



**UNIVERSIDAD DE JAÉN**  
*Escuela Politécnica Superior (Jaén)*

Trabajo Fin de Máster

# **DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO ACÉTICO DE 75.000 T/AÑO Y PUREZA DEL 99,5%**

**Alumno/a: Troya Soriano, María**

**Tutor/a: Prof. D. Francisco Espínola Lozano  
Prof. D. Juan Miguel Romero García**

**Dpto.: Ingeniería Química, Ambiental y de los  
Materiales.**

**Marzo, 2019**



UNIVERSIDAD DE JAÉN

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR DE JAÉN

Departamento de Ingeniería Química, Ambiental y de los Materiales

Los Drs. D. Francisco Espínola Lozano y D. Juan Miguel Romero García, tutores del Trabajo Fin de Máster: Diseño y simulación de una planta de producción de ácido acético de 75.000 t/año y pureza del 99,5%, que presenta D<sup>a</sup> María Troya Soriano, autorizan su presentación para defensa y evaluación en la Escuela Politécnica Superior de Jaén.

Jaén, Marzo de 2019

La alumna

Los tutores

D<sup>a</sup> MARÍA TROYA SORIANO

Dr. D. FRANCISCO ESPÍNOLA LOZANO

Dr. D. JUAN MIGUEL ROMERO GARCÍA

**ÍNDICE**

<b>RESUMEN</b> .....	4
<b>1. INTRODUCCIÓN Y ANTECEDENTES</b> .....	5
<b>1.1. Antecedentes</b> .....	5
<b>1.2. Introducción</b> .....	5
1.2.1 <i>Obtención</i> .....	6
1.2.2 <i>Mercado</i> .....	9
<b>2. OBJETIVOS</b> .....	11
<b>3. METODOLOGÍA</b> .....	13
<b>3.1. Compuestos químicos que intervienen en la simulación</b> .....	16
3.1.1 <i>Reactivo: Etileno</i> .....	16
3.1.2 <i>Reactivo: Oxígeno</i> .....	17
3.1.3 <i>Agua</i> .....	18
3.1.4 <i>Inerte: Argón</i> .....	18
3.1.5 <i>Inerte: Nitrógeno</i> .....	19
3.1.6 <i>Agente extractor: Metil-etil-cetona</i> .....	20
3.1.7 <i>Subproducto: Dióxido de carbono</i> .....	21
3.1.8 <i>Producto: Ácido acético</i> .....	22
<b>3.2. Descripción del proceso de simulación</b> .....	23
3.2.1 <i>Obtención de oxígeno</i> .....	25
3.2.2 <i>Corriente de entrada del etileno</i> .....	28
3.2.3 <i>Corriente de entrada de agua</i> .....	30
3.2.4 <i>Reactor y catalizador</i> .....	30
3.2.5 <i>Flash y purga</i> .....	33
3.2.6 <i>Columna de extracción</i> .....	33
3.2.7 <i>Columna de destilación</i> .....	36
3.2.8 <i>Columna de destilación para el agente extractor y recirculación</i> .....	38
<b>3.3. Integración energética</b> .....	40
<b>3.4. Estudio económico</b> .....	44
<b>4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN</b> .....	50
<b>4.1. Simulación</b> .....	50
<b>4.2. Integración energética</b> .....	63
<b>4.3. Estudio económico</b> .....	70
<b>5. CONCLUSIONES</b> .....	78
<b>6. BIBLIOGRAFIA</b> .....	79
<b>7. ÍNDICE DE TABLAS</b> .....	82

**8. ÍNDICE DE FIGURAS**.....83

## RESUMEN

En este trabajo final de máster se realiza el diseño y simulación de una planta de producción de ácido acético, como su título indica. Para su realización se comenzó con una revisión bibliográfica estudiando los recientes avances de los procesos catalíticos de producción de ácido acético, seguidamente se llevó a cabo la comparación de dichos procesos para seleccionar el más interesante, teniendo en cuenta varios aspectos como el factor novedad frente a otros trabajos ya realizados. Por último, se seleccionó uno para su modelado-simulación y correspondiente optimización, teniendo en cuenta, su rentabilidad energética y económica.

Para el presente trabajo se ha considerado una producción anual de 75.000 toneladas al año de ácido acético con un 99,5%p. de pureza. La simulación y el análisis económico de la planta se ha realizado con el paquete informático Aspen Plus®.

Además se ha realizado un análisis energético, identificando los requerimientos térmicos de todos los equipos, presentes en el diseño de la simulación, y una posterior integración económica a partir del análisis "Pinch", con la ayuda de Aspen Energy Analyser. Se representan las curvas compuestas de las corrientes del proceso y una propuesta para el ahorro energético, teniendo como objetivo una mejor recuperación de calor en todo el proceso y un mínimo de requerimientos de servicios externos de calentamiento y enfriamiento.

El último paso realizado ha sido el análisis económico de la planta de producción de ácido acético, para estudiar su rentabilidad económica, tal y como se ha planteado en la simulación y además en un caso alternativo, realizando una comparación entre ambos. Este estudio económico se ha realizado con la ayuda del programa Aspen Process Economic Analyzer.

Tras todo lo anterior se ha llegado a la conclusión global que con la planta propuesta se han logrado los objetivos marcados inicialmente y que es viable económicamente según las consideraciones tenidas en cuenta.

## 1. INTRODUCCIÓN Y ANTECEDENTES

### 1.1. Antecedentes

Debido a la necesidad de la realización de un trabajo para la finalización del Máster en Ingeniería Industrial, me vi motivada en la temática de la Ingeniería Química, debido al interés que me suscitó mientras cursé las asignaturas de dicha temática. Dicho interés fue causado por diversos motivos, uno de los cuales fue la elevada importancia de la Industria Química a nivel mundial además del agrado personal.

Una vez tomada esta decisión, junto con mis tutores, Dr. Francisco Espínola Lozano y Dr. Juan Miguel Romero García, decidimos realizar un pre-estudio de la producción del ácido acético, introduciéndonos en la búsqueda de una acertada bibliografía. Encontramos mucha documentación, pero no se adaptaba 100% a lo que queríamos desarrollar, ya que en el 95% de los documentos encontrados, la producción del ácido acético se lleva a cabo a partir de la carbonilación del metanol. En el caso de la bibliografía encontrada sobre la obtención del ácido acético a partir de la oxidación del etileno, objeto de nuestro TFM, en el 0% realizan una simulación. Es por esto por lo que se ha realizado algo novedoso, con el objetivo de que sirva de ayuda para futuros trabajos relacionados.

### 1.2. Introducción

El ácido acético es uno de los productos químicos de mayor importancia en la Industria Química y en la Industria Alimentaria, además de muy familiar para la población en general por ser un compuesto característico en el vinagre. Sus principales aplicaciones son:

- Producción de acetato de vinilo monómero, utilizado en la fabricación de pinturas y adhesivos.
- Producción de ácido tereftálico, precursor del poliéster PET.
- En la Industria Alimentaria como acidificante.
- También se usa en la industria de perfumes y cosméticos.
- Se emplea en la manufactura de cuero.

- Se usa para ajustar el pH de agentes impregnantes, en la industria textil.
- En la explotación petrolera, mejorando los trabajos de perforación.

El ácido acético es un líquido incoloro, de olor intenso y sabor que produce sensación de ardor. Su temperatura de fusión es de 16,7<sup>0</sup>C, teniendo similitud en esas condiciones con el hielo, llamándose ácido acético glacial. Por el contrario su temperatura normal de ebullición es 117,9<sup>0</sup>C. Además el ácido acético es corrosivo y puede causar quemaduras y daños permanentes. La estructura del ácido acético se puede observar en la Figura 1.

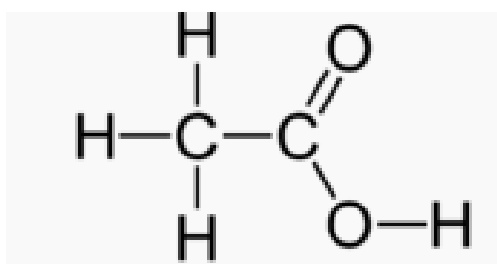


Figura 1: Estructura del ácido acético.

