$

$$\frac{W}{D_A} = 0,12 \quad [IV. 13]$$

$$\frac{h_A}{D_A} = 1,05 \quad [IV. 14]$$

$$\frac{h_L}{D_A} = 1,16 \quad [IV. 15]$$

$$N_R = 2 \quad [IV. 16]$$

Siendo D_t el diámetro del reactor en metros, D_A el diámetro del agitador en metros, S los pasos de la cinta helicoidal en metros, W el ancho de la hoja del agitador en metros, h_A la altura del agitador en metros, h_L el nivel del líquido en metros y N_R el número de cintas. Con estas ecuaciones se hallan las dimensiones del agitador, que aparecen en la Tabla IV.13.

Tabla IV.13. Valores obtenidos para el diseño del agitador

D_t (m)	1.35
D_A (m)	1.21
S (m)	1.27
W (m)	0.14
h_A (m)	1.26
h_L (m)	1.40
NR	2

Para aplicar las ecuaciones de potencia para este agitador es necesario hallar el número de Reynolds ya que son para régimen laminar. Para ello se halla Reynolds con las propiedades del policarbonato, por seguridad ya que la viscosidad de este es alta.

$$Re = \frac{D_A^2 N \rho}{\mu} \quad [IV.5]$$

Siendo D_A el diámetro del agitador, 1,21 m, N la velocidad de agitación tomada de 40 rpm, ρ, la densidad del PCL de 1080 kg/m³ y μ, la viscosidad del PCL 526,53 Pa s. De esta manera se obtiene un Re de 1,99, al ser este valor menor de 2500 se concluye que el régimen es laminar.

Para el cálculo de la potencia se sigue la siguiente ecuación:

$$P = kp \mu D_A^3 N^2 \quad [IV.17]$$

Como se puede observar en la Ecuación IV.17 es necesario hallar el valor de la constante geométrica relacionada al consumo de la potencia (kp), se utilizará la ecuación IV.18 siguiendo el artículo de Kuriyama, Arai y Saito:

$$kp = (91N_R)^{0,79} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{D_t}{D_A} - 1 \right) \right)^{-0,31} \left(\frac{S}{D_A} \right)^{-0,37} \left(\frac{W}{D_A} \right)^{0,16} \left(\frac{h_L}{D_A} \right) \quad [IV.18]$$

Donde P es la potencia consumida en W, μ es la viscosidad del PCL (APL) en Pa·s, D_A el diámetro del agitador en metros y N la velocidad de giro en rps.

Se obtiene finalmente un valor de k_p de 118,44. Aplicando este valor a la ecuación de potencia, se halla una potencia de 48,42 kW.

Destacar, que debido a la falta de propiedades del PCL, se ha aproximado la viscosidad de este a la del ácido poliláctico que, también es un bioplástico.

IV.B.1.2 Encamisado del reactor

Para estimar el área del encamisado se ha seguido la Ecuación IV.19. Para ello es necesario saber el incremento de temperatura logarítmica, el coeficiente global de transferencia de calor y el calor que genera la reacción.

$$Q = UA\Delta T_{ln} \quad [IV.19]$$

Como incremento de temperatura se estiman 10°C por lo que suponiendo que el agua de red esté a 14°C (T_{in}), entrará al encamisado a esta temperatura y saldrá de este a 24°C (T_{out}). La temperatura de reacción es de 25°C ($T_{reacción}$), aplicando la Ecuación IV.20, se halla el incremento de temperatura logarítmico.

$$\Delta T_{ln} = \frac{(T_{reacción} - T_{in}) - (T_{reacción} - T_{out})}{Ln\left(\frac{(T_{reacción} - T_{in})}{(T_{reacción} - T_{out})}\right)} \quad [IV.20]$$

El coeficiente global de transmisión de calor se obtiene de la Tabla IV.14, siendo el refrigerante agua y considerando el contenido del reactor como una disolución acuosa.

Tabla IV.14. Valores típicos del coeficiente global de transmisión de calor (Sinnott, Towler y Costa López 2012)

Immersed Coils		
Coil	Pool	
<i>Natural circulation</i>		
Steam	Dilute aqueous solutions	500–1000
Steam	Light oils	200–300
Steam	Heavy oils	70–150
<i>Agitated</i>		
Steam	Dilute aqueous solutions	800–1500
Steam	Light oils	300–500
Steam	Heavy oils	200–400
Water	Aqueous solutions	400–700
Water	Light oils	200–300
Jacketed Vessels		
Jacket	Vessel	
Steam	Dilute aqueous solutions	500–700
Steam	Light organics	250–500
Water	Dilute aqueous solutions	200–500
Water	Light organics	200–300

Conocidos estos dos parámetros, por último, se halla el calor producido por la reacción con la Ecuación IV.2. Finalmente se despeja el área y se obtiene un valor de 0,67 m², se calcula también el área del reactor para ver si es suficiente el área disponible, como esta es de 1,43 m², se comprueba que, efectivamente existe área disponible.

Por último, debe calcularse el flujo de agua necesario. Para ello se utiliza la Ecuación IV.3. Donde se conocen todos los parámetros, el calor es el desprendido por la reacción, la capacidad calorífica del agua es de 4,18 KJ/°C kg y el incremento de temperatura como se ha comentado anteriormente es de 10°C. En la Tabla IV.15, se presentan los resultados obtenidos.

Tabla IV.15. Parámetros obtenidos para el encamisado del reactor

Q(kw)	0,98
Q (KJ/h)	3,52
C_p H₂O (KJ/kg °C)	4,18
ΔT (°C)	10
T_{in} (°C)	14
T_{out} (°C)	24
m (kg/h)	0,08
Área reactor (m²)	1,43
U (W/m² °C)	350
ΔT_{in} (°C)	4,17
T reacción (°C)	25
Q (W)	978
Área del encamisado (m²)	0,67

IV.B.2. Diseño del separador

Para el dimensionado del separador de fases se utiliza la Ecuación IV.7:

$$D_v = \sqrt{\left(\frac{4 V_v}{\pi u_s}\right)} \quad [IV.7]$$

Donde son conocidos todos los valores excepto la velocidad de sedimentación, la cual se halla de:

$$u_t = 0,07((\rho_L - \rho_v)/\rho_v)^{1/2} \quad [IV. 6]$$

Como densidad del vapor se toma la densidad del CO₂ a temperatura ambiente, 1,84 kg/m³, para la densidad del líquido se hizo una media en función de las proporciones de cada compuesto, siendo esta de 971 kg/m³. El valor de esta velocidad fue de 1,6 m/s.

El caudal de gas obtenido del balance de materia es de 3,9 m³/s. Con todos estos valores el diámetro obtenido fue de 1,76 metros. Las proporciones se presentaron en la Tabla IV.2. del apartado IV.3.3.3. *Dimensionado del separador vertical*. El área del separador se obtiene mediante la ecuación del área de un cilindro.

IV.B.3. Diseño del sistema de precipitación

IV.B.3.1. Diseño del Tanque de mezcla

Para hallar el volumen del tanque de mezcla primero se calcula el volumen de líquido que llegará en cada lote. Este volumen será la suma del efluente líquido que sale del separador (OL, PCL y tolueno) y el metanol que se añade para la precipitación:

$$V_{\text{líquido}}(m^3) = V_{\text{efluente}} + V_{\text{metanol}} = 0,125 + 0,032 = 0,157 m^3 \quad [IV. 21]$$

Siguiendo heurísticas (Walas 2012), se define como proporciones óptimas cuando el diámetro del tanque es igual a la altura del líquido, que corresponde con el 75% de la altura total del tanque. Entonces, aplicando la ecuación del volumen de un cilindro:

$$V_{\text{tanque}}(m^3) = \frac{\pi D^2 \left(\frac{D}{0,75}\right)}{4} \quad [IV. 22]$$

De esta manera se obtiene el diámetro del tanque, para hallar la altura total del tanque:

$$L_{\text{tanque}} = \frac{L_{\text{liquido}}}{0,75} \quad [IV.23]$$

Los valores obtenidos se muestran en el apartado *IV.3.4.2. Tanque de mezcla*.

Para la agitación del tanque se elige una turbina de 6 palas. Las dimensiones obtenidas del agitador a partir de las proporciones típicas (McCabe, Smith y Harriott 2002) son las siguientes:

Tabla IV.16. Valores obtenidos para el diseño del agitador

D_t (m)	0.53
D_a (m)	0.18
H (m)	0.53
J (m)	0.04
E (m)	0.18
W (m)	0.04
L (m)	0.04

Las ecuaciones utilizadas para hallar los valores que aparecen en la Tabla IV.16 fueron las siguientes:

$$\frac{D_a}{D_t} = \frac{1}{3} \quad [IV.24]$$

$$\frac{H}{D_t} = 1 \quad [IV.25]$$

$$\frac{J}{D_t} = \frac{1}{12} \quad [IV.26]$$

$$\frac{E}{D_a} = 1 \quad [IV.27]$$

$$\frac{W}{D_a} = \frac{1}{5} \quad [IV.28]$$

$$\frac{L}{D_a} = \frac{1}{4} \quad [IV.29]$$

Donde, D_t , es el diámetro del tanque, D_a el diámetro del agitador, H la altura del líquido en el tanque, W el ancho de pala, J el ancho de los deflectores y L la longitud de la pala.

Después del cálculo de las dimensiones del agitador, es necesario hallar la potencia de este. Para ello se aplica la Figura IV.13. En la cual se representa en abscisas el número de Reynolds y en ordenadas N_p , el número de potencia. El número de Reynolds se calcula de nuevo con las propiedades del PCL por seguridad y se obtiene un valor de 1,99, es decir régimen laminar.

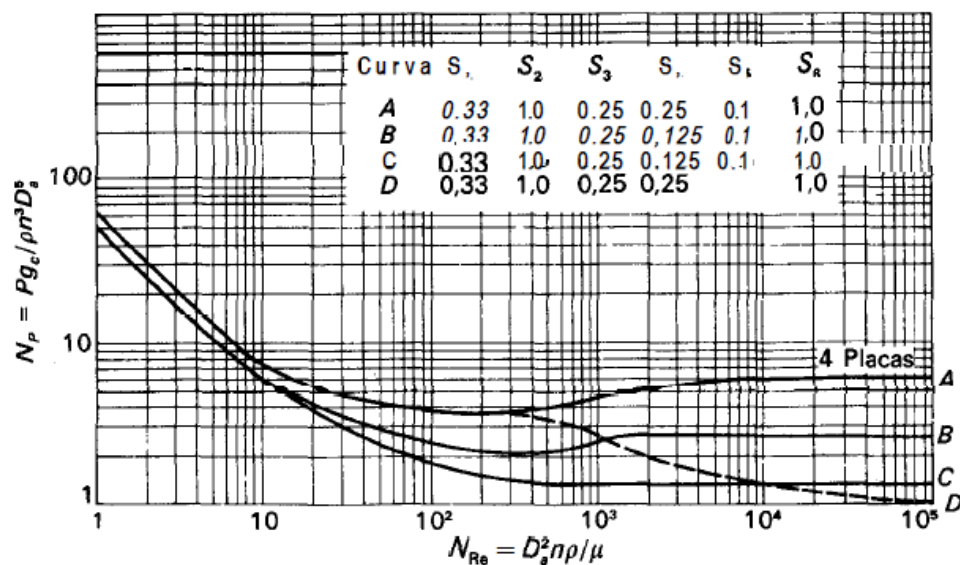


Figura IV.13. Número de potencia frente a número de Reynolds para turbinas de seis palas (Según Bates et al.; Rushton et al.)

En la gráfica aparecen distintas curvas, A, B, C y D. Cada una depende de los valores S_1, S_2, S_3, S_4, S_5 y S_6 . Estos valores se calculan con las siguientes ecuaciones:

$$S_1 = \frac{D_a}{D_t} = \frac{1}{3} \quad [IV.30]$$

$$S_2 = \frac{E}{D_a} = 1 \quad [IV.31]$$

$$S_4 = \frac{W}{D_a} = \frac{1}{5} \quad [IV.32]$$

$$S_5 = \frac{J}{D_t} = \frac{1}{12} \quad [IV.33]$$

$$S_6 = \frac{H}{D_t} = 1 \quad [IV.34]$$

El valor de S_3 , se mantiene constante para todas las curvas (0,25). Con estos valores la curva correspondiente es la A. Con un número de Reynolds aproximado a 2 se obtiene un número de potencia, N_p , de 30. Despejando la potencia, P (Ecuación IV.35), de la Ecuación que aparece en el eje de ordenadas para hallar N_p (Figura IV.13), se obtiene una potencia igual a 1,6 Watts.

$$P = \frac{\rho n^3 D_a^5 N_p}{g_c} \quad [IV.35]$$

Siendo g_c , la aceleración de la gravedad, $9,8 \text{ m/s}^2$, n la velocidad de agitación, al ser una mezcla viscosa se eligen 40 rpm, como en el caso del reactor y ρ es la densidad del PCL en kg/m^3 .

IV.B.3.2. Diseño del hidrociclón

Para dimensionar el hidrociclón se han utilizado los diagramas de Zanker (Towler y Sinnott 2019).

En el primer diagrama (Figura IV.14), se relaciona el diámetro de partícula con un 50% de eficacia (d_{50}), el diámetro de cualquier partícula y la eficacia de la separación. En este caso como eficacia de separación se supone un 100% («Scale-up and Sustainability Evaluation of Biopolymer Production from Citrus Waste Offering Carbon Capture and Utilisation Pathway»), pero en el diagrama al no aparecer este valor y que exista como máximo un 99,8, se toma este último. Como se desconoce el diámetro de las partículas que se quiere separar se toma un valor de 200 micras.

Uniéndolo en el diagrama estos dos valores, se conoce d_{50} , en este caso tomará un valor de 50 micras.