### 1.2.1 Obtención

Para la obtención del ácido acético, se pueden emplear varios métodos que se podrían clasificar en dos grupos: biotecnológicos (fermentación) o síntesis química. Históricamente se ha obtenido por la fermentación del etanol, método que se sigue utilizando para la producción de vinagre. No obstante, a medida que la demanda de ácido acético ha ido aumentando, por la diversidad de aplicaciones que tiene, los métodos tradicionales han sido desplazados por procesos de síntesis química. Los tres principales métodos de obtención sintéticos del ácido acético son: carbonilación de metanol, oxidación de hidrocarburos en fase líquida, y oxidación de etileno.

#### 1) Carbonilación de metanol

En 1913 se descubrió que el metanol, podía ser carbonilado para producir ácido acético, pero un año después fue cuando este método se hizo viable económicamente, por la posibilidad de la obtención de

metanol en cantidades comerciales. Este método se ha convertido generalmente en la forma de obtención de ácido acético.

La reacción que tiene lugar es la siguiente:



La primera planta comercial se desarrolló hacia 1960 por BASF. En este proceso el metanol reaccionaba con monóxido de carbono en presencia de yoduro de cobalto, como catalizador, en fase líquida, a 250°C y 680 bar. La selectividad a ácido acético era del 90% (metanol) y 70% (monóxido de carbono) [13].

Unos años más tarde Monosanto descubrió rodio combinado con yodo, como catalizador, obteniendo mejores resultados de selectividad, 99% (metanol) y 90% (monóxido de carbono) [1], con condiciones de operación menos extremas. En este proceso industrial, los reactivos reaccionan de forma continua, en fase líquida, a 150-200°C y a presiones de hasta 30 bar.

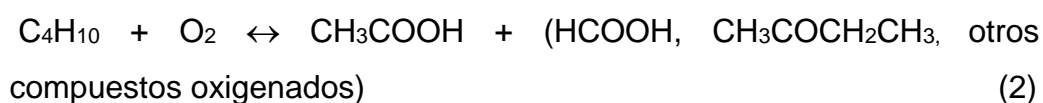
En 1996, BP implementó un nuevo proceso, "Cativa", basado en el uso de un catalizador de iridio. La cantidad de impurezas orgánicas de yoduro es muy baja, mientras que en los procesos basados en catalizadores de rodio, esto suponía un problema. En cambio, en el proceso Cativa, la cantidad de ácido propiónico es inferior a la formada en procesos con rodio, lo que implica menor consumo de energía en la purificación del producto [13].

## 2) Oxidación de hidrocarburos en fase líquida

Los hidrocarburos, como el butano y la nafta, se oxidan directamente en ácido acético, y el 9% de la capacidad de producción mundial se debe a este proceso. Se utilizan catalizadores de acetato, por ejemplo, acetato de cobalto y manganeso. Dado que este método utiliza hidrocarburos con altos números de átomos de carbono como materias primas, no

solo se produce ácido acético, sino también acetona, ácido fórmico, ácido propiónico y otros. En consecuencia, el rendimiento del ácido acético es mucho más bajo que el del otro proceso, pero este proceso tiene ventajas cuando se desea fabricar varios ácidos simultáneamente [1].

Fue Celanese quien comenzó, en 1952, la producción de ácido acético a partir de la oxidación del butano en fase líquida. Este proceso opera en condiciones de 175°C y 54 bar. La separación de la mezcla de ácidos resultantes, tiene lugar mediante una combinación de columnas de extracción y destilación [13].



### 3) Oxidación de etileno

La oxidación directa del etileno en una sola etapa se desarrolló por Denko [1]. En este proceso, el ácido acético es producido con alta selectividad, partiendo de una mezcla de oxígeno y etileno en fase gaseosa entre 140-200°C y 1-15 bar [5], con el uso de un catalizador sólido, explicado más adelante, con una selectividad de 85-90%.

La parte más importante del dicho proceso es la reacción química. En el reactor, además de ocurrir la reacción principal, a partir de la cual se forma el ácido acético, tiene lugar otra reacción secundaria, en la cual se producen dióxido de carbono y agua, ecuaciones 3 y 4, respectivamente.



El ácido acético se purifica, en este caso hasta el 99,5% mediante una serie de columnas de extracción y destilación.

Denko construyó la primera planta comercial en 1997, basada en este proceso, para una capacidad de 100.000 toneladas/año de ácido acético en Oita, Japón.

### 1.2.2. Mercado

Según un estudio llevado a cabo por la revista Gran View Research Inc., en el año 2015 [14], el mercado global del ácido acético alcanzará los 13,31 billones de dólares en 2022. El aumento del uso del ácido tereftálico, en la fabricación del poliéster y el crecimiento de la demanda del acetato de vinilo monómero, motivarán el crecimiento del mercado en los próximos años.

Este estudio muestra que solo en 2014, China fue el mercado más grande de ácido acético, representando más del 40% del volumen de la demanda mundial. Además se prevé que este dominio de la demanda, se mantendrá hasta el año 2022. La demanda mundial de ácido acético, durante el año 2014, se representa en la Figura 2.

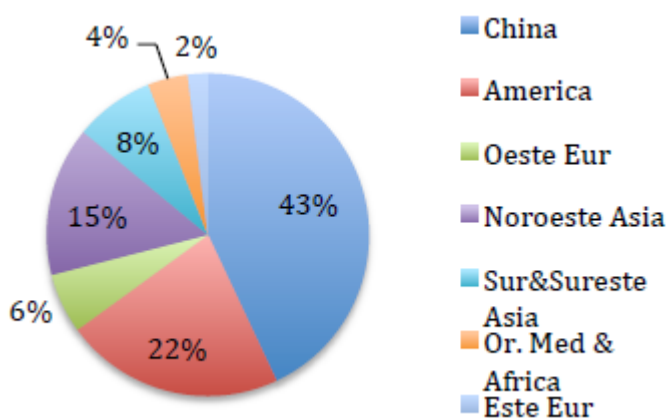


Figura 2: Demanda mundial del ácido acético en 2014 [13].

La demanda mundial del ácido acético para la producción del acetato de vinilo monómero (VAM), superó las 3600 kilotoneladas en 2014 y se espera que el crecimiento anual sea de un 4% hasta el año 2022 [14]. En lo referente a la demanda para la producción de ácido tereftálico (PTA), sobrepasó las 2500 kilotoneladas, esperándose que para el 2022 esté por encima de las 3800 kilotoneladas [14]. Esta evolución del mercado del ácido acético se refleja en la Figura 3.

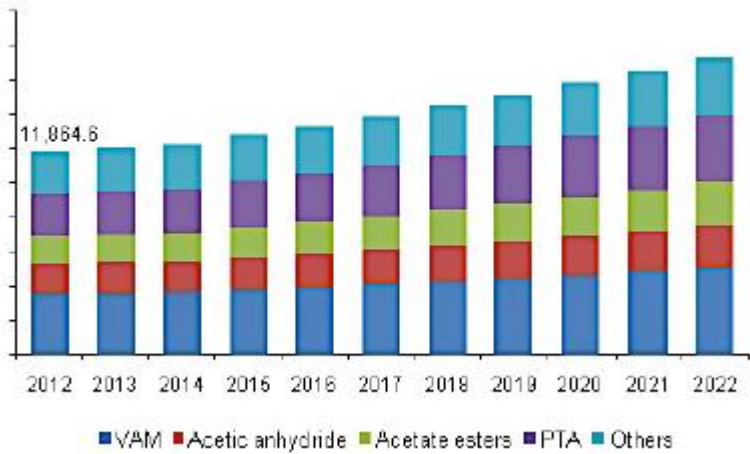


Figura 3: Evolución del mercado del ácido acético 2012-2022 [14].

## 2. OBJETIVOS

El objetivo principal del trabajo final de máster es la simulación y posterior optimización del proceso de producción de ácido acético a partir de la oxidación del etileno, la cual consiste en distribuir correctamente los recursos para cumplir con un objetivo previamente fijado, la obtención de 75.000 t/año de ácido acético con un 99,5%p. de pureza. Así, destacaremos la mejora del proceso de producción, maximizando el rendimiento de las etapas del proceso, elevando los beneficios, minimizando costes, etc. Para tal fin se usa el programa Aspen Plus®, herramienta útil para el modelado de procesos químicos.