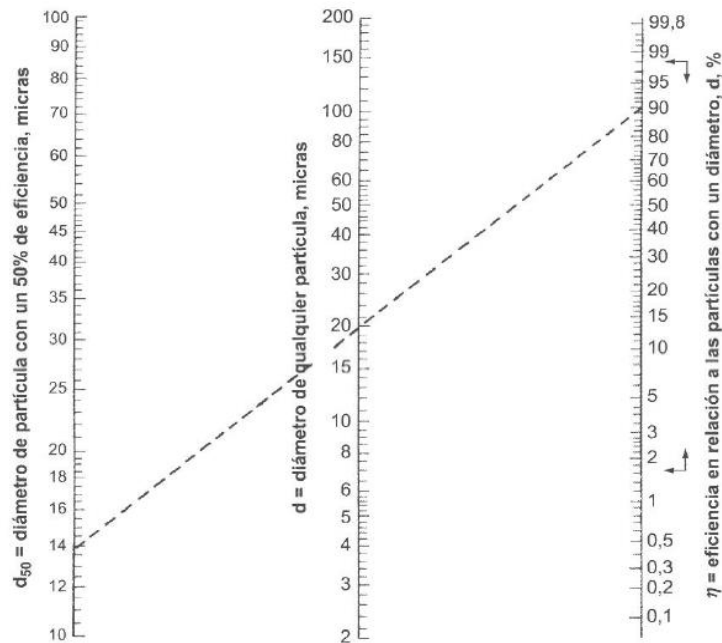


Figura IV.14. Determinación del d_{50} de una separación de partículas deseada (Towler y Sinnott 2019)

Para hallar finalmente el diámetro de cámara del hidrociclón, es necesario conocer previamente el caudal de líquido en L/min, la diferencia de densidades entre el líquido y el sólido, la viscosidad dinámica del líquido en $\text{mN}\cdot\text{s}/\text{m}^2$ y el d_{50} hallado anteriormente.

El caudal líquido se conoce, y es la suma del metanol con el OL y el tolueno ya que el PLC habrá precipitado en el tanque de mezcla. Este valor en L/min es de 15,72. Por otro lado la diferencia de densidades también se conoce, la del sólido (PCL) es de $1080 \text{ kg}/\text{m}^3$ y la del líquido asume como la densidad del tolueno ya que la cantidad de este es mucho mayor que la del OL, esta densidad es de $871 \text{ kg}/\text{m}^3$. Finalmente, la diferencia de densidades es de 0,21.

Por último, la viscosidad del líquido se supone como la del tolueno por la razón descrita anteriormente, y este valor es de $0,56 \text{ mN}\cdot\text{s}/\text{m}^2$. Conociendo todos estos datos se puede utilizar el diagrama siguiente (Figura IV.15):

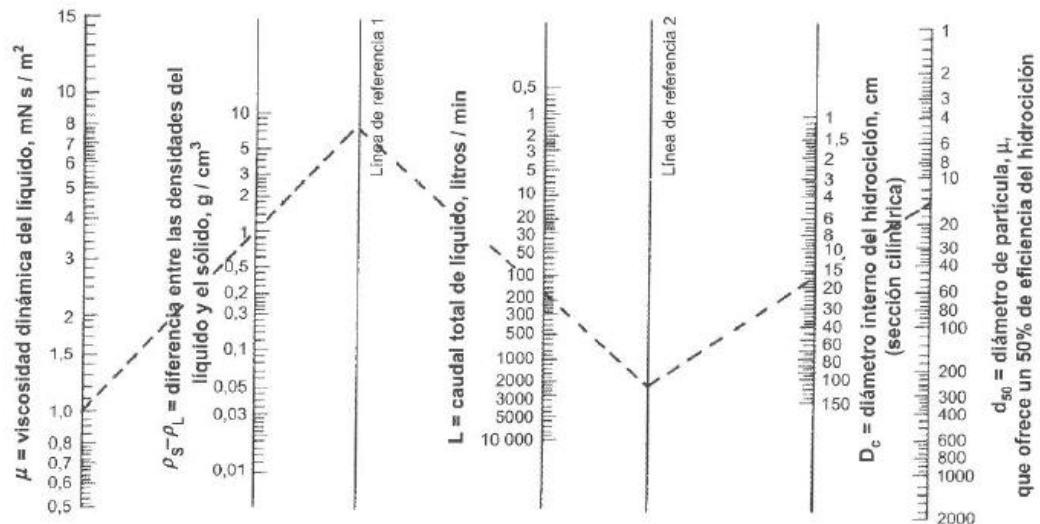


Figura IV.15. Diámetro de cámara D_c a partir del caudal, las propiedades físicas, y el tamaño de partícula d_{50} (Towler y Sinnott 2019).

Como diámetro de cámara del hidrociclón se obtienen 13 cm, las dimensiones de este son presentadas en el apartado IV.3.4.3. *Hidrociclón*.

IV.B.4. Diseño del intercambiador de calor

Para hallar el área teórica será necesario aplicar la Ecuación IV.36, donde U es el coeficiente global de transmisión de calor, Q el flujo de calor, ΔT la diferencia entre el fluido caliente y el fluido frío y A el área del intercambiador.

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T \quad [IV.36]$$

Para la determinación del coeficiente global de transmisión de calor, U , se acuden a las Figuras IV.28, IV.29 y IV.30, las cuales se encuentran en el anexo.

Puesto que se trabaja a contracorriente, el gradiente de temperatura entre el fluido frío y el fluido caliente se calcula mediante la Ecuación IV.37 a partir de las temperaturas de entrada y salida del fluido caliente ($T_{h,i}$ y $T_{h,o}$, respectivamente) y del fluido frío ($T_{c,i}$ y $T_{c,o}$, respectivamente).

$$\Delta T = \Delta T_{Lm} = \frac{(T_{h,o} - T_{c,i}) - (T_{h,i} - T_{c,o})}{\ln\left(\frac{T_{h,o} - T_{c,i}}{T_{h,i} - T_{c,o}}\right)} \quad [IV.37]$$

Por otro lado, al trabajar con intercambiadores de paso múltiple es necesario ajustar el valor de ΔT_{Lm} con un factor de corrección F , este factor toma valores entre 0

y 1. En este caso al utilizar un intercambiador de 2 pasos (1:2), este factor F puede calcularse mediante las Ecuaciones IV.38, IV.39 y IV.40.

En estas ecuaciones aparecen los parámetros R y S. Para el cálculo de los mismos es necesario fijar el fluido que circula por la carcasa y, el que circula por los tubos. Normalmente, los fluidos más corrosivos, a mayor presión o con mayor tendencia al ensuciamiento se hacen circular por los tubos; esto se debe a que son más sencillos de limpiar que la carcasa e implican, además, una menor inversión económica en caso de ser sustituidos. Como resultado, es más adecuado en todos los casos que sea el fluido frío el que circule por el interior de los tubos, debido a su corrosividad.

$$F = \frac{\sqrt{(R^2 + 1)} \ln \left[\frac{1 - S}{1 - R \cdot S} \right]}{(R - 1) \ln \left[\frac{2 - S[R + 1 - \sqrt{(R^2 + 1)}]}{2 - S[R + 1 + \sqrt{(R^2 + 1)}]} \right]} \quad [IV.38]$$

$$R = \frac{T_i - T_o}{t_o - t_i} \quad [IV.39]$$

$$S = \frac{t_o - t_i}{T_i - t_i} \quad [IV.40]$$

Una vez hallados los parámetros mencionados anteriormente, puede hallarse el área teórica. A partir de dicha área se calcula el número de tubos necesarios (Ecuación IV.41). Para los tubos debe considerarse un diámetro y una longitud, en este caso se ha considerado un diámetro externo de 19,05 mm y una longitud de 5 m (Towler y Sinnott 2019).

$$N_{\text{tubos teóricos}} = \frac{A_{\text{teórica}}}{\pi D_{\text{tubo}} L_{\text{tubo}}} \quad [IV.41]$$

Las dimensiones de la carcasa, así como el número de tubos y la dimensión y disposición de los mismos (cuadrada o triangular) se encuentran normalizadas por las normas TEMA. Por ello, una vez calculado el número de tubos teóricos se acude a estas normas y se selecciona el número inmediatamente superior. Por último, se calcula el área de intercambio real. La tabla TEMA utilizada se recoge en el Anexo (Figura IV.31).

Se escoge un arreglo triangular para los tubos, por ser el más común al obtenerse un intercambio de área mayor (Incropera y De Witt, 1999). En cuanto a la distancia entre tubos (pitch) se elige 1 ¼ in.

IV.B.5. Diseño de equipos auxiliares

IV.B.5.1. Diseño de compresores

Para el diseño de compresores se siguen heurísticas (Walas 2012). Se planteará el proceso general que se ha llevado a cabo para el diseño de ambos compresores. Los parámetros obtenidos se recogen en la Tabla IV.5 del apartado IV.3.6.1. *Compresores*.

En primer lugar, será necesario calcular la relación de compresión, $r=P_2/P_1$, esta relación hace referencia a la capacidad del compresor de comprimir en cada una de las etapas. Para hallar, la relación de compresión se utiliza la Ecuación IV.42:

$$T_2 = T_1 \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^a \quad [IV.42]$$

Para calcular r , es necesario conocer T_1 y T_2 . T_1 es la temperatura de entrada al compresor, es decir, la de la conducción y, T_2 es la temperatura de salida de este que está limitada por el rango 177-204 °C (Walas 2012). Se elige como temperatura de salida 177 °C.

Para hallar a , se utiliza la Ecuación IV.43:

$$a = \frac{k-1}{k} \quad [IV.43]$$

El valor de k es característico de cada compuesto, en este caso para el CO_2 es de 1,281. Una vez conocidos todos los parámetros se halla r .

Posteriormente, se calculan las etapas de los compresores, n , por medio de la Ecuación IV.44:

$$r = \left(\frac{P_n}{P_1} \right)^{\frac{1}{n}} \quad [IV.44]$$

Se despeja n , de la Ecuación IV.44, conociendo r calculada anteriormente y las presiones de entrada y salida de ambos compresores son conocidas también.

Por último, se calcula la potencia requerida (THP) por los compresores utilizando la Ecuación IV.45, el caudal debe introducirse en ft³/min y T₁ en °F más 460 (Walas 2012).

$$THP = \left(\frac{Q_g T_1}{8130a} \right) \left(\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^a - 1 \right) \quad [IV.45]$$

Este valor obtenido de potencia (THP), es un cálculo ideal por lo que habría que aplicar la eficacia de cada compresor. Para aplicar la eficacia hay que tener en cuenta el tipo de cambiador y el número de etapas. Para elegir el tipo de compresor se utiliza la Figura IV.16:

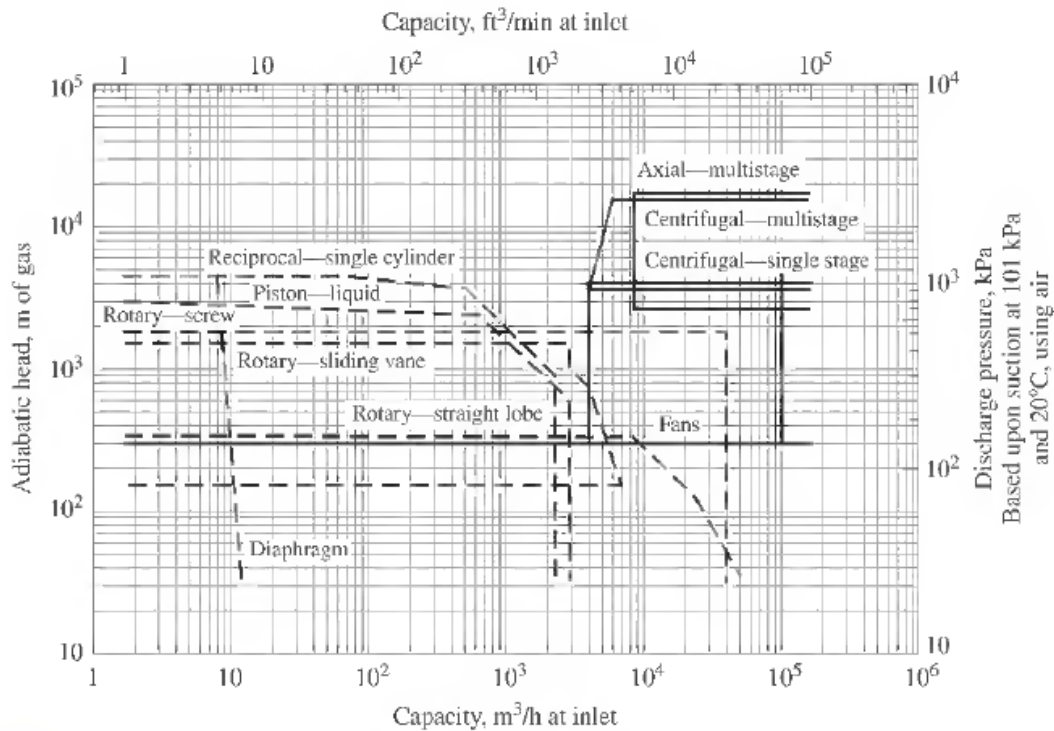


Figura IV.16. Selección del tipo de compresor

Siguiendo la Figura IV.16, se concluye que el compresor IV.1 será centrífugo de una etapa y el compresor IV.2 será un ventilador. Las eficacias de estos se obtienen de heurísticas (Walas 2012).

IV.B.5.2. Diseño de bombas

Para decidir si es necesario una bomba se utiliza el balance mecánico de la Ecuación IV.46 Si el resultado del balance es negativo se requerirá una bomba.

$$W \left(\frac{J}{kg} \right) = g \cdot \Delta z + \frac{\Delta p}{\rho} - \frac{\Delta p_{f,total}}{\rho} \quad [IV.46]$$

Donde Δz (m) es la diferencia de altura entre el punto inicial y el final, ΔP (Pa), la diferencia de presión entre ambos puntos y ΔP_f (Pa) representa las pérdidas por fricción debida a accesorios y/o a la propia tubería.

Las pérdidas por fricción se calculan con la Ecuación IV.47:

$$\Delta P_f = 8f \frac{L_{eq,total}}{D_i} \frac{\rho u^2}{2} \quad [IV.47]$$

Siendo f , el factor de fricción que depende de la rugosidad relativa del material y el número de Reynolds. La rugosidad relativa se calcula con la Ecuación IV.48 y con ello se calcula el factor de fricción con la Ecuación IV.49:

$$\varepsilon_{rel} = \frac{\varepsilon_{abs}}{D_i} \quad [IV.48]$$

$$\frac{1}{f^{1/2}} = 4 \cdot \ln \left(\frac{\varepsilon}{3,7D_i} \right) + \frac{1,256}{Re \cdot f^{1/2}} \quad [IV.49]$$

En varias ecuaciones de las descritas anteriormente, se necesita el diámetro interno óptimo para hallar los parámetros necesarios. Para hallar el diámetro interno óptimo se utilizó la Figura IV.17. Para ello es necesario conocer el número de Reynolds ya que dependiendo de este habrá que utilizar una escala u otra.