Además de un objetivo principal, este trabajo tiene diversos objetivos específicos, los cuales se citan a continuación:

- Obtención del oxígeno a partir del aire; ya que como se citó en la introducción, el agente oxidante es el oxígeno. Dicha materia prima se puede obtener a partir de su compra, o de su extracción del aire, mediante una serie de columnas de destilación, con unos requerimientos específicos de temperatura y presión. En este caso, se ha optado por su extracción del aire, para así obtener mayor rentabilidad económica, que a priori aunque se desconoce, se plantea como idea a llevar a cabo, por la venta de posibles coproductos como el nitrógeno, procedente del aire.
- Diseño de un reactor cinético para la producción de acético; dependiendo de la cantidad de producto formado, requerido en este trabajo, y de la cantidad de catalizador necesaria para aquel, el reactor se dimensionará para que se produzcan con éxito las reacciones químicas presentes en este método.
- Diseño de la columna de extracción; una vez formado el ácido acético, en el reactor, y separado de los gases, es necesaria su extracción de la presencia de otros líquidos, como el agua. Dicha extracción se ha llevado a cabo en una columna de extracción y a partir de un agente extractor (disolvente), necesario para separar la mezcla ácido acético-agua.

- Diseño de la etapa de separación por destilación; una vez completada la fase de extracción, es necesario destilar el ácido acético del agente extractor usado y de una pequeña cantidad de agua restante, para así conseguir su cantidad y pureza deseadas.
- Diseño de la etapa de destilación y aprovechamiento del agente extractor; una vez obtenido el producto principal, con objetivo de abaratar costes, se destila el disolvente usado y su posterior recirculación al proceso.
- Integración energética del proceso a partir del análisis "Pinch"; para obtener posibles ahorros energéticos en una configuración recomendada. Para dicho análisis se usará el programa Aspen Energy Analyzer, herramienta para la síntesis y diseño de procesos a través de la implementación de la tecnología "pinch" en la integración de la energía.
- El último objetivo es el estudio de la viabilidad económica del proceso; en este estudio a partir de los costes (materias primas, equipos, utilidades, mantenimiento,...) y ventas del producto, se estudia su rentabilidad económica a lo largo de la vida útil del proyecto. Para ello se tienen en cuenta factores como la TIR, el periodo de recuperación y el VAN. Su realización se ha llevado a cabo con el programa Aspen Process Economic Analyzer.

### 3. METODOLOGÍA

Este trabajo se ha llevado a cabo mediante el programa de simulación de procesos Aspen Plus® (Aspen Technology, Inc. USA) para optimizar el diseño de producción del producto deseado, a partir de la oxidación directa del etileno.

Se han modelado las principales etapas del proceso de producción desde un punto de vista cinético y termodinámico. El modelado y la simulación del reactor nos va a permitir conocer qué variables determinan su estado, lo que ayudará a evaluar las acciones más adecuadas para la toma de decisiones, con el fin de mantener dentro de unos límites los requerimientos de producción. Por otra parte, se estudiará la mejor configuración de los equipos necesarios para realizar las etapas de separación de los productos de salida del reactor. La optimización de las mismas normalmente lleva asociado un ahorro de costes. Por tanto, se realizará una integración energética y un análisis económico.

En este trabajo, se describe el proceso de producción de ácido acético en el que el etileno y el oxígeno reaccionan en presencia de un catalizador sólido en un reactor cinético de flujo pistón, en fase gaseosa, siguiendo el proceso definido en [1], consiguiendo una gran selectividad en ácido acético, a partir de la oxidación directa de etileno, utilizando paladio, selenio y ácido silitungstónico sobre sílice, como catalizador. Para que ello tenga lugar, hay que conseguir las temperaturas necesarias, a través de intercambiadores de calor, antes y después del reactor y en diferentes unidades del proceso, en las cuales son precisas, además, compresores o turbinas y bombas para conseguir la presión deseada. También se necesitan una serie de columnas para conseguir el producto con la pureza requerida, definida en el título de este trabajo, además de un agente extractor, que también destilaremos en otra columna para así recircularlo consiguiendo un ahorro en costes. Por tanto existen 2 etapas diferenciadas, además de la etapa de obtención del oxígeno a partir de aire, la etapa de reacción y la etapa de separación. La secuencia seguida en la simulación se puede observar en la Figura 4: Diagrama de bloques. C1: reactor, K3: columna de extracción, K4: columna de destilación para el ácido acético, K5: columna de destilación del agente extractor.

Después del reactor, el producto es enfriado hasta temperatura ambiente, y en un separador, los gases son separados de los líquidos que han condensado, como el ácido acético y el agua. Los gases son recirculados de nuevo al proceso

Otra parte importante del proceso es la separación del ácido acético del resto de los productos de reacción. Para ello, se ha utilizado una columna de extracción y una columna de destilación. En la primera columna, mediante un agente extractor, se consigue separar el ácido acético, de una gran cantidad de agua y seguidamente se coloca la columna de destilación donde conseguimos el ácido acético con una pureza del 99,5%p.

Por último, para un aprovechamiento final del agente extractor, este se destila en una columna de destilación y se recircula de nuevo al proceso.

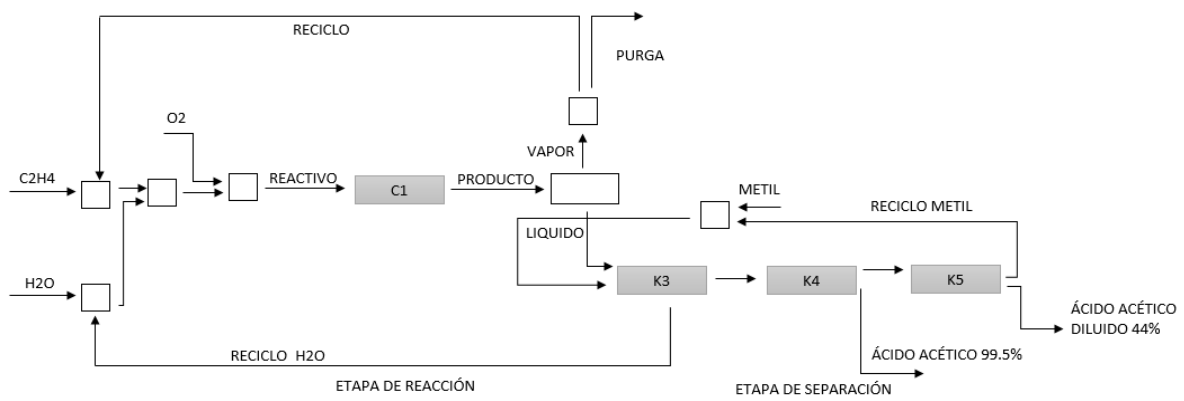


Figura 4: Diagrama de bloques. C1: reactor, K3: columna de extracción, K4: columna de destilación para el ácido acético, K5: columna de destilación del agente extractor

Para la realización de un análisis de integración energética, se va a desarrollar el método "Pinch" que calculará el número mínimo de utilidades necesarias en calentar y enfriar las corrientes del proceso. Para el desarrollo de dicho método, se usará como herramienta el software Aspen Energy Analyzer. En este programa se introducen los datos térmicos y a partir de las corrientes frías y calientes, se representan las curvas compuestas estableciendo los requerimientos mínimos energéticos mediante la recuperación de energía combinando las corrientes del proceso y así reduciendo la cantidad de utilidades externas.

El último paso es la realización de un estudio económico al proceso. Dicho estudio se desarrolla con el programa Aspen Process Economic Analyzer, en el cuál hay que introducir datos como:

- 1) Localización de la planta, impuestos, costes del personal, interés, etc.
- 2) Costes de materias primas, equipos y servicios.
- 3) Precio de venta del producto.
- 4) Horas de operación y vida útil del proyecto.

Una vez introducidos todos los requerimientos del programa se estudiará la viabilidad económica a partir del beneficio total, el tiempo de retorno, TIR y VAN, por periodo, entre otros que se explicarán más adelante.

Por tanto, la metodología seguida en este trabajo es la representada en la Figura 5.