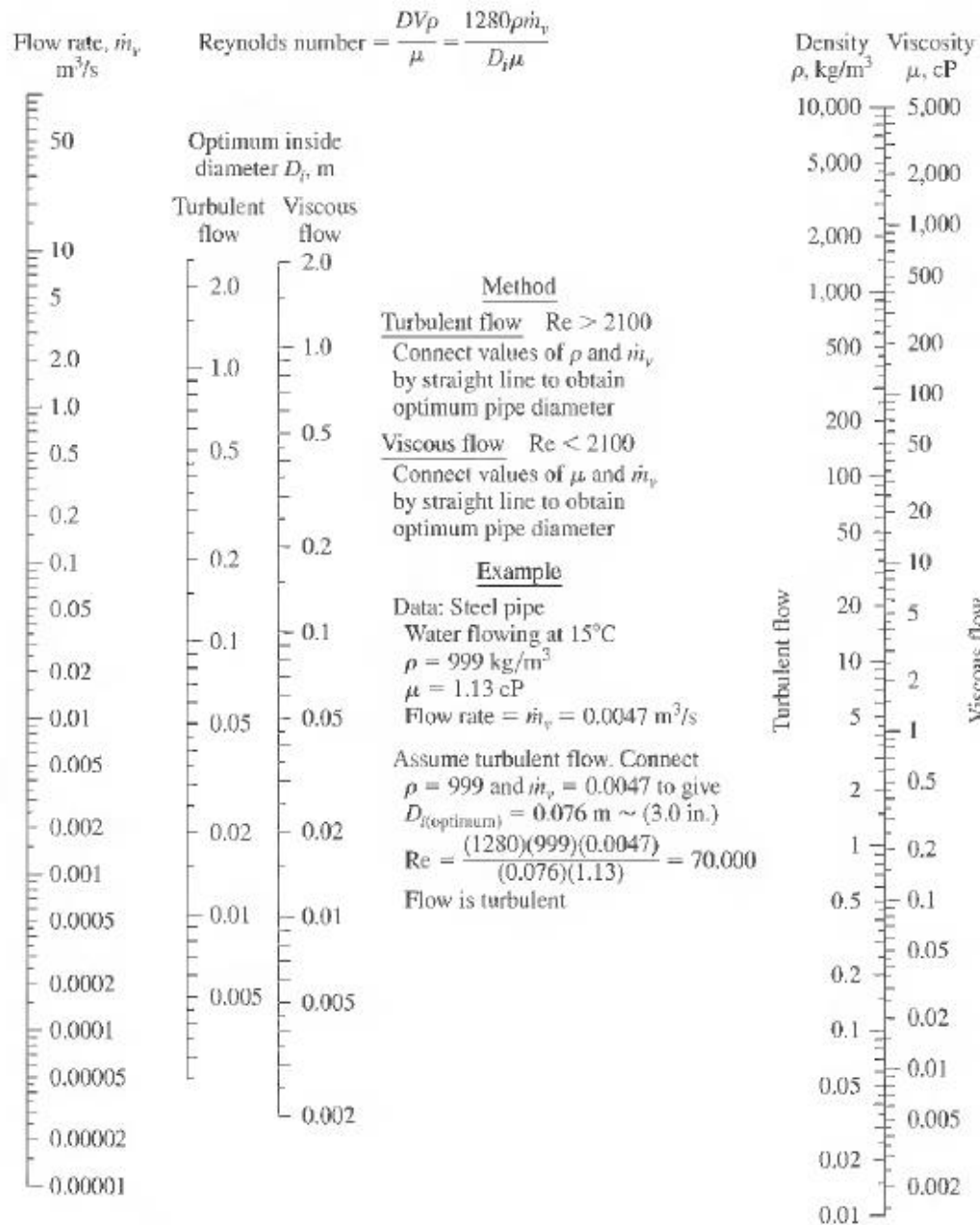


Figura IV.17. Nomograma para la estimación del diámetro óptimo interno de tubería

Una vez conocidos estos diámetros se va al catálogo (Anexo IV.3) de diámetros de tubería normalizados y se elige el más parecido al hallado. El material será de acero al carbono ya que no se manejan fluidos corrosivos.

Con la Ecuación IV.49, se calculan las pérdidas por fricción de la tubería y de los accesorios y estas se suman para aplicar el balance. Como accesorios se estiman dos codos por conducción más los accesorios que existan como válvulas o uniones...etc.

La longitud equivalente para la tubería será la longitud de la tubería y la de los accesorios, esta última se obtendrá de la Tabla.IV.17:

Tabla IV.17. Longitud equivalente para distintos accesorios (Peters, Timmerhaus y West 2003)

	L_e/D per fitting (dimensionless)
45° elbows	15
90° elbows, std. radius	32
90° elbows, medium radius	26
90° elbows, long sweep	20
90° square elbows	60
180° close-return bends	75
180° medium-radius return bends	50
Tee (used as elbow, entering run)	60
Tee (used as elbow, entering branch)	90
Couplings	Negligible
Unions	Negligible
Gate valves, open	7
Globe valves, open	300
Angle valves, open	170
Water meters, disk	400
Water meters, piston	600
Water meters, impulse wheel	300

Una vez hallado el trabajo, W , se halla la potencia con la ecuación IV.50:

$$P = \frac{w Q}{\eta} \quad [IV. 50]$$

La eficacia utilizada es la proporcionada por las heurísticas y la selección de la bomba también (Walas 2012).

Tabla IV.18. Cálculos potencia de la bomba, B-IV.1

Q (m³/h)	0,64	(L_{eq}/D) (m)	52
ρ (kg/m³)	791	L_{tubería} (m)	6
μ (cP)	5,4 10 ⁻⁴	Δz (m)	-1
D_{i, ópt} (mm)	15	ΔP (Pa)	0
D_{i, normalizado} (mm)	15	W (J/kg)	668,90
ε_{abs}	0,046	H (m)	68,30
u (m/s)	1	η	0,65
Re	21857,50	P (W)	144,20

IV.B.5.3. Diseño de tanques de almacenamiento

El cálculo del volumen de los tanques de almacenamiento se realiza utilizando la ecuación IV.4:

$$V = \frac{\pi D^2 L}{4} \quad [IV.4]$$

A partir del volumen de masa conocido por el balance de materia, sabiendo el tiempo de residencia que se ha estimado de 6 días y que según las heurísticas para un volumen menor de 500 galones debe dejarse un espacio libre del 15% y para mayor de 500 galones del 10% (Walas 2012).

Por otro lado, la longitud del líquido generalmente es igual al diámetro del tanque, por lo que la longitud total del depósito será L/0,85 o L/0,9 dependiendo del volumen de la masa (Walas 2012). Con esta consideración y el volumen de masa, se saca el diámetro del tanque.

Posteriormente para hallar el volumen total del tanque, la ecuación IV.4 queda como:

$$V = \frac{V_{masa}}{\frac{100 - \%espacio\ libre}{100}} \quad [IV.51]$$

IV.B.5. Método ASME

El método ASME se lleva a cabo para el reactor ya que es el equipo principal y además se trabaja a alta presión (10 bar).

Lo primero es definir las presión y temperatura de diseño. Para ello se recurre a heurísticas (Walas 2012) donde se define que:

$$P_{diseño} = P_{máx} 1,1 = (P_{operación} + 1,7bar)1,1 \quad [IV.52]$$

$$T_{diseño} = T_{operación} + 50^{\circ}F, \text{ para temperaturas entre } -20 \text{ y } 650^{\circ}F \quad [IV.53]$$

En el reactor de síntesis del PCL se contempla una temperatura de 25°C, es decir, 77°F, aplicando heurísticas la temperatura de diseño es de 127°F que son 52,80 °C.

Para la presión de diseño, en el reactor se trabaja con 10 bares. Aplicando heurísticas de nuevo, se obtiene una presión de diseño de 12,80 bar que son 1287 kPa.

Para el cálculo del espesor se calcula el espesor que se obtendría para el cuerpo cilíndrico y para los cabezales toro esféricos y se calcula el volumen del acero con el espesor que sea mayor.

Cuerpo cilíndrico

$$t = \frac{Pri}{2SEj - 0,2P} + Cc \quad \begin{cases} t \leq 0,356ri \\ \text{o } P \leq 0,665SEj \end{cases} \quad [IV.54]$$

$$t = ri \left(\frac{2SEj + 2P}{2SEj - P} \right)^{1/3} - ri + Cc \quad \begin{cases} t > 0,356ri \\ \text{o } P > 0,665SEj \end{cases} \quad [IV.55]$$

Conociendo la temperatura para metal de acero inoxidable tipo 316, el valor de S es de 118054,6 kPa interpolando. El valor de E_j es de 0,85 si se trata de soldadura por resistencia eléctrica. El valor r_i corresponde al radio interno del reactor que tendrá un valor de 0,67 metros. Por último, C_c es el factor de margen para la corrosión que se obtiene recurriendo a heurísticas (Walas 2012) donde, se estima que para mezclas no corrosivas tiene un valor de 0,15 inches, es decir, de 0,0038 metros.

Para elegir entre la Ecuación IV.54 o la IV.55 debe comprobarse alguna de las dos condiciones que se muestran al lado de las ecuaciones. Para ello se calcula el factor 0,665SE_j, se obtiene un valor de 66730,4 kPa, siendo este mayor que la presión de diseño, por lo que se escoge la Ecuación IV.54.

El valor obtenido para el grosor del cuerpo cilíndrico (t) es de 0,0125 metros.

Cabezales toro esféricos

$$t = \frac{0,885PLa}{SE_j - 0,1P} + C_c \quad [IV.56]$$

El valor de L_a es considerado igual a r_i. Aplicando esta ecuación, ya que se conocen los valores, se obtiene un valor del espesor (t) de 0,011 metros.

Como, 0,012 > 0,011, el espesor utilizado es el del cuerpo cilíndrico.

El volumen del cuerpo cilíndrico se calcula como sigue:

$$V_{\text{cuerpo cilíndrico}} = 2\pi rLt \quad [IV.57]$$

El volumen de los cabezales es igual a:

$$V_{\text{cabezales}} = \pi \frac{\left(OD + \frac{OD}{24} + at\right)^2 t}{4} \quad [IV.58]$$

Siendo OD, el diámetro externo, es decir la suma del diámetro interno más dos veces el espesor. El volumen de los cabezales deberá multiplicarse por 2 ya que son dos cabezales.

La suma de ambos volúmenes da un valor de $0,185 \text{ m}^3$ de acero. Aplicando la densidad del acero inoxidable Tipo 316 (7980 kg/m^3), el peso del acero es de $1478,2 \text{ kg}$. Como es un reactor vertical debe sumarse al peso un 20% de este debido a accesorios.

Con todo ello el peso final del acero es de $1773,8 \text{ kg}$.

IV.B.7. Coste de equipos del proceso

IV.B.7.1. Coste del reactor

Conociendo el volumen del reactor, de $3,86 \text{ m}^3$ y utilizando la Figura IV.18, se obtiene un coste de reactor de $80000\$$, el coste de este incluye el encamisado. Como son tres reactores, el coste total sería de $240000\$$.

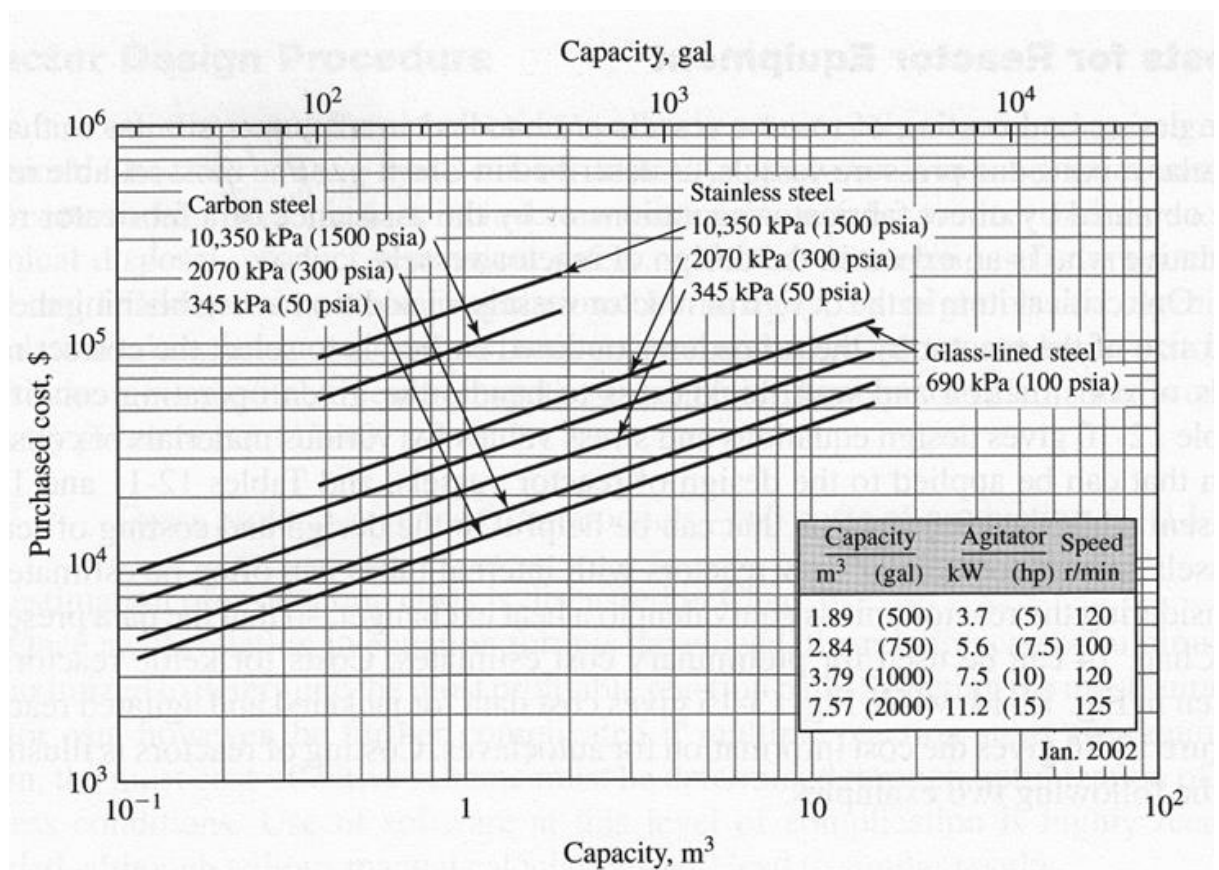


Figura IV.18. Coste de reactores agitados con encamisado (Peters, Timmerhaus y West 2003)

IV.B.7.2. Coste del separador

Para hallar el coste del separador se utiliza la Figura IV.19. Sabiendo que la altura total es de 3,1 metros, el diámetro 1,8 metros y que el material a utilizar es acero al carbono, el precio sería de 18000\$.

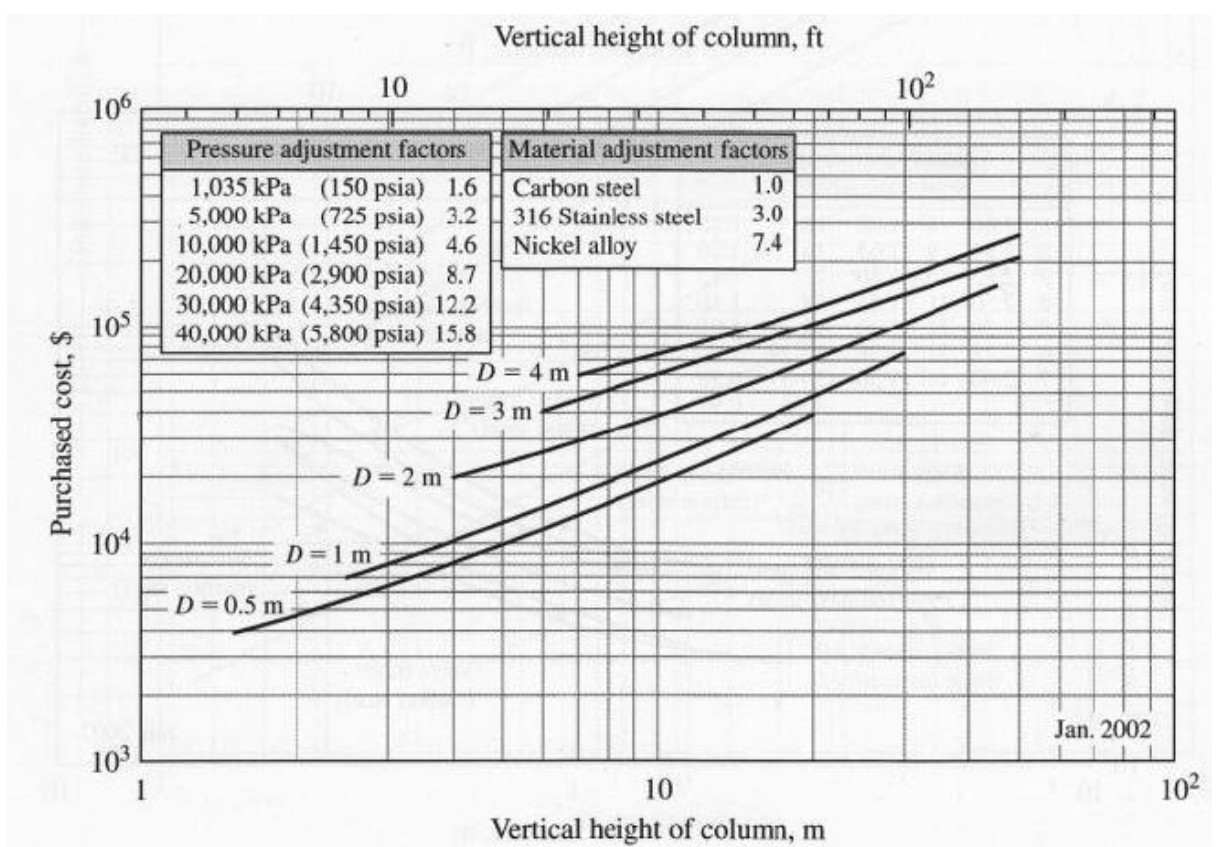


Figura IV.19. Coste de columna vertical (Peters, Timmerhaus y West 2003)

IV.B.7.3. Coste del sistema de precipitación

IV.B.7.3.1 Coste del tanque de mezcla

Para este se utiliza la figura IV.18 ya que no es un reactor, pero es un tanque con agitación. Conociendo la capacidad de este, $0,16 \text{ m}^3$ y que el material de construcción de este será acero al carbono, el coste será de 4500\$.

IV.B.7.3.2 Coste del hidrociclón

Debido a que no se encontró material de referencia para hallar el coste de un hidrociclón se recurrió a la Figura IV.20 en la que se puede hallar el coste de un ciclón y como tienen prácticamente la misma forma y funcionamiento se obtendrá el coste con esta figura. Como el caudal es demasiado pequeño, este no puede verse en la gráfica así que se supondrá el mínimo coste, utilizando como material de construcción el acero al carbono. El coste será de 1500\$.

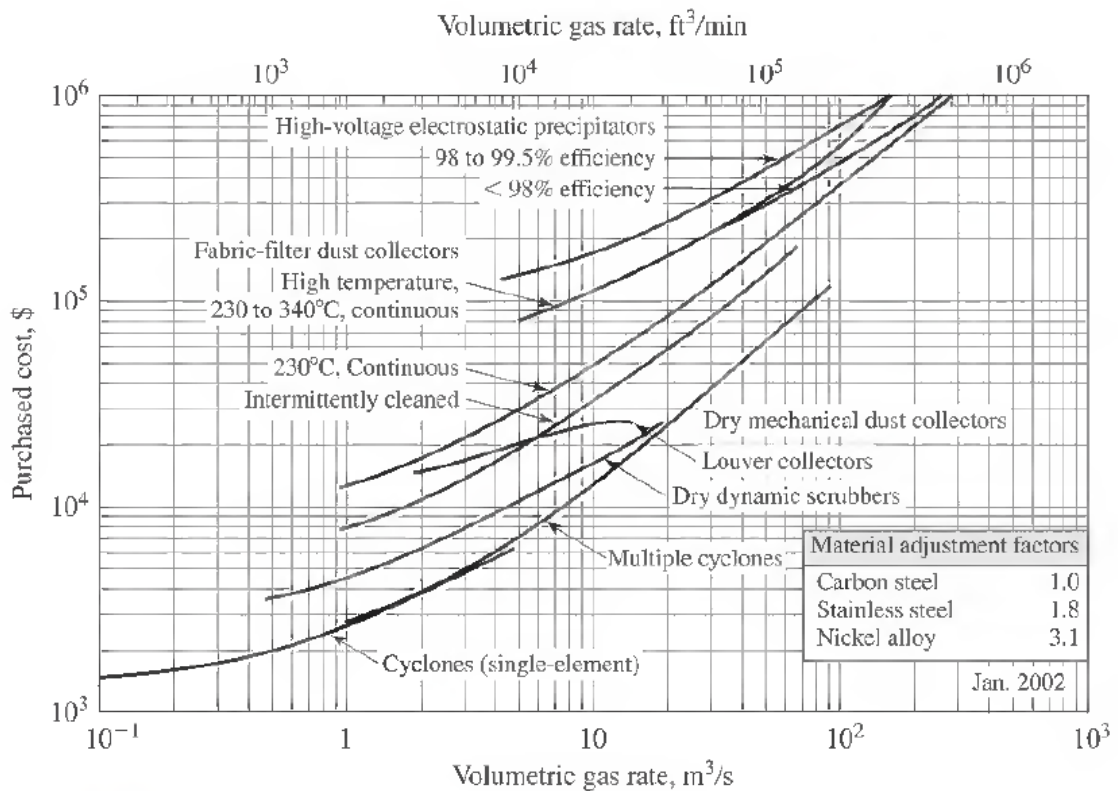


Figura IV.20. Coste de ciclones y otros equipos para la separación de sólidos (Peters, Timmerhaus y West 2003)

IV.B.7.4. Coste de los tanques de almacenamiento

Se tienen 5 tanques de almacenamiento. Para el almacenamiento del tolueno se requieren 2,15 m³, por lo que utilizando la Figura IV.21, se obtiene un coste de 10000\$, suponiendo que el material de construcción sea de acero al carbono.

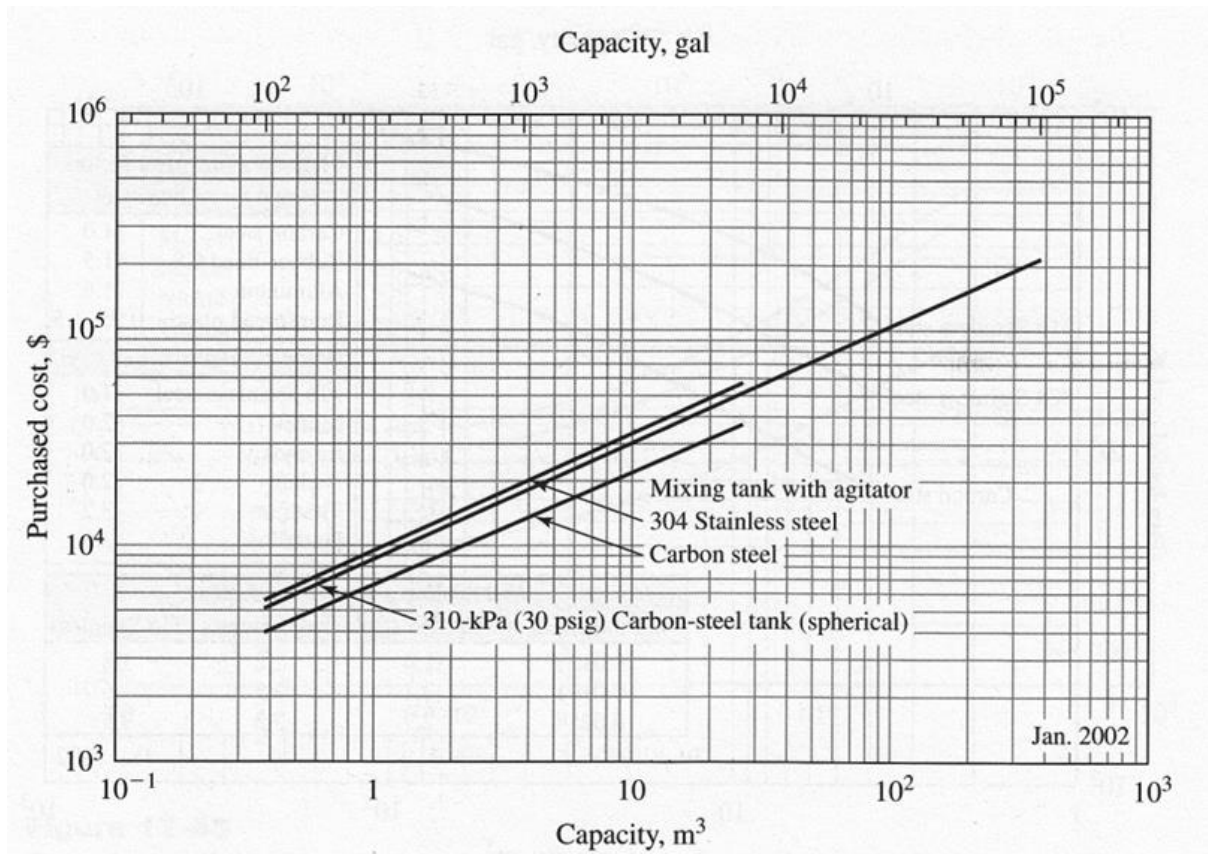


Figura IV.21. Coste de tanques de mezcla y almacenamiento (Peters, Timmerhaus y West 2003)

Respecto al metanol, el volumen de su tanque de almacenamiento es de 0,30 m³, se sigue utilizando la Figura IV.21. El coste de este tanque siendo el material de construcción el acero al carbono tiene un coste de 4000\$.

Para obtener el coste del tanque de almacenamiento del PCL se utilizará de nuevo la Figura IV.21. Eligiendo el acero al carbono como material de construcción, se obtiene un coste de 13000\$.

Por último, para el almacenamiento del CO₂, se utilizará la Figura IV.22, debido a que el volumen de estos tanques es elevado. Se obtiene un coste para cada tanque de 900000\$, al ser dos tanques el coste total ascendería a 1800000\$.