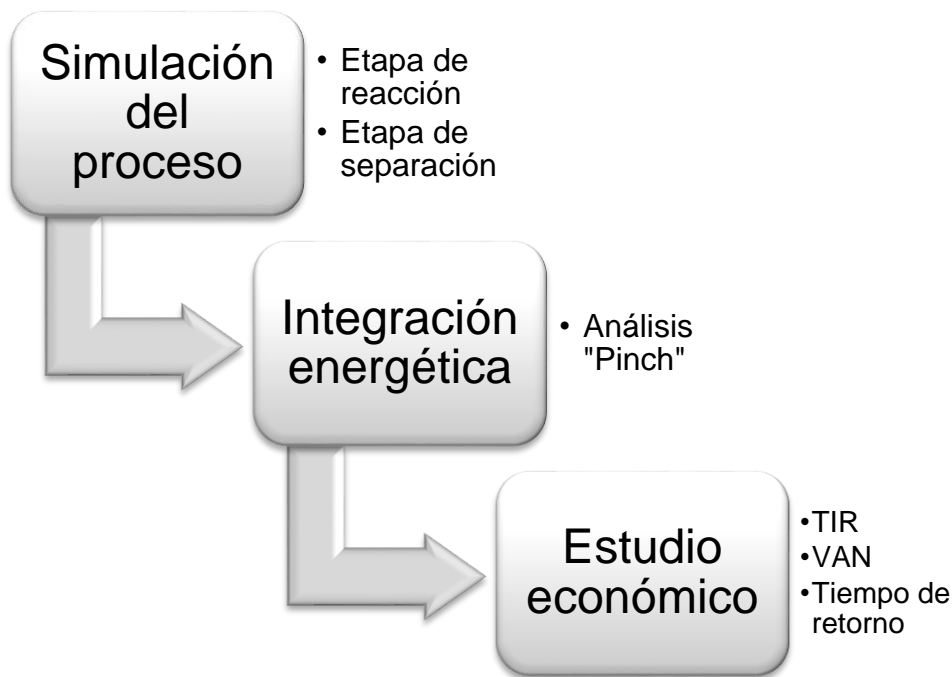


Figura 5: Metodología Seguida.

### 3.1. Compuestos químicos que intervienen en la simulación

#### 3.1.1. Reactivo: Etileno

El etileno,  $C_2H_4$ , es un compuesto orgánico de la familia de los hidrocarburos insaturados. Lo forman 2 átomos de carbono unidos por un enlace doble y 4 átomos de hidrogeno, unidos por enlaces simples a los átomos de carbono, tal y como se muestra en la Figura 6.

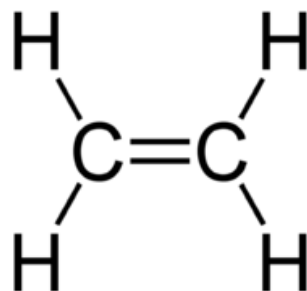


Figura 6: Estructura del etileno.

El etileno en condiciones normales se encuentra en estado gaseoso, tal y como nosotros partimos de él en nuestra simulación. Además tiene apariencia incolora y es altamente inflamable. A continuación, en la

Tabla 1, se muestran sus propiedades físicas.

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>
<i>Peso molecular (g/mol)</i>	28,05
<i>Temperatura de fusión (K)</i>	104
<i>Temperatura de ebullición (K)</i>	169,41
<i>Densidad (kg/m<sup>3</sup>)</i>	1,18
<i>Temperatura crítica (K)</i>	282,34
<i>Presión crítica (bar)</i>	50,41

Tabla 1: Propiedades físicas del etileno.

Los principales riesgos son incendio y explosión, cuando se mezcla con el aire frente a cualquier fuente de inflamación, como por ejemplo la electricidad estática.

En contacto con la piel, en estado líquido puede provocar quemaduras por frío. Una extensa exposición del etileno puede causar lesiones permanentes a causa de la privación de oxígeno.

### 3.1.2. Reactivo: Oxígeno

El oxígeno, O<sub>2</sub>, se forma en condiciones normales de presión y temperatura con una configuración electrónica, de sus 2 átomos, en un enlace doble. En la Figura 7 se muestra la estructura de una molécula de oxígeno.

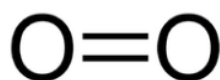


Figura 7: Estructura del oxígeno.

Es un gas incoloro, inodoro e insípido. Forma parte del grupo de los anfígenos, siendo altamente reactivo formando compuestos con la mayoría de elementos. Es un agente oxidante, como se trata en la simulación. Sus propiedades físicas se muestran en la

Tabla 2.

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>
<i>Peso molecular (g/mol)</i>	32
<i>Temperatura de fusión (K)</i>	54,36
<i>Temperatura de ebullición (K)</i>	90,19
<i>Densidad (kg/m<sup>3</sup>)</i>	1,43
<i>Temperatura crítica (K)</i>	154,58
<i>Presión crítica (bar)</i>	50,43

Tabla 2: Propiedades físicas del oxígeno.

El oxígeno en estado líquido puede producir irritaciones y quemaduras en piel y ojos, además de congelación. Su inhalación a altas presiones puede provocar, mareos, convulsiones, pérdida de la visión y del conocimiento. Respirar oxígeno puro puede causar irritación en los pulmones.

### 3.1.3. Agua

La molécula de agua está formada por 2 átomos de hidrogeno unidos por enlaces simples a un átomo de oxígeno, estructurándose como se muestra en la Figura 8.

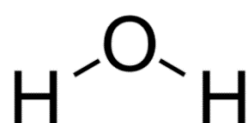


Figura 8: Estructura del agua.

Sus propiedades físicas podemos observarlas en la

Tabla 3.

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>
<i>Peso molecular (g/mol)</i>	18
<i>Temperatura de fusión (K)</i>	273,16
<i>Temperatura de ebullición (K)</i>	373,15
<i>Densidad (kg/m<sup>3</sup>)</i>	0,96
<i>Temperatura crítica (K)</i>	647,09
<i>Presión crítica (bar)</i>	220,64

Tabla 3: Propiedades físicas del agua.

### 3.1.4. Inerte: Argón

El aire está formado por 0,932 % de argón y por tanto, tendremos una mínima cantidad de este inerte, ya que vamos a partir del aire para conseguir oxígeno puro. El argón se encuentra en condiciones normales de presión y temperatura, en estado gaseoso. Es un gas noble y al tener 8 electrones en su capa

de valencia, no necesita electrones y no reacciona con ningún otro elemento o compuesto químico, para conseguir la estabilidad electrónica.

Es un gas incoloro e inodoro y sus propiedades físicas las podemos encontrar en la Tabla 4.

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>
<i>Peso atómico (g/mol)</i>	39,95
<i>Temperatura de fusión (K)</i>	83,78
<i>Temperatura de ebullición (K)</i>	87,28
<i>Densidad (kg/m<sup>3</sup>)</i>	1,78
<i>Temperatura crítica (K)</i>	150,86
<i>Presión crítica (bar)</i>	48,98

Tabla 4: Propiedades físicas del argón.

Al tratarse de un gas, la exposición a un gran volumen de argón puede conllevar riesgo de asfixia. No es inflamables, ni reactivo, como se ha explicado más arriba, pero si un depósito, donde se acumula este gas, se calienta o perfora, este puede explotar y causar lesiones físicas.

### 3.1.5. Inerte: Nitrógeno

El aire está formado por un 78,118 % de nitrógeno, el cual estará presente en la simulación, al igual que el argón. En condiciones normales de presión y temperatura, se encuentra en estado gaseoso. Es un gas diatómico, al igual que el oxígeno, una molécula de nitrógeno en el aire, se compone de 2 átomos de nitrógeno, unidos por un enlace triple. Su estructura se muestra en la Figura 9.



Figura 9: Estructura del nitrógeno.

Este enlace triple, es el que lo convierte en inerte, por ser tan estable, y por tanto no reacciona con otros compuestos, en la mayoría de las situaciones.

Es un gas incoloro e inodoro y sus propiedades físicas se pueden observar en la Tabla 5.

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>
<i>Peso molecular (g/mol)</i>	28
<i>Temperatura de fusión (K)</i>	63,15
<i>Temperatura de ebullición (K)</i>	77,34
<i>Densidad (kg/m<sup>3</sup>)</i>	1,25
<i>Temperatura crítica (K)</i>	126,20
<i>Presión crítica (bar)</i>	34

Tabla 5: Propiedades físicas del nitrógeno.

El principal riesgo para la salud que presenta el nitrógeno, aunque no es un producto tóxico, es su exposición a la vía respiratoria, ya que puede absorberse por inhalación causando asfixia, al desalojar el oxígeno del aire, en un área confinada.