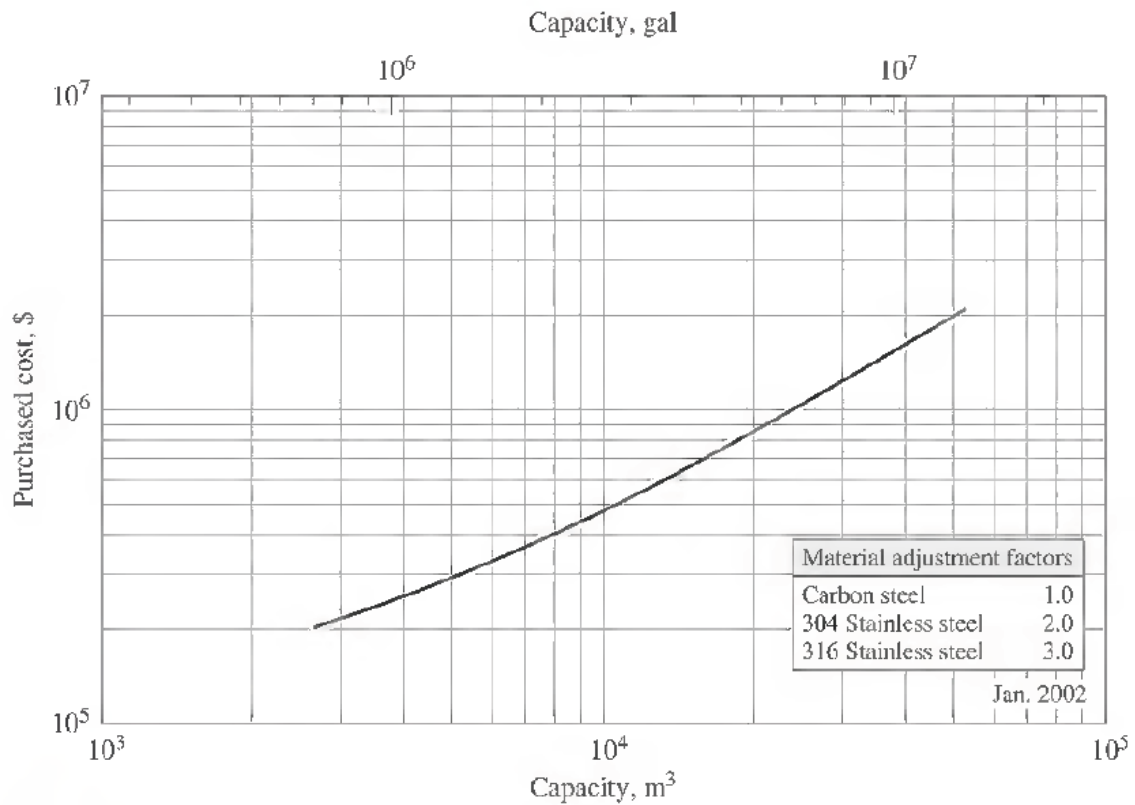


Figura IV.22. Coste de grandes depósitos (Peters, Timmerhaus y West 2003)

IV.B.7.5. Coste de la bomba

La bomba a utilizar en el proceso es una bomba rotativa, que, impulsa el metanol. El caudal de esta es de $0,00017 \text{ m}^3/\text{s}$ y el material elegido es acero fundido ya que el metanol no suele ser corrosivo a la mayoría de los metales a temperatura ambiente salvo al plomo, níquel, monel, hierro fundido y hierro con alto contenido en sílice. El coste sería de 1700\$ pero al aplicar el factor de material el coste final es de 2380\$.

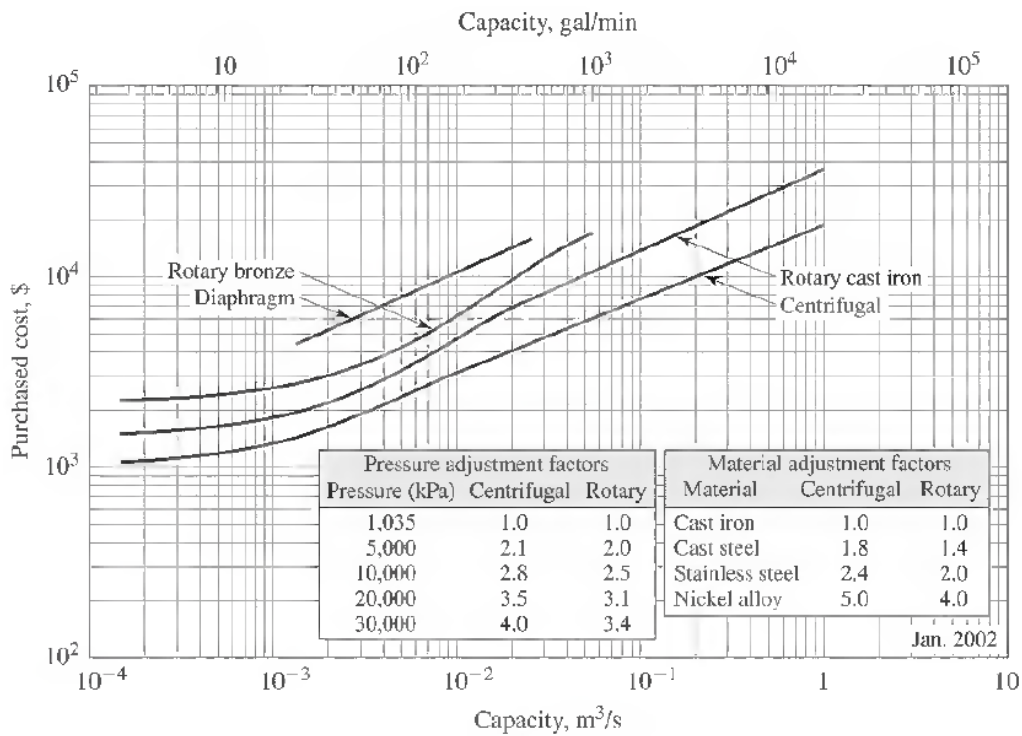


Figura IV.23. Coste de bombas de diafragma, centrífugas y rotativas (Peters, Timmerhaus y West 2003)

IV.B.7.6. Coste de las válvulas

Las válvulas necesarias en este proceso son 9 válvulas de compuerta ya que se necesitan 3 por cada reactor. Para determinar el coste de cada válvula es necesario conocer el diámetro interno de la tubería. Para ello se estima primero si el régimen es laminar o turbulento. Para la corriente de CO₂ y la corriente de tolueno y OL se determina un régimen turbulento mientras que para el efluente del reactor al generarse PCL, esta corriente tiene un flujo laminar. Con las propiedades de cada corriente y la Figura IV.17 se estiman los diámetros internos de tubería.

Para la corriente de CO₂, el diámetro interno es de 1 m, para la corriente que lleva OL y tolueno es de 0,02 m y para el efluente del reactor es de 0,15 m.

A partir de estos diámetros se recurre al catálogo de tuberías y se toma el más próximo. Estos diámetros son de 1,05 m, 0,02 m y 0,15 m respectivamente. Con estos valores se puede acudir a la Figura IV.24 y obtener el coste de cada válvula.

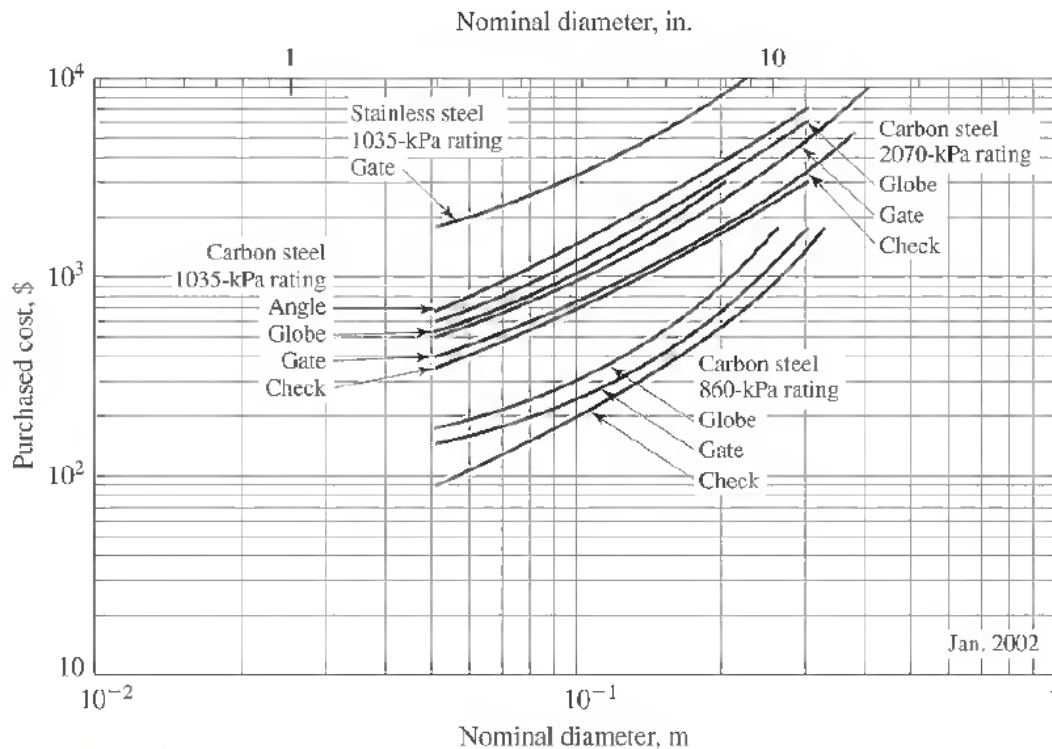


Figura IV.24. Coste de válvulas (Peters, Timmerhaus y West 2003)

Finalmente, se obtiene un coste de 2000\$, 160\$ y 700\$ respectivamente. Para la válvula de la corriente de CO₂ y para la del efluente del reactor se han estimado el coste mayor y el menor para una válvula de compuerta (gate) ya que el rango de diámetros en la gráfica es demasiado pequeño.

Como se necesitan tres válvulas de cada, el coste final sería de 5720\$.

IV.B.7.7. Coste del intercambiador de calor

Para el intercambiador seleccionado de carcasa y tubo, se utiliza la Figura IV.25 para hallar su coste. Teniendo en cuenta que posee un área de alrededor de 200 m² el precio final de este equipo sería alrededor de 25000\$, suponiendo que el material seleccionado sea acero al carbono ya que por el interior de este no circulan fluidos corrosivos.

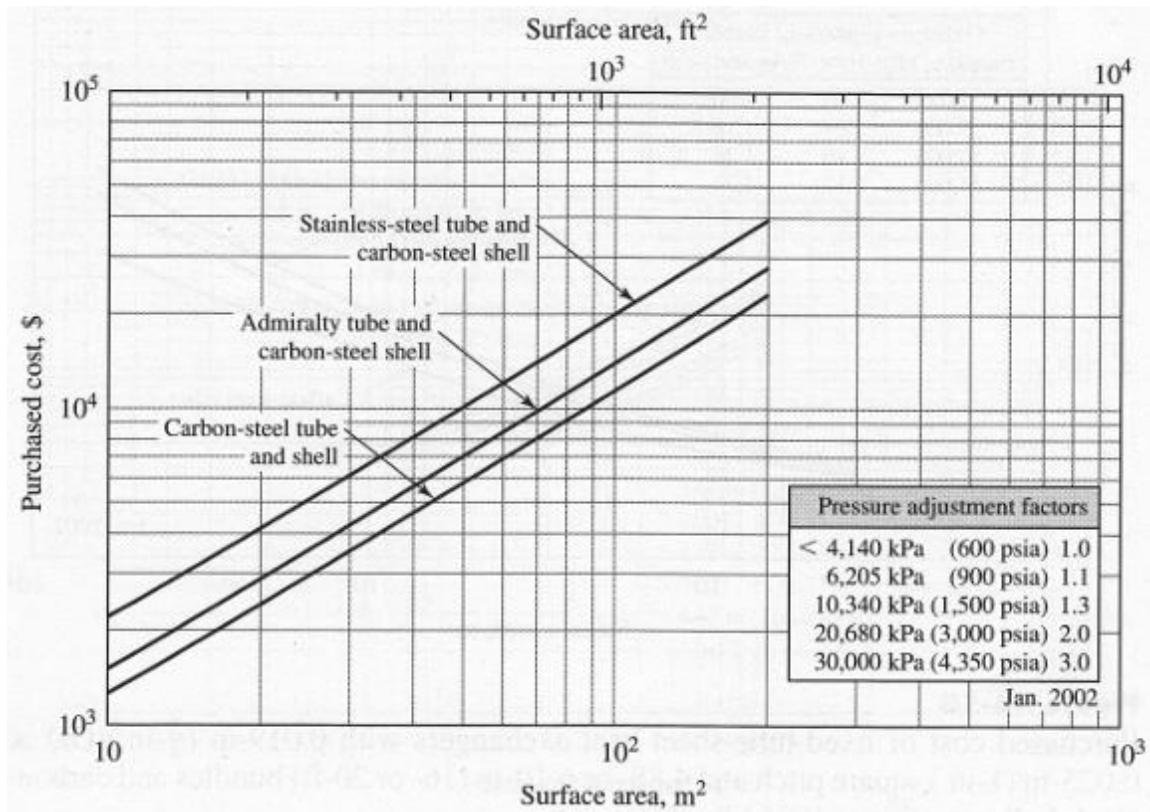


Figura IV.25. Coste de intercambiadores de calor de múltiples tubos (Peters, Timmerhaus y West 2003)

IV.B.7.8. Coste de los compresores

Teniendo en cuenta que el compresor C-IV.1 es centrífugo de etapa simple y la potencia requerida es de 2500 kW, su coste utilizando la Figura IV.26 y suponiendo que el material sea acero al carbono será de 600000\$.

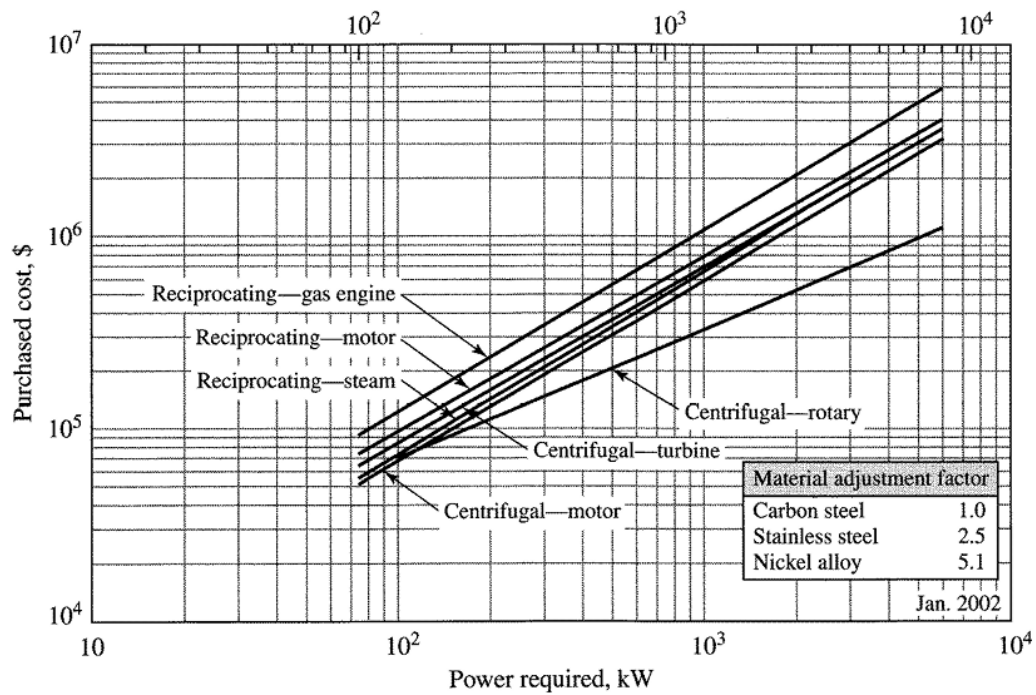


Figura IV.26. Coste de compresores (Peters, Timmerhaus y West 2003)

El otro compresor utilizado, C-IV.2 es un ventilador, y el caudal utilizado es de $7,8 \text{ m}^3/\text{s}$, por lo que su coste, suponiendo el tipo de ventilador más barato sería de 1200\$.

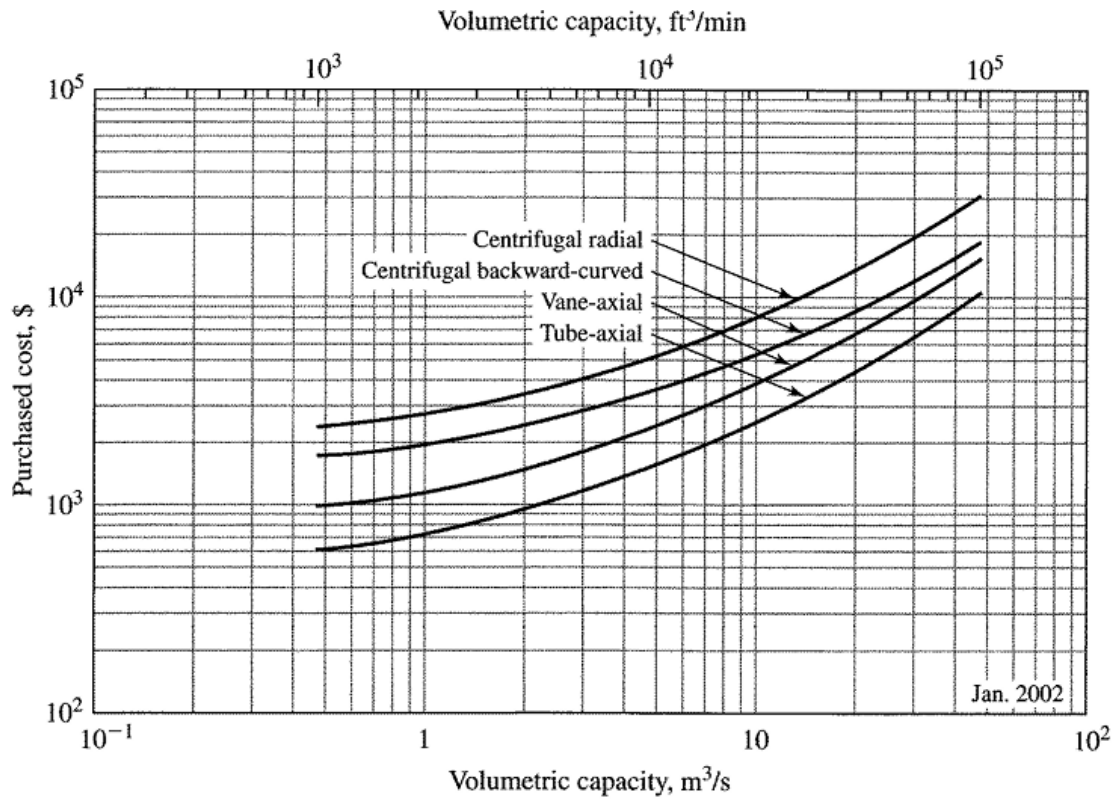


Figura IV.27. Coste de ventiladores (Peters, Timmerhaus y West 2003)

IV.C. OTROS

Tabla IV.19. Catálogo de tuberías



Philadelphia Regional Center
 2450 Wheatcheaf Lane
 Philadelphia, PA 19137
 O 215-831-0700
 F 215-533-1645
 E sales@tiogapipe.com

Houston Regional Center
 14050 Heathrow Forest Parkway,
 Suite 300, Houston, TX 77032
 O 713-433-2111
 F 281-307-0132
 E sales@tiogapipe.com

Chattanooga Regional Center
 1301 Riverfront Parkway, Suite 108
 Chattanooga, TN 37402
 O 423-896-3398
 F 423-899-0695
 E sales@tiogapipe.com

PIPE DIMENSIONS AND WEIGHTS

Available in commercial and nuclear

U.S./METRIC

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID		
		ASME		INCH	MM	LBS/ FOOT	KG/ METER	INCH	MM	
1/8 6	0.405 10.3	10 STD XS	40	105	0.049	1.24	0.19	0.28	0.307	7.82
			80	805	0.068	1.73	0.24	0.37	0.269	6.84
1/4 8	0.540 13.7	10 STD XS	40	105	0.065	1.65	0.33	0.49	0.410	10.40
			80	805	0.088	2.24	0.43	0.63	0.364	9.22
3/8 10	0.675 17.1	10 STD XS	40	105	0.065	1.65	0.42	0.63	0.545	13.80
			80	805	0.091	2.31	0.57	0.84	0.493	12.48
1/2 15	0.840 21.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.083	2.11	0.67	1.00	0.674	17.08
			80	805	0.109	2.77	0.85	1.27	0.622	15.76
3/4 20	1.050 26.7	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.113	2.87	1.13	1.69	0.824	20.96
			80	805	0.154	3.91	1.48	2.20	0.742	18.88
1 25	1.315 33.4	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.129	3.27	1.31	1.95	0.864	22.48
			80	805	0.179	4.55	1.95	2.90	0.612	15.58
1-1/4 32	1.660 42.2	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.154	3.91	1.48	2.20	0.742	18.88
			80	805	0.219	5.56	1.95	2.90	0.612	15.58
1-1/2 40	1.900 48.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.188	4.78	1.31	1.95	0.864	22.48
			80	805	0.294	7.47	1.72	2.55	0.752	19.12
2 50	2.375 60.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.209	5.31	1.41	2.09	0.977	27.86
			80	805	0.250	6.35	2.85	4.24	0.815	20.70
2-1/2 65	2.875 73.0	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.250	6.35	2.85	4.24	0.815	20.70
			80	805	0.358	9.09	3.66	5.45	0.599	15.22
3 80	3.500 88.9	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.277	7.07	1.81	2.69	1.442	36.66
			80	805	0.382	9.70	2.44	3.64	0.434	11.06
3-1/2 90	4.000 101.6	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.308	7.82	2.44	3.64	0.434	11.06
			80	805	0.438	11.13	3.24	4.95	0.710	18.00
4 100	4.500 114.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.478	12.15	3.77	5.61	1.160	29.50
			80	805	0.600	15.24	4.81	7.07	0.896	22.80
4-1/2 115	5.000 127.0	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.665	1.65	1.11	1.65	1.530	38.90
			80	805	0.883	2.21	1.81	2.69	1.442	36.66
5 125	5.563 141.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.883	2.21	1.81	2.69	1.442	36.66
			80	805	1.134	2.87	1.31	1.95	0.864	22.48
6 150	6.625 168.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	1.134	2.87	1.31	1.95	0.864	22.48
			80	805	1.375	3.53	1.62	2.38	0.546	13.84
7 175	7.625 193.7	5 10 STD XS 160 XX	55	105	1.375	3.53	1.62	2.38	0.546	13.84
			80	805	1.625	4.19	2.17	3.24	0.957	24.30
8 200	8.625 219.1	5 10 STD XS 160 XX	55	105	1.625	4.19	2.17	3.24	0.957	24.30
			80	805	1.875	4.85	2.71	3.99	1.380	35.08
9 225	9.625 244.5	5 10 STD XS 160 XX	55	105	1.875	4.85	2.71	3.99	1.380	35.08
			80	805	2.125	5.51	3.25	4.74	1.803	45.86
10 250	10.750 273.0	5 10 STD XS 160 XX	55	105	2.125	5.51	3.25	4.74	1.803	45.86
			80	805	2.375	6.17	3.79	5.49	2.226	56.64
11 275	11.750 298.5	5 10 STD XS 160 XX	55	105	2.375	6.17	3.79	5.49	2.226	56.64
			80	805	2.625	6.83	4.33	6.24	2.649	67.42
12 300	12.750 323.8	5 10 STD XS 160 XX	55	105	2.625	6.83	4.33	6.24	2.649	67.42
			80	805	2.875	7.49	4.87	7.00	3.072	78.20
14 350	14.000 355.6	5 10 STD XS 160 XX	55	105	2.875	7.49	4.87	7.00	3.072	78.20
			80	805	3.125	8.15	5.41	7.75	3.495	88.98

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID		
		ASME		INCH	MM	LBS/ FOOT	KG/ METER	INCH	MM	
5 125	5.563 141.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	0.36	0.54	0.307	7.82
			80	805	0.134	3.40	0.47	0.70	0.269	6.84
6 150	6.625 168.3	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	0.36	0.54	0.307	7.82
			80	805	0.134	3.40	0.47	0.70	0.269	6.84
7 175	7.625 193.7	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	0.36	0.54	0.307	7.82
			80	805	0.134	3.40	0.47	0.70	0.269	6.84
8 200	8.625 219.1	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	0.36	0.54	0.307	7.82
			80	805	0.134	3.40	0.47	0.70	0.269	6.84
9 225	9.625 244.5	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	0.36	0.54	0.307	7.82
			80	805	0.134	3.40	0.47	0.70	0.269	6.84
10 250	10.750 273.0	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	0.36	0.54	0.307	7.82
			80	805	0.134	3.40	0.47	0.70	0.269	6.84
11 275	11.750 298.5	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	0.36	0.54	0.307	7.82
			80	805	0.134	3.40	0.47	0.70	0.269	6.84
12 300	12.750 323.8	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	0.36	0.54	0.307	7.82
			80	805	0.134	3.40	0.47	0.70	0.269	6.84
14 350	14.000 355.6	5 10 STD XS 160 XX	55	105	0.109	2.77	0.36	0.54	0.307	7.82
			80	805	0.134	3.40	0.47	0.70	0.269	6.84

Tabla IV.20. Catálogo de tuberías, continuación

NOMINAL PIPE SIZE	OD	SCHEDULE DESIGNATIONS		WALL THICKNESS		WEIGHT		ID		
		INCH	MM	INCH	MM	LB/ FOOT	KG/ METER	INCH	MM	
16 400	16.000 406.4	10	105	0.188	4.78	31.78	47.34	15.624	396.84	
				0.250	6.35	42.09	62.65	15.500	393.70	
		20	405	0.312	7.92	52.32	77.83	15.376	390.56	
				0.375	9.53	62.64	93.27	15.250	387.34	
		XS	40	805	0.500	12.70	82.85	123.31	15.000	381.00
					0.656	16.66	107.60	160.13	14.688	373.08
		80	0.844	21.44	136.74	203.54	14.312	363.52		
		100	1.031	26.19	164.98	245.57	13.938	354.02		
		120	1.219	30.96	192.61	286.66	13.562	344.48		
		140	1.408	35.73	223.85	333.21	13.124	333.34		
		160	1.594	40.49	245.48	365.38	12.812	325.42		
		18 450	18.000 457	10	105	0.188	4.78	35.80	53.31	17.624
0.250	6.35					47.44	70.57	17.500	444.30	
20	405			0.312	7.92	58.99	87.71	17.376	441.16	
				0.375	9.53	70.65	106.17	17.250	437.94	
STD	405			0.438	11.13	82.23	122.38	17.124	434.74	
				0.500	12.70	93.54	139.16	17.000	431.60	
XS	805			0.562	14.27	104.76	155.81	16.876	428.46	
				0.750	19.05	138.30	205.75	16.500	418.90	
80	0.938			23.83	171.08	254.57	16.124	409.34		
100	1.156			29.36	208.15	309.64	15.688	398.28		
120	1.375			34.93	244.37	363.58	15.250	387.14		
140	1.562			39.67	274.48	408.28	14.876	377.66		
160	1.781	45.24	308.79	459.39	14.438	366.52				
20 500	20.000 508	10	105	0.218	5.54	46.10	68.61	19.564	496.92	
				0.250	6.35	52.78	78.56	19.500	495.30	
		STD	405	0.375	9.53	78.67	117.15	19.250	488.94	
				0.500	12.70	104.23	155.13	19.000	482.60	
		XS	805	0.594	15.09	123.23	183.43	18.812	477.82	
				0.812	20.62	165.56	247.84	18.376	466.76	
		80	1.031	26.19	209.06	311.19	17.938	455.62		
		100	1.281	32.54	256.34	381.55	17.438	442.92		
		120	1.500	38.10	296.65	441.52	17.000	431.80		
		140	1.750	44.45	341.41	508.15	16.500	419.10		
		160	1.969	50.01	379.53	564.85	16.062	407.98		
		22 550	22.000 559	10	105	0.218	5.54	50.76	75.55	21.564
0.250	6.35					58.13	86.55	21.500	546.30	
STD	405			0.375	9.53	86.69	129.14	21.250	539.94	
				0.500	12.70	114.92	171.10	21.000	533.60	
XS	805			0.875	22.23	197.60	294.27	20.250	514.54	
				1.125	28.58	251.05	373.85	19.750	501.84	
100	1.375			34.93	303.16	451.45	19.250	489.14		
120	1.625			41.28	353.94	527.05	18.750	476.44		
140	1.875			47.63	403.38	600.67	18.250	463.74		
160	2.125			53.98	451.49	672.30	17.750	451.04		

PIPING • TUBING • FITTINGS FLANGES • RELATED PRODUCTS	
Type	Seamless & Welded
Commodity	Chrome • Stainless • Carbon • Low Temperature
Specifications	A/SA335 • A/SA312 • A/SA213 • A/SA106 • A/SA53/API5L • A/SA333
Sizes (O.D.)	1/8" (3.175mm) - 60" (1524mm) (Larger ODs Available)
Grades	Chrome: P1 • P5 • P9 • P11 • P22 • P91 Stainless: 304 • 304H • 304L • 316 • 316H • 316L • 316LN • 321 • 321H • 347 • 347H • 310 • 310s • 309 • Alloy 20 Low Temp: Grade 1/6 • Grade 3 Carbon: Grade B • Grade C • Galvanized

MILITARY SPEC PIPE & TUBING	
Program	MIL-I-45208A Quality Program • Approved Level 1 Supplier
Contact Tioga for	U.S. Navy Specifications • Navy Nuclear • MIC Level 1 • Ultrasonic Testing
Fittings & Flanges	All Fittings & Flanges to Match the Pipe