### 3.1.6. Agente extractor: Metil-etil-cetona

El metil-etil-cetona, conocido también como butanona, es el agente extractor utilizado para separar el ácido acético del agua y poder obtenerlo con la pureza deseada. Es un compuesto orgánico de la familia de las cetonas. Líquido incoloro e inflamable. Su fórmula molecular es C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O, siendo su estructura la representada por la Figura 10.

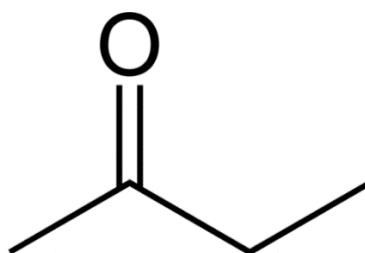


Figura 10: Estructura metil-etil-cetona.

Se eligió este compuesto, porque así se recomienda en [3], gracias a sus aplicaciones como disolvente, y algunas de sus propiedades físicas se exponen en la Tabla 6.

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>
<i>Peso molecular (g/mol)</i>	72,11
<i>Temperatura de fusión (K)</i>	186,48
<i>Temperatura de ebullición (K)</i>	352,79
<i>Densidad (kg/m<sup>3</sup>)</i>	805
<i>Temperatura crítica (K)</i>	535,5
<i>Presión crítica (bar)</i>	41,5

Tabla 6: Propiedades físicas del metil-etil-cetona.

Este compuesto puede causar irritación e incluso quemar la piel y ojos, o mucosas al entrar en contacto con él o por inhalarlo, respectivamente. Su exposición puede causar mareos, náuseas e incluso desmayos, pudiendo dañar el sistema nervioso. Además es un líquido incoloro altamente inflamable y presenta riesgo de incendio.

### 3.1.7. Subproducto: Dióxido de carbono

En el proceso de producción del ácido acético, a partir de la oxidación directa de etileno, surge una reacción secundaria, como se ha citado anteriormente, en la que obtenemos como producto dióxido de carbono, entre otros. El dióxido de carbono es una gas carbónico, que se forma por la combinación de 2 átomos de oxígeno con uno de carbono unidos por enlaces dobles, representado en la Figura 11.



Figura 11: Estructura del dióxido de carbono.

Es un gas incoloro e inodoro y poco reactivo. Forma parte de la troposfera y su ciclo en la naturaleza está relacionado con el oxígeno. A continuación, en la Tabla 7 se encuentran las propiedades físicas del dióxido de carbono.

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>
<i>Peso molecular (g/mol)</i>	44
<i>Temperatura de fusión (K)</i>	216,58
<i>Temperatura de ebullición (K)</i>	194,7
<i>Densidad (kg/m<sup>3</sup>)</i>	1,842
<i>Temperatura crítica (K)</i>	304,21
<i>Presión crítica (bar)</i>	77,83

Tabla 7: Propiedades físicas del dióxido de carbono.

La gran cantidad de dióxido de carbono en el ambiente, es una de las principales causas del cambio climático mundial. El dióxido de carbono no es tóxico para la salud humana, pero tampoco es útil su respiración, ya que grandes concentraciones de este gas producen una respiración fatigosa a causa de que desplaza el oxígeno del aire.

### 3.1.8. Producto: Ácido acético

El ácido acético es el objeto de nuestro trabajo y aunque ya se ha hablado sobre éste en la introducción, vamos a citar algunas de sus características.

Se conoce principalmente a este ácido por formar parte del vinagre y darle su olor y sabor característicos. Su fórmula molecular es  $\text{CH}_3\text{-COOH}$ , estructurándose como en la Figura 12.

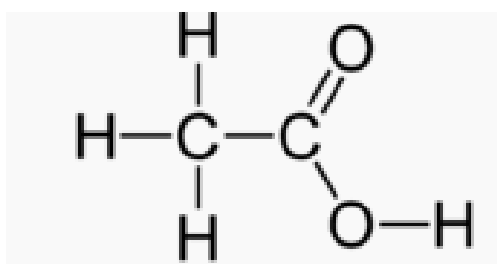


Figura 12: Estructura del ácido acético.

Es un líquido incoloro y sus principales propiedades físicas se esquematizan en la Tabla 8.

<b>Propiedad</b>	<b>Valor</b>
<i>Peso molecular (g/mol)</i>	60,02
<i>Temperatura de fusión (K)</i>	289,81
<i>Temperatura de ebullición (K)</i>	391,05
<i>Densidad (kg/m<sup>3</sup>)</i>	1049
<i>Temperatura crítica (K)</i>	591,95
<i>Presión crítica (bar)</i>	57,86

Tabla 8: Propiedades físicas del ácido acético.

Uno de los principales riesgos del ácido acético, es el incendio, ya que puede formar mezclas explosivas en estado gaseoso con el aire. Además, este gas causa acción irritante en las mucosas, pudiendo provocar incluso quemaduras.

### 3.2. Descripción del proceso de simulación

A continuación se detalla el proceso seguido en la simulación para la producción del ácido acético, objeto de este trabajo, pero antes detallaremos las características deseadas de este producto, que como dice el título serán 75.000 t/año con una pureza del 99,5%p. Esta simulación se ha diseñado para un tiempo de operación de 8000 horas al año.

El diagrama general de la simulación en Aspen Plus<sup>®</sup>, se representa en la Figura 13.

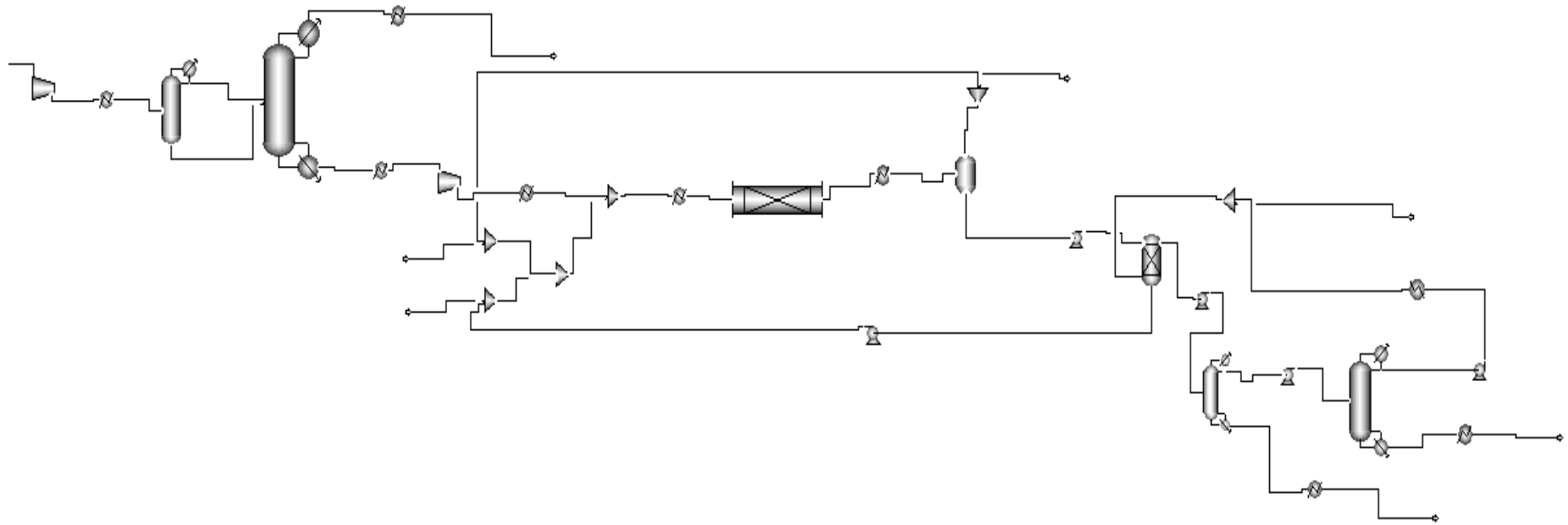


Figura 13: Diagrama general de la simulación.

### 3.2.1. *Obtención de oxígeno*

Uno de los reactivos necesarios, es el oxígeno, el cual se ha propuesto su separación del aire, en lugar de comprarlo a terceros, para así conseguir mayor rentabilidad, como ya se verá en el estudio económico. La separación se realiza a partir del modelo doble columna Linde [2].