NUCLEAR MATERIALS	
Program	ASME Section III - ASME QSC 467
Specifications	10CFR50 Appendix B • N45.2 • NQA-1 • U.S. Navy Nuclear Specifications
Products	Pipe • Tubing • Fittings • Flanges • Structural • Fasteners • Forgings • Castings • Weld Rod • Plate
Grades	Carbon • Stainless • Chrome Moly • Nickel Alloys • Duplex • 6 Moly Alloys • Low Temperature • Special Metals • Copper • Titanium

SPECIALTY ALLOYS	
Type	Seamless & Welded
Commodity	Nickel • Duplex & Titanium
Specifications & Grades	Alloy 800 • Alloy 825 • Alloy 600 • Alloy 625 • Alloy 400 • 6% Moly Grades • Duplex A790 UNS 31803 • 316LN
Sizes (O.D.)	1/8" (3.175mm) - 8" (203.2mm)
Wall Dimensions	0.035" (889mm) - 0.875" (22.23mm)

TIOGA SPECIALTIES	
• Project Management	• Dedicated Project Solution Teams
• 24/7 Emergency Service	• Vendor Managed Inventory Programs
• Just-In-Time Programs	• Mobile On-Site Inventory Programs
• Inventory in Stock	• Quick Response Programs
• All Schedule Walls	• Low Total Cost Solutions
• Special Heavy Walls to 4" (101.6mm)	• International Export & Packaging
• Header Pipe to 4" Wall (101.6mm)	• EN PED 97/23/EC
• Special Intermediate Walls	• ISO 9001-2008
• Average & Minimum Walls	• MIC Level 1 Supplier
• Saw Cut up to 40" (1016mm)	• In-House Testing
• Cutting: Square & Miter	• Destructive Examination
• Custom Lengths and OD's	• Non-Destructive Examination
• End Preps-Variety	• In-House Hydrostatic Testing
• Hard to Find Metals & Sizes	• Full EDI Capabilities
• Se Habla Español	• Customized e-business Solutions
• Exceptional Mill/Sourcing Relations	• Emergency Forged and Buttweld Fittings

Note: Actual dimensions can vary from the figures based on specifications/manufacturing tolerances. The Data for weight is based on the following calculation for wrought steel pipe: LB/foot = (Outside diameter [in.] - Wall Thickness [in.]) x (Wall Thickness [in.]) x (10.69). KG/Meter = (Outside diameter [mm] - Wall Thickness [mm]) x (Wall Thickness [mm]) x (0.0246615)

Equal Opportunity Employer © Tioga Pipe, Inc. 12/2013

When it has to be right.™
Call the center of your choice for our 24-hour emergency service
tiogapipe.com



TABLE 4-15a TYPICAL OVERALL HEAT TRANSFER COEFFICIENTS U FOR VARIOUS TYPES OF SERVICE (J/m^2s-K)
Shell and Tube Heat Exchangers^a (gases and single-phase liquids on the cold side)

Hot Side	Cold Side									
	Gases (single-phase)					Liquids (single-phase)				
	Air, N ₂ , etc. ^b (P [bara])	Ammonia ^b (P [bara])	Flue gases (1 atm)	H ₂ -containing gas mixtures ^b (P [bara])	Hydrocarbon Gases ^b (P [bara])	Alcohols (light)	Asphalt	Chlorinated Hydro- carbons	Caustic Soda (10-30% solutions)	Ethanol amine (MEA or DEA) (10 to 25% solutions)
Gases (single-phase)										
Air, N ₂ , etc. (1 atm)	40P ^{0.5}	60P ^{0.5}	20-35	60P ^{0.5} x2.5 ^x	90P ^{0.5}	90-120	20-40	80-110	90-120	90-120
Air, N ₂ , etc. (10 - 20 barg)	90P ^{0.5}	130P ^{0.5}	30-70	120P ^{0.5} x2.5 ^s	200P ^{0.5}	300-400	80-120	250-350	300-400	350-450
Ammonia (1 atm)	50P ^{0.5}	70P ^{0.5}	25-50	70P ^{0.5} x2.5 ^x	100P ^{0.5}	100-130	30-40	90-120	100-130	110-140
Flue gases (1 atm)	25P ^{0.5}	40P ^{0.5}	15-30	25P ^{0.5} x2.5 ^x	60P ^{0.5}	70-110	20-30	60-100	70-110	80-110
H ₂ -containing gas mixtures (1 atm) ^b	40P ^{0.5} x2.5 ^x	60P ^{0.5} x2.5 ^x	30x2.5 ^x	100P ^{0.5} x2.5 ^x	90P ^{0.5} x2.5 ^x	100x2.5 ^x	30x2.5 ^x	100x2.5 ^x	100x2.5 ^x	110x2.5 ^x
Hydrocarbon Gases (10-20 barg)	80P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-90	120P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	120-150	40-90	120-150	120-180	130-160
Liquids (single-phase)										
Alcohols (light)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	140-180	450-500	500-600	600-700
Asphalt	50P ^{0.5}	70P ^{0.5}	40-60	50P ^{0.5} x2.5 ^x	100P ^{0.5}	50-80	20-40	40-70	50-80	60-90
Caustic Soda (10-30% solutions)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-700	160-200	450-650	500-700	600-800
Chlorinated Hydrocarbons	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	140-170	450-550	500-600	600-700
Ethanol amine (MEA or DEA) (10 to 25% solutions)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	550-650	160-200	500-600	550-650	700-800
Fuel Oil (heavy)	60P ^{0.5}	90P ^{0.5}	50-70	60P ^{0.5} x2.5 ^x	130P ^{0.5}	80-120	60-80	80-120	80-160	90-170
Fuel Oil (light)	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	160P ^{0.5}	450-550	80-100	400-500	450-550	550-650
Gasoline	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	70-100	90P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	130-160	450-550	500-600	600-700
Heat-Transfer Oil	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	160P ^{0.5}	350-450	120-140	300-400	350-450	500-600
Jet Fuels or Kerosene	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	70-100	80P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	450-550	100-150	400-500	450-550	550-650
Organics (low-viscosity)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	450-550	100-150	400-500	450-550	550-650
Organics (high-viscosity)	60P ^{0.5}	90P ^{0.5}	50-70	60P ^{0.5} x2.5 ^x	130P ^{0.5}	100-150	60-150	80-120	100-150	110-160
Trichloroethylene	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} x2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	100-140	400-500	500-600	600-700
Water and Brines	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	70-110	90P ^{0.5} x2.5 ^x	200P ^{0.5}	600-700	100-160	550-650	600-700	800-900
Condensing Vapors										
Alcohols (light)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} x2.5 ^x	220P ^{0.5}	700-800	180-200	650-750	700-800	800-900
Gasoline	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} x2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	190-210	550-650	600-700	700-800
Heat-Transfer Oil	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	100P ^{0.5} x2.5 ^x	170P ^{0.5}	600-700	180-200	550-650	600-700	700-800
Hydrocarbons (heavy)	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	50-80	90P ^{0.5} x2.5 ^x	130P ^{0.5}	500-600	140-160	450-550	500-600	600-700
Hydrocarbons (light)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} x2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	130-180	550-650	600-700	700-800
Hydrocarbons (light) with inert gas	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-80	70P ^{0.5} x2.5 ^x	120P ^{0.5}	250-600	80-110	200-500	200-600	300-700
Jet Fuels or Kerosene	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	90P ^{0.5} x2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	190-210	550-650	600-700	700-800
Organic Solvents	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	90P ^{0.5} x2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-800	200-220	500-700	600-800	700-800
Organic Solvents with Inert Gas	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-80	60P ^{0.5} x2.5 ^x	120P ^{0.5}	200-600	100-200	150-500	200-600	300-700
Water (steam)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	110P ^{0.5} x2.5 ^x	210P ^{0.5}	800-1000	220-260	700-900	800-1000	900-1100

Figura. IV.28. Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas (Ulrich y Vasudevan, 2004).

TABLE 4-15a TYPICAL OVERALL HEAT TRANSFER COEFFICIENTS U FOR VARIOUS TYPES OF SERVICE ($J/m^2 \cdot s \cdot K$)
Shell and Tube Heat Exchangers^a (gases and single-phase liquids on the cold side)

Hot Side	Cold Side									
	Gases (single-phase)					Liquids (single-phase)				
	Air, N ₂ , etc. ^b (P [bara])	Ammonia ^b (P [bara])	Flue gases (1 atm)	H ₂ -containing gas mixtures ^b (P [bara])	Hydrocarbon Gases ^b (P [bara])	Alcohols (light)	Asphalt	Chlorinated Hydro- carbons	Caustic Soda (10-30% solutions)	Ethanol amine (MEA or DEA) (10 to 25% solutions)
Gases (single-phase)										
Air, N ₂ , etc. (1 atm)	40P ^{0.5}	60P ^{0.5}	20-35	60P ^{0.5} × 2.5 ^x	90P ^{0.5}	90-120	20-40	80-110	90-120	90-120
Air, N ₂ , etc. (10 - 20 barg)	90P ^{0.5}	130P ^{0.5}	30-70	120P ^{0.5} × 2.5 ^x	200P ^{0.5}	300-400	80-120	250-350	300-400	350-450
Ammonia (1 atm)	50P ^{0.5}	70P ^{0.5}	25-50	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	100P ^{0.5}	100-130	30-40	90-120	100-130	110-140
Flue gases (1 atm)	25P ^{0.5}	40P ^{0.5}	15-30	25P ^{0.5} × 2.5 ^x	60P ^{0.5}	70-110	20-30	60-100	70-110	80-110
H ₂ -containing gas mixtures (1 atm) ^b	40P ^{0.5} × 2.5 ^x	60P ^{0.5} × 2.5 ^x	30 × 2.5 ^x	100P ^{0.5} × 2.5 ^x	90P ^{0.5} × 2.5 ^x	100 × 2.5 ^x	30 × 2.5 ^x	100 × 2.5 ^x	100 × 2.5 ^x	110 × 2.5 ^x
Hydrocarbon Gases (10-20 barg)	80P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-90	120P ^{0.5} × 2.5 ^x	180P ^{0.5}	120-150	40-90	120-150	120-180	130-160
Liquids (single-phase)										
Alcohols (light)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	140-180	450-500	500-600	600-700
Asphalt	50P ^{0.5}	70P ^{0.5}	40-60	50P ^{0.5} × 2.5 ^x	100P ^{0.5}	50-80	20-40	40-70	50-80	60-90
Caustic Soda (10-30% solutions)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-700	160-200	450-650	500-700	600-800
Chlorinated Hydrocarbons	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	140-170	450-550	500-600	600-700
Ethanol amine (MEA or DEA) (10 to 25% solutions)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	180P ^{0.5}	550-650	160-200	500-600	550-650	700-800
Fuel Oil (heavy)	60P ^{0.5}	90P ^{0.5}	50-70	60P ^{0.5} × 2.5 ^x	130P ^{0.5}	80-120	60-80	80-120	80-160	90-170
Fuel Oil (light)	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	160P ^{0.5}	450-550	80-100	400-500	450-550	550-650
Gasoline	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	70-100	90P ^{0.5} × 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	130-160	450-550	500-600	600-700
Heat-Transfer Oil	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	160P ^{0.5}	350-450	120-140	300-400	350-450	500-600
Jet Fuels or Kerosene	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	70-100	80P ^{0.5} × 2.5 ^x	180P ^{0.5}	450-550	100-150	400-500	450-550	550-650
Organics (low-viscosity)	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	180P ^{0.5}	450-550	100-150	400-500	450-550	550-650
Organics (high-viscosity)	60P ^{0.5}	90P ^{0.5}	50-70	60P ^{0.5} × 2.5 ^x	130P ^{0.5}	100-150	60-150	80-120	100-150	110-160
Trichloroethylene	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	180P ^{0.5}	500-600	100-140	400-500	500-600	600-700
Water and Brines	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	70-110	90P ^{0.5} × 2.5 ^x	200P ^{0.5}	600-700	100-160	550-650	600-700	800-900
Condensing Vapors										
Alcohols (light)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} × 2.5 ^x	220P ^{0.5}	700-800	180-200	650-750	700-800	800-900
Gasoline	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} × 2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	190-210	550-650	600-700	700-800
Heat-Transfer Oil	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	60-90	100P ^{0.5} × 2.5 ^x	170P ^{0.5}	600-700	180-200	550-650	600-700	700-800
Hydrocarbons (heavy)	75P ^{0.5}	110P ^{0.5}	50-80	90P ^{0.5} × 2.5 ^x	130P ^{0.5}	500-600	140-160	450-550	500-600	600-700
Hydrocarbons (light)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	100P ^{0.5} × 2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	130-180	550-650	600-700	700-800
Hydrocarbons (light) with inert gas	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-80	70P ^{0.5} × 2.5 ^x	120P ^{0.5}	250-600	80-110	200-500	200-600	300-700
Jet Fuels or Kerosene	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	90P ^{0.5} × 2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-700	190-210	550-650	600-700	700-800
Organic Solvents	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	90P ^{0.5} × 2.5 ^x	190P ^{0.5}	600-800	200-220	500-700	600-800	700-800
Organic Solvents with Inert Gas	85P ^{0.5}	120P ^{0.5}	50-80	60P ^{0.5} × 2.5 ^x	120P ^{0.5}	200-600	100-200	150-500	200-600	300-700
Water (steam)	100P ^{0.5}	150P ^{0.5}	80-100	110P ^{0.5} × 2.5 ^x	210P ^{0.5}	800-1000	220-260	700-900	800-1000	900-1100

Figura. IV.29. Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas (Ulrich y Vasudevan, 2004). Continuación.