El proceso de obtención del oxígeno es el siguiente (Figura 14):

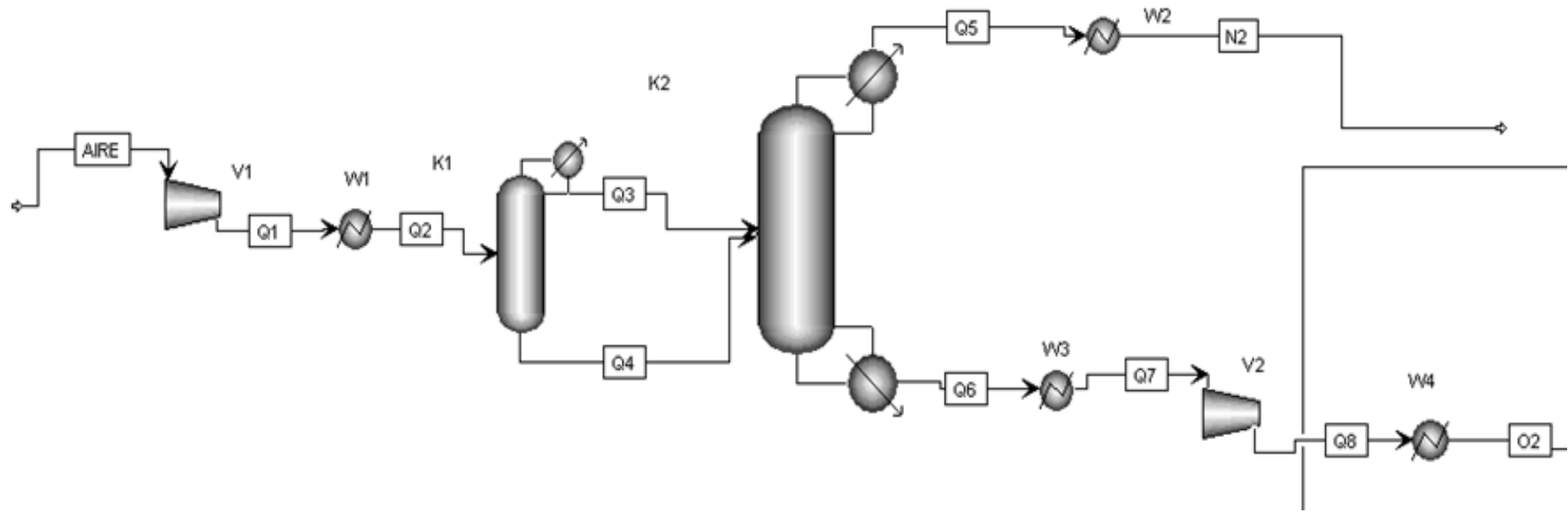


Figura 14: Diagrama obtención del oxígeno.

- 1) Se introducen 900 kmol/h de aire, con el 20,95% de O<sub>2</sub>, el 78,118% de N<sub>2</sub> y el 0,932% de Ar, del ambiente a 25°C y 1 bar. Seguidamente con un compresor, V1, se comprime, hasta 6,5 bares. Como consecuencia de la compresión, el aire se calienta, por lo que es necesario un intercambiador de calor, W1, en el proceso para enfriarlo hasta la temperatura óptima para el siguiente bloque.
- 2) A continuación va una primera columna de destilación, K1. Dicha columna cuenta con 30 platos. De esta columna salen 2 corrientes en forma de líquido, una por arriba con el 99,66% de nitrógeno en peso, Q3, y otra por abajo con un 41,57% de oxígeno, 56,42% de nitrógeno y 2% de argón, Q4. Para obtener estas proporciones, se ha realizado un previo estudio de especificaciones junto con un análisis de sensibilidad optimizando también el diseño de la columna.
- 3) A continuación, ambas corrientes pasan a una segunda columna de destilación de 60 platos para purificar el oxígeno, K2. Se obtiene de esta columna otras 2 corrientes, la primera por arriba en forma de vapor con un 98,3% en nitrógeno, y por abajo, oxígeno líquido al 99,37% en peso.
- 4) Por último, a partir de un intercambiador de calor se pasa el nitrógeno a 25°C, W2, temperatura a la que se obtuvo del ambiente con el fin de venderlo. También se consigue oxígeno en estado líquido y a partir de un intercambiador de calor, W3, se lleva hasta 25°C pasando a estado vapor. Seguidamente con una turbina, V2, se descomprime a 1 bar de presión y qué como respuesta a ello se enfría de nuevo el oxígeno y se necesita otro intercambiador de calor, W4, para mantenerlo a 25 °C. Finalmente se consigue oxígeno a partir del aire, en condiciones de presión y temperatura tal y como se obtuvo, 25°C y 1 bar.

### 3.2.2. *Corriente de entrada del etileno*

El Etileno, es el otro reactivo participe en este proceso de producción del ácido acético, además del oxígeno, ya que este trabajo se basa en la producción de ácido acético a partir de la oxidación del etileno. En este caso, sí se compra a 25°C y 1 bar, en estado gaseoso. La cantidad necesaria, 188 kmol/h, se ha obtenido según las necesidades de la planta, atendiendo a los criterios de la patente considerada [5].

En su entrada, se juntará en un mezclador, R1, junto con una corriente de recirculación, procedente de una purga también en estado gaseoso con un 36,9% de etileno, que explicaremos más adelante.

La salida de este mezclador, irá a otro mezclador, R3, y allí se unirá al agua, que se expone en el siguiente punto.

En la Figura 15 se muestra la etapa de reacción del proceso, en la que se referencia este apartado y los siguientes, hasta llegar a la etapa de separación, que llevará su propia figura.

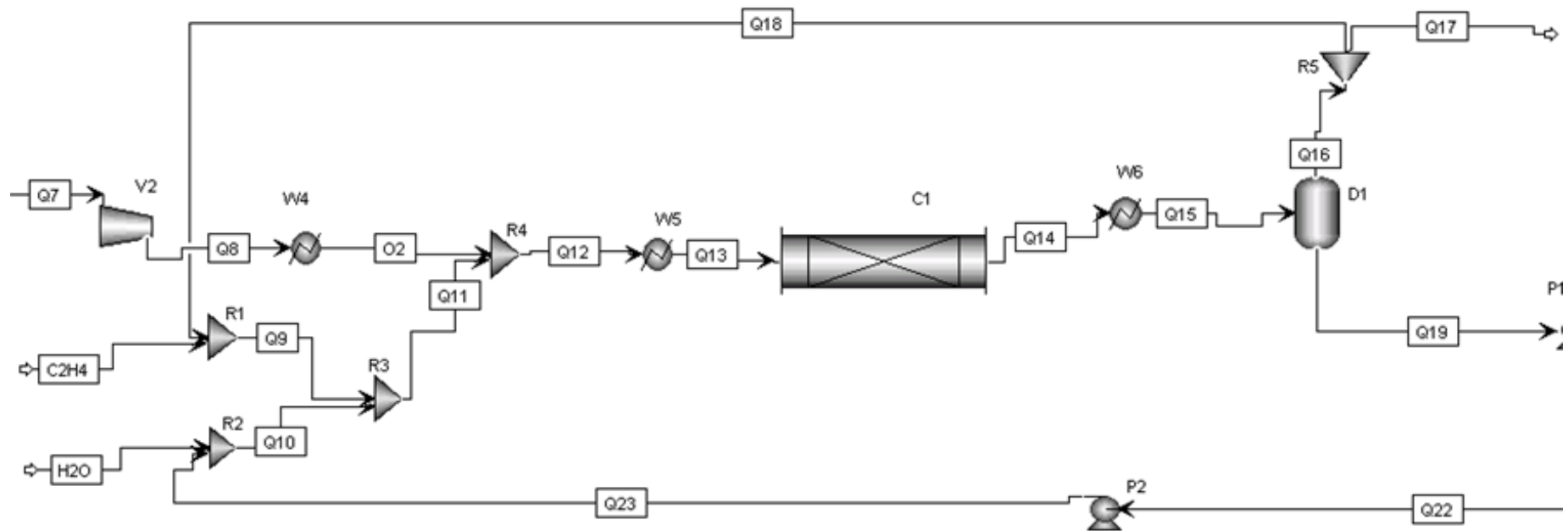


Figura 15: Diagrama etapa reacción.

### 3.2.3. Corriente de entrada de agua

Además de obtenerse como producto en la reacción (4), se necesita introducir agua al proceso tal y como se exige en la patente seguida para la realización de este TFM, [5]. Se introducen 30 kmol/h a 25°C y 1 bar y a su vez se mezcla en un mezclador, R2, con una corriente de circulación, procedente de la deshidratación del ácido acético, que se hará en una columna de extracción con un agente extractor, como se verá en los siguientes apartados.

### 3.2.4. Reactor y catalizador

Una vez obtenidas las 3 corrientes de alimentación, oxígeno, y las procedentes de los mezcladores del etileno y del agua que a su vez estas se juntan en otro mezclador, R3, se mezclan en un nuevo mezclador, R4, y pasan a un intercambiador de calor, W5, para alcanzar la temperatura necesaria de la reacción, 150 °C [1] y [5]. Una vez alcanzada esa temperatura, todo entra al reactor cinético de flujo pistón, C1, en estado gaseoso.

Se ha estimado el diseño del reactor en forma de torre, teniendo una relación entre sus dimensiones de longitud/diámetro = 4 y sus medidas se han calculado según la cantidad de catalizador necesario.

Es muy importante la elección del catalizador, ya que es un factor clave para la optimización de la producción de ácido acético. Del catalizador depende la velocidad de la reacción y la selectividad del producto obtenido. Además es muy significativa la elección del catalizador para la realización del estudio económico, ya que su precio se llevará un porcentaje importante de este estudio, como veremos en los resultados. Otra estimación a tener en cuenta es la vida útil del catalizador. Un catalizador es un compuesto que no interviene en la reacción global, pero acelera la velocidad de reacción. Teóricamente este sólido tiene una vida útil indefinida, pero debido a impurezas de los reactivos se envenena o desactiva, por lo que se ha considerado una vida útil de un año.

El catalizador que se ha seleccionado para este proceso, por su alta selectividad, es la combinación de paladio y selenio, como catalizadores, ácido silitungstónico, como promotor, y sílice como soporte, Pd-Se-H<sub>4</sub>SiW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>/SiO<sub>2</sub>, [1] y

[5]. Según las fuentes bibliográficas [1] y [5], las características del catalizador son las citadas en la Tabla 9.

<b>Catalizador</b>	<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Presión (bar)</b>	<b>Selectividad (%)</b>	<b>STY (g/l<sub>c</sub>·h)</b>
<i>Pd-Se-H<sub>4</sub>SiW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>/SiO<sub>2</sub></i>	150	1	86,4	240

Tabla 9: Características del catalizador. STY: space time yield, gramos de producto obtenido por litro de catalizador, por hora. l<sub>c</sub>: litros de catalizador.

Según la patente [5], citada en [1], el catalizador tendrá un 2% en peso de paladio, un 2% de selenio, un 11% de ácido silicotungstónico y un 85% de sílice. Por consiguiente, la cantidad de catalizador necesaria, se ha calculado de la siguiente forma:

- 1) En primer lugar se ha estimado la densidad aparente del catalizador, según la densidad aparente de la sílice, ya que forma el 85% del catalizador.

$$e_{SiO_2} = 2634 \text{ kg/m}^3 \quad (5)$$

$$e_{catalizador} = 2634 \text{ kg/m}^3 \quad (6)$$

- 2) A la salida del reactor, se forman 9945,25 kg/h de ácido acético y al dividir esta cantidad entre el STY, cantidad de producto que se forma con cada m<sup>3</sup> de catalizador, por hora, obtenemos la cantidad de m<sup>3</sup> de catalizador que se necesitan:

$$\frac{9945,25 \text{ kg/h}}{240 \text{ kg/m}^3 \cdot \text{h}} = 41,44 \text{ m}^3_c \quad (7)$$

- 3) Una vez conocido el volumen de catalizador, se puede calcular las dimensiones del reactor (Figura 16), a partir de la relación entre su longitud y su diámetro, 4, y el porcentaje de huecos, 50%. Mediante la función de optimización, Solver, en una hoja Excel, teniendo en cuenta todas estas premisas, se obtienen:

$$L=9,45 \text{ m} \quad (8)$$

$$D=2,36 \text{ m} \quad (9)$$

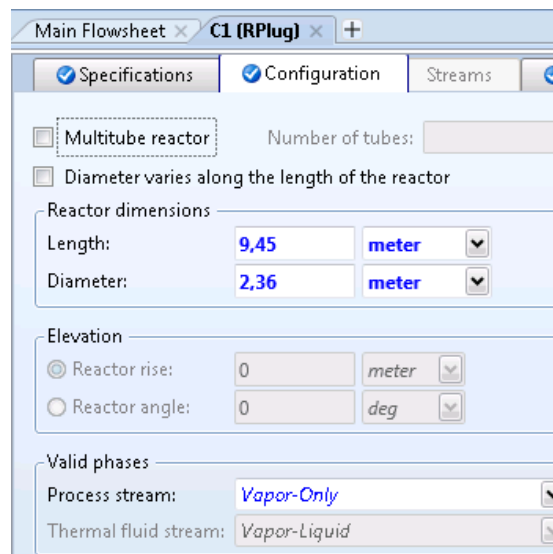


Figura 16: Dimensiones del reactor.

- 4) Se puede obtener como información adicional, necesaria para el posterior estudio económico, la cantidad de kilogramos de catalizador y de cada uno de sus componentes. Multiplicando por su densidad, se obtienen los kilogramos necesarios de catalizador, y por el porcentaje en peso de cada uno, para conocer la cantidad proporcional de cada componente.

$$2634 \frac{kg}{m^3} \cdot 41,44 m^3 = 109152,96 kg_{catalizador} \quad (10)$$

$$109152,96 kg_{catalizador} \cdot 0,85 = 92780,02 kg_{SiO_2} \quad (11)$$

$$109152,96 kg_{catalizador} \cdot 0,11 = 12006,83 kg_{H_4SiW_{12}O_{40}} \quad (12)$$

$$109152,96 kg_{catalizador} \cdot 0,02 = 2138,06 kg_{Pd} \quad (13)$$

$$109152,96 kg_{catalizador} \cdot 0,02 = 2138,06 kg_{Se} \quad (14)$$

Como se explicó, más arriba en la introducción, en el proceso de producción del ácido acético a partir de la oxidación directa del etileno, no se forma únicamente ácido acético, además surge una reacción paralela de formación de dióxido de carbono y agua.



Tales reacciones son irreversibles y sus datos cinéticos se muestran en la Tabla 10.

	<b>Reacción 3</b>	<b>Reacción 4</b>
k	$1,762 \cdot 10^{-6}$	$2,1597 \cdot 10^{-10}$
E(kJ/kmol)	23720	74050
T <sub>0</sub> (K)	300	300

Tabla 10: Datos cinéticos reacciones. k: factor pre-exponencial de la constante cinética, E: Energía de activación, T<sub>0</sub>: Temperatura de referencia

Como es lógico la constante cinética es mayor y la energía de activación es menor en la reacción 3, para así favorecer la formación del ácido acético, respecto del agua y del dióxido de carbono.

Después de que hayan tenido lugar las reacciones (3) y (4), los productos junto con reactivos sin reaccionar, salen del reactor, y ambos se pasan por un intercambiador de calor, W6, para enfriarlos hasta 25°C y así hacer que condensen el agua y el ácido acético [1].

### 3.2.5. Flash y purga

Después de enfriar el producto, este pasa a un flash, en el cuál lo gases salen por arriba y los líquidos por debajo, impulsados por una bomba, P1. Esos gases pasan de nuevo a recircularse, pero purgándose antes a un 7%, entrando, otra vez al proceso, junto con el etileno, ya que tienen un 36,9% de etileno el cuál no se puede tirar, al ser un reactivo importante en nuestro proceso, además de suponer, esta operación, un ahorro económico debido al valor del etileno en el mercado, como se verá en el estudio económico.

### 3.2.6. Columna de extracción

A continuación, se pasa a describir la etapa de extracción, representada en la Figura 17.



Los líquidos procedentes del flash, ácido acético y agua, pasan a una columna de extracción líquido-líquido de 6 platos, a través de una bomba P1, en la que con ayuda de un agente extractor, metil-etil-cetona [3], se deshidrata el ácido acético pasando de una composición de agua del 39,1% al 7%. El producto con un 88,7% de ácido acético sale por la parte superior de la columna de extracción, mientras que el agua extraída prácticamente pura sale por la parte inferior, recirculándose, impulsada por una bomba de 1 bar, P2, entrando de nuevo con el agua de entrada.