Boiling Liquids									
Chlorinated Hydrocarbons	Chlorine	Ethanol amine (MEA or DEA)	Gasoline	Jet Fuels or Kerosene	Organics		Propane, Butane, etc.	Trichloroethylene	Water and Brines
					Low-viscosity	High-viscosity			
90-120	100-130	100-130	100-130	90-120	80-120	60-80	100-130	90-120	100-130
300-400	350-450	350-450	350-450	300-400	350-400	150-200	350-450	300-400	450-600
100-130	110-140	110-140	110-140	100-130	100-130	90-120	110-140	100-130	110-150
70-110	80-120	80-120	80-120	70-110	70-110	50-70	80-120	70-110	90-120
100x2.5 ^x	110x2.5 ^x	110x2.5 ^x	110x2.5 ^x	100x2.5 ^x	100x2.5 ^x	70x2.5 ^x	110x2.5 ^x	100x2.5 ^x	120x2.5 ^x
120-150	130-160	130-160	130-160	120-150	120-150	100-130	130-160	120-150	140-170
500-600	550-650	550-650	550-650	500-600	500-600	150-200	550-650	500-600	650-750
60-100	70-110	70-110	70-110	60-100	60-100	50-70	70-110	60-100	70-110
500-700	550-750	550-750	550-750	500-700	500-700	200-240	550-750	500-700	600-800
500-600	600-700	600-700	600-700	570-850	500-600	150-200	600-700	500-600	650-750
600-900	700-1000	790-1140	700-1000	600-900	600-900	200-240	700-1000	600-900	800-1100
100-160	120-180	130-190	120-180	100-160	100-160	70-90	120-180	100-160	140-200
400-500	450-500	450-500	450-500	400-500	400-500	90-120	450-500	400-500	450-550
450-550	500-550	500-550	500-550	450-650	450-550	140-170	500-550	450-550	500-600
250-350	350-450	350-450	350-450	250-350	250-350	120-150	350-450	250-350	400-500
350-400	400-450	400-450	400-450	350-400	350-400	130-160	400-450	350-400	400-500
350-550	400-550	400-550	400-550	350-550	350-450	140-170	400-550	350-550	400-600
120-180	130-190	130-190	130-190	120-180	110-170	60-150	130-190	120-180	140-200
400-500	650-750	650-750	650-750	350-450	550-650	140-170	650-750	400-500	700-800
850-950	900-1000	900-1100	900-1000	700-800	650-750	200-300	900-1000	850-950	1000-1200
750-850	800-900	800-900	800-900	750-850	700-750	300-350	800-900	750-850	900-1200
600-700	650-750	650-750	650-750	600-700	550-600	300-350	650-750	600-700	700-800
550-650	600-650	600-650	600-650	550-650	500-550	250-300	600-650	550-650	650-700
450-500	500-550	500-550	500-550	450-500	400-450	200-250	500-550	450-500	550-600
600-700	650-750	650-750	650-750	600-700	500-550	300-350	650-750	600-700	750-800
200-600	250-650	250-650	250-650	200-600	150-500	100-300	250-650	200-600	300-700
600-700	650-750	650-750	650-750	600-700	550-650	250-300	650-750	600-700	750-800
600-800	650-850	650-850	650-850	600-800	550-750	300-350	650-850	600-800	700-900
200-600	350-650	350-650	350-650	200-600	200-550	100-300	350-650	200-600	300-700
800-1000	1200-1400	1200-1400	1200-1400	800-1000	800-840	300-350	1200-1400	800-1000	1300-1500

Figura. IV.30. Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes sistemas (Ulrich y Vasudevan, 2004). Continuación

Disposición de los tubos en los cambiadores de coraza y tubos.

Arreglo triangular.

<i>Diámetro interno de la coraza en pulgadas</i>	Tubos de 1 pulgada de diámetro exterior en arreglo triangular con distancia entre ejes de 1 1/4 de pulgada					<i>Diámetro interno de la coraza en pulgadas</i>	Tubos de 1 1/4 de pulgada de diámetro exterior en arreglo triangular con distancia entre ejes de 1 9/16 de pulgada				
	"Tramos de tubos"						"Tramos de tubos"				
	<i>1-Paso</i>	<i>2-Pasos</i>	<i>4-Pasos</i>	<i>6-Pasos</i>	<i>8-Pasos</i>		<i>1-Paso</i>	<i>2-Pasos</i>	<i>4-Pasos</i>	<i>6-Pasos</i>	<i>8-Pasos</i>
8	21	16	16	14							
10	32	32	26	24		10					
12	55	52	48	46	44	12	32	30	26	22	20
13	68	66	58	54	50	13 1/4	38	36	32	28	26
15	91	86	80	74	72	15 1/4	54	51	45	42	38
17	131	118	106	104	94	17 1/4	69	66	62	58	54
19	163	152	140	136	128	19 1/4	95	91	86	78	69
21	199	188	170	164	160	21 1/4	117	112	105	101	95
23	241	232	212	212	202	23 1/4	140	136	130	123	117
25	294	282	256	252	242	25	170	164	155	156	140
27	349	334	302	296	286	27	202	196	185	179	170
29	397	376	338	334	316	29	235	228	217	212	202
31	472	454	430	424	400	31	275	270	255	245	235
33	538	522	486	470	454	33	315	305	297	288	275
35	608	592	562	546	532	35	357	348	335	327	315
37	674	664	632	614	598	37	407	390	380	374	357
39	766	736	700	688	672	39	449	436	425	419	407

Figura. IV.31. Tablas TEMA para la determinación del número de tubos real del intercambiador de calor.

Tabla IV.21. Coste de adquisición de los equipos (Towler y Sinnott 2008)

Equipment	Units for Size, S	S_{Lower}	S_{Upper}	a	b	n	Note
<i>Agitators & mixers</i>							
Propeller	driver power, kW	5.0	75.0	4,300	1,920	0.8	
Spiral ribbon mixer	driver power, kW	5.0	35.0	11,000	420	1.5	
Static mixer	Liters/s	1.0	50.0	780	62	0.8	
<i>Boilers</i>							
Packaged, 15 to 40 bar	kg/h steam	5,000.0	200,000.0	4,600	62	0.8	
Field erected, 10 to 70 bar	kg/h steam	20,000.0	800,000.0	-90,000	93	0.8	
<i>Centrifuges</i>							
High-speed disk	diameter, m	0.26	0.49	63,000	260,000	0.8	
Atmospheric suspended basket	power, kW	2.0	20.0	37,000	1,200	1.2	
<i>Compressors</i>							
Blower	m ³ /h	200.0	5,000.0	4,200	27	0.8	
Centrifugal	driver power, kW	132.0	29,000.0	8,400	3,100	0.6	
Reciprocating	driver power, kW	100.0	16,000.0	240,000	1.33	1.5	
<i>Conveyors</i>							
Belt, 0.5 m wide	length, m	10.0	500.0	21,000	340	1.0	
Belt, 1.0 m wide	length, m	10.0	500.0	23,000	575	1.0	
Bucket elevator, 0.5 m bucket	height, m	10.0	35.0	14,000	1,450	1.0	
<i>Crushers</i>							
Reversible hammer mill	tonne/h	20.0	400.0	400	9,900	0.5	
Pulverizers	kg/h	200.0	4,000.0	3,000	390	0.5	
<i>Crystallizers</i>							
Scraped surface crystallizer	length, m	7.0	280.0	41,000	40,000	0.7	
<i>Distillation columns</i>							
See pressure vessels, packing, and trays							
<i>Dryers</i>							
Direct contact rotary	area, m ²	11.0	180.0	-7,400	4,350	0.9	1
Pan	area, m ²	1.5	15.0	-5,300	24,000	0.5	2
Spray dryer	evap rate kg/h	400.0	4,000.0	190,000	180	0.9	
<i>Evaporators</i>							
Vertical tube	area, m ²	11.0	640.0	17,000	13,500	0.6	
Agitated falling film	area, m ²	0.5	12.0	29,000	53,500	0.6	

(continued)

Tabla IV.22. Coste de adquisición de los equipos. Continuación. (Towler y Sinnott 2008)

Equipment	Units for Size, <i>S</i>	<i>S</i> _{Lower}	<i>S</i> _{Upper}	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>n</i>	Note
<i>Exchangers</i>							
U-tube shell and tube	area, m ²	10.0	1,000.0	10,000	88	1.0	
Floating head shell and tube	area, m ²	10.0	1,000.0	11,000	115	1.0	
Double pipe	area, m ²	1.0	80.0	500	1,100	1.0	
Thermosyihon reboiler	area, m ²	10.0	500.0	13,000	95	1.0	
U-tube Kettle reboiler	area, m ²	10.0	500.0	14,000	83	1.0	
Plate and frame	area, m ²	1.0	180.0	1,100	850	0.4	3
<i>Filters</i>							
Plate and frame	capacity, m ³	0.4	1.4	76,000	54,000	0.5	
Vacuum drum	area, m ²	10.0	180.0	-45,000	56,000	0.3	
<i>Furnaces</i>							
Cylindrical	duty, MW	0.2	60.0	53,000	69,000	0.8	
Box	duty, MW	30.0	120.0	7,000	71,000	0.8	
<i>Packings</i>							
304 ss Raschig rings	m ³			0	3,700	1.0	
Ceramic intalox saddles	m ³			0	930	1.0	
304 ss Pall rings	m ³			0	4,000	1.0	
PVC structured packing	m ³			0	250	1.0	
304 ss structured packing	m ³			0	3,200	1.0	4
<i>Pressure vessels</i>							
Vertical, cs	shell mass, kg	150.0	69,200.0	-400	230	0.6	5
Horizontal, cs	shell mass, kg	250.0	69,200.0	-2,500	200	0.6	
Vertical, 304 ss	shell mass, kg	90.0	124,200.0	-10,000	600	0.6	5
Horizontal, 304 ss	shell mass, kg	170.0	114,000.0	-15,000	560	0.6	
<i>Pumps and drivers</i>							
Single-stage centrifugal	flow Liters/s	0.2	500.0	3,300	48	1.2	
Explosion-proof motor	power, kW	1.0	2,500.0	920	600	0.7	
Condensing steam turbine	power, kW	100.0	20,000.0	-19,000	820	0.8	
<i>Reactors</i>							
Jacketed, agitated	volume, m ³	0.5	100.0	14,000	15,400	0.7	
Jacketed, agitated, glass-lined	volume, m ³	0.5	25.0	13,000	34,000	0.5	
<i>Tanks</i>							
Floating roof	capacity, m ³	100.0	10,000.0	53,000	2,400	0.6	
Cone roof	capacity, m ³	10.0	4,000.0	5,700	700	0.7	
<i>Trays</i>							
Sieve trays	diameter, m	0.5	5.0	100	120	2.0	6
Valve trays	diameter, m	0.5	5.0	130	146	2.0	6
Bubble cap trays	diameter, m	0.5	5.0	200	240	2.0	6
<i>Utilities</i>							
Cooling tower & pumps	flow liters/s	100.0	10,000.0	61,000	650	0.9	7
Packaged mechanical refrigerator	evaporator duty, kW	50.0	1,500.0	4,900	720	0.9	
Water ion exchange plant	flow m ³ /h	1.0	50.0	6,200	4,300	0.7	

IV.D. COSTE INTERCAMBIADORES DE CALOR

El coste de adquisición de los intercambiadores de calor puede obtenerse en función de su área y del material de construcción a partir de la Figura IV.32 (Peters, Timmerhaus y West 2003). Este coste está referido al año 2002, por lo que es necesario actualizarlo mediante el método de los índices de costes, empleado en apartados anteriores.

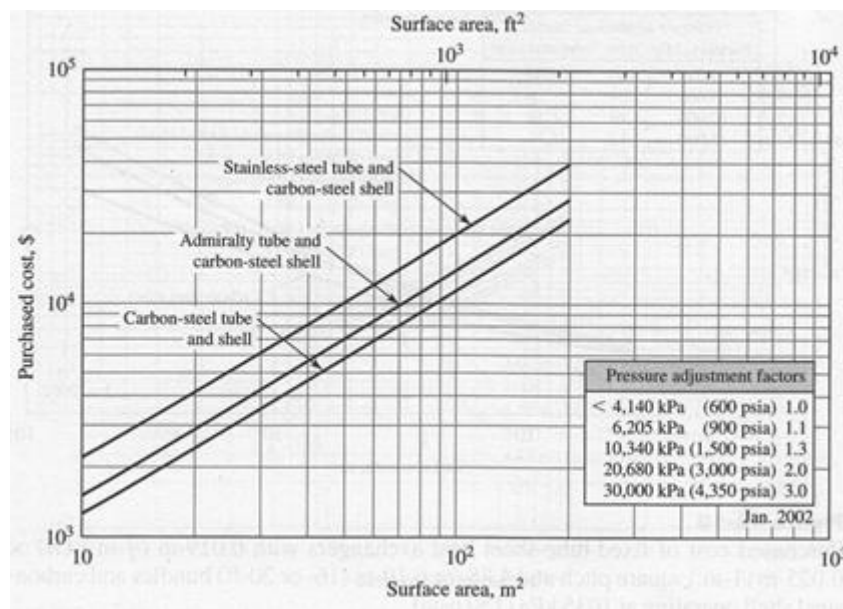


Figura IV.32. Coste adquisición intercambiadores de tubos múltiples (Walas 2012)

En aquellos casos en los que el área del intercambiador no haga posible el empleo de la Figura IV.32, para la determinación del coste de cambiador se emplea la Ecuación IV.59 (Towler y Sinnott 2008).

$$C_e = a + bS^n \quad [IV.59]$$

Donde C_e se corresponde con el coste de adquisición del equipo (\$) en el año 2007, mientras que a, b y el exponente n son constantes dependientes del tipo de equipo. En cuanto a S , se trata del factor de tamaño, que también depende del equipo. En este caso, S representa el área del intercambiador de calor (m^2). Los valores de a, b y n se extraen de la Tabla IV.21 e IV.22 (Towler y Sinnott 2008), recogida en el Anexo IV.C.

El coste de cada uno de los intercambiadores de calor empleados se recoge en la Tabla IV.23.

Tabla IV.23. Coste de los intercambiadores de calor

Cambiador	Coste ₂₀₀₂ (\$)	a	b	S	n	Coste ₂₀₀₆ (\$)	Coste ₂₀₂₃ (€)
IC.1	-	500	110 0	1,696	1	2365,60	3944,72
IC.2	-	500	110 0	0,705	1	1275,50	1956,78
IC.3	7000	-	-	-	-	-	13562,09
IC.4	22500	-	-	-	-	-	43592,44
ICa.1	-	500	110 0	4,901	1	5891,10	9037,72
ICa.4	-	500	110 0	0,705	1	1275,50	1956,78
ICa.5	-	10000	88	11,23	1	10988,24	16857,4
ICa.6	-	10000	88	142,1	1	22504,8	34525,32
ICa.8	30000	-	-	-	-	-	63177,45