Es necesario emplear este agente extractor, ya que el agua y el ácido acético tienen puntos de ebullición similares, 100°C y 117,9°C, respectivamente, sus curvas de equilibrio están muy próximas entre sí y se representan en la Figura 18. Por lo tanto para separar el ácido acético del agua se precisa usar un agente extractor, ya que la separación de ambos sería impracticable, por la multitud de platos que se necesitarían [8].

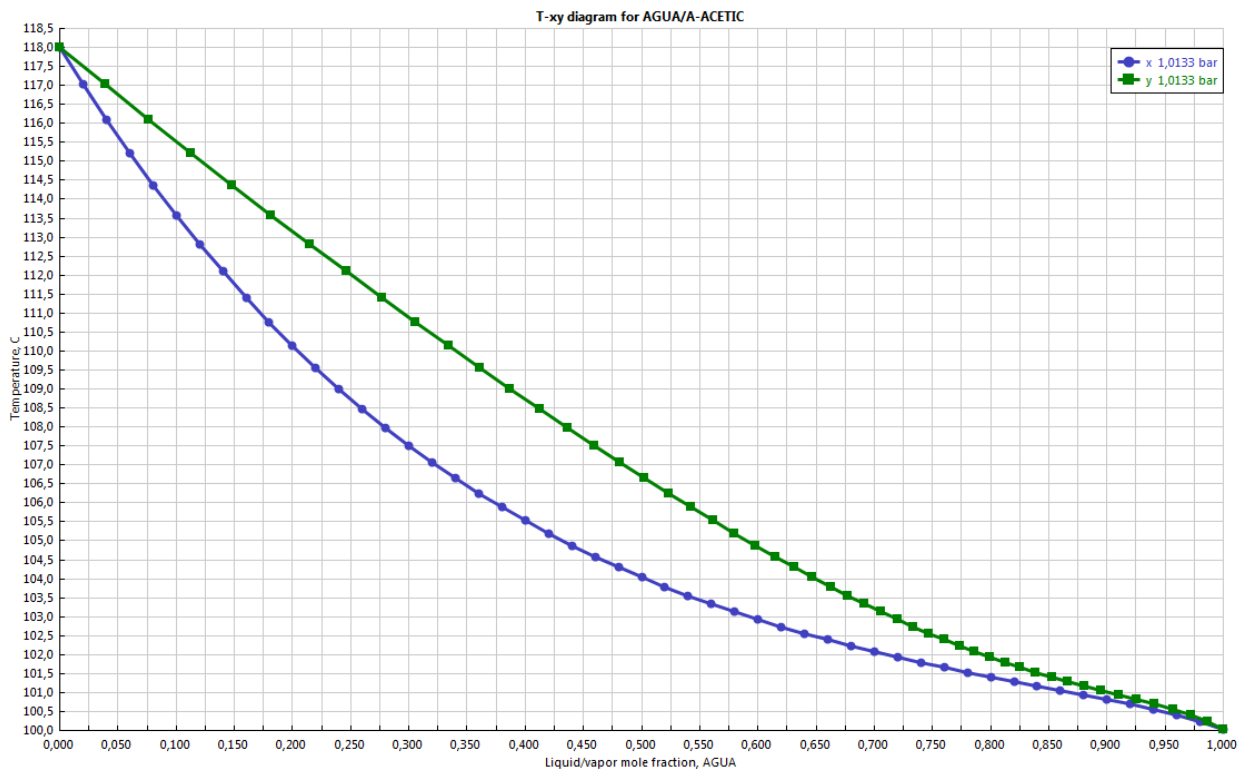


Figura 18: Curvas de equilibrio, agua-acético.

### 3.2.7. Columna de destilación

El producto obtenido en la etapa anterior, impulsado por una bomba, P3, con un 88,7% de ácido acético, pasa ahora a una columna de destilación fraccionada (bloque Radfrac en Aspen Plus), K4. Esta columna será una columna de condensador total, donde todo se obtiene en fase líquida. Se ha dimensionado, haciendo un estudio de especificaciones y un análisis de sensibilidad, hasta obtener la cantidad de ácido acético definida en el título de este trabajo. Así, tras hacer el análisis de sensibilidad, se observa que la etapa de alimentación debe ser introducida, en la columna, por el cuarto plato (Figura 19 y Figura 20).

Row/Case	Status	VARY 1 K4 Q25 FEEDS STAGE	PUR	KG KG/HR
1	OK	1	0,957381	8393,89
2	OK	2	0,983339	9009,32
3	OK	3	0,991021	9217,52
4	OK	4	0,995	9328,12
5	OK	5	0,997201	9390,21
6	OK	6	0,998364	9423,26
7	OK	7	0,998843	9437,12
8	OK	8	0,998974	9441,4
9	OK	9	0,998948	9441,81
10	OK	10	0,998748	9438,52
11	OK	11	0,998105	9425,9
12	OK	12	0,996018	9381,61
13	OK	13	0,989735	9245,48
14	OK	14	0,989735	9245,48
15	OK	15	0,989735	9245,48
16	OK	16	0,989735	9245,48
17	OK	17	0,989735	9245,48

Figura 19: Datos análisis de sensibilidad K4.

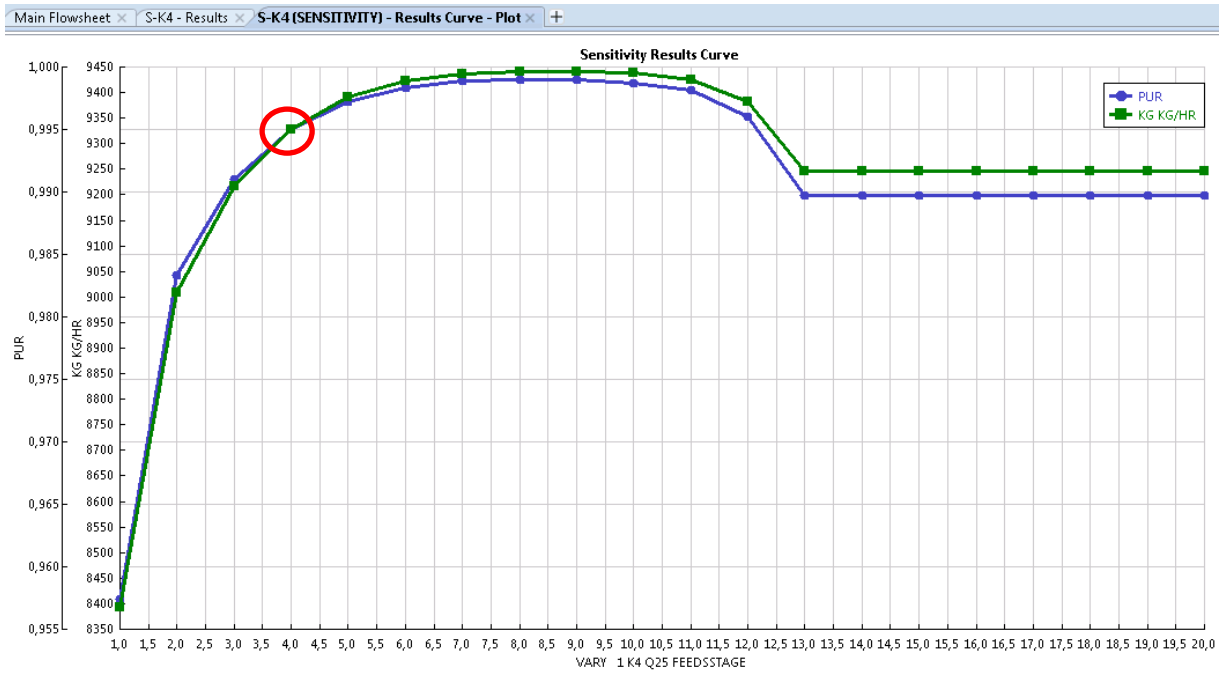


Figura 20: Gráfica análisis de sensibilidad K4.

A continuación, se realiza un diseño de especificaciones a la columna K4 para obtener el flujo de destilado y una relación de reflujo aceptable, ya que con una relación de reflujo elevada se reducirían el número de platos de la columna, pero aumentaría el gasto energético. Teniendo en cuenta estos criterios, se introducen los valores, resultantes del diseño de especificaciones, mostrados en la Figura 21.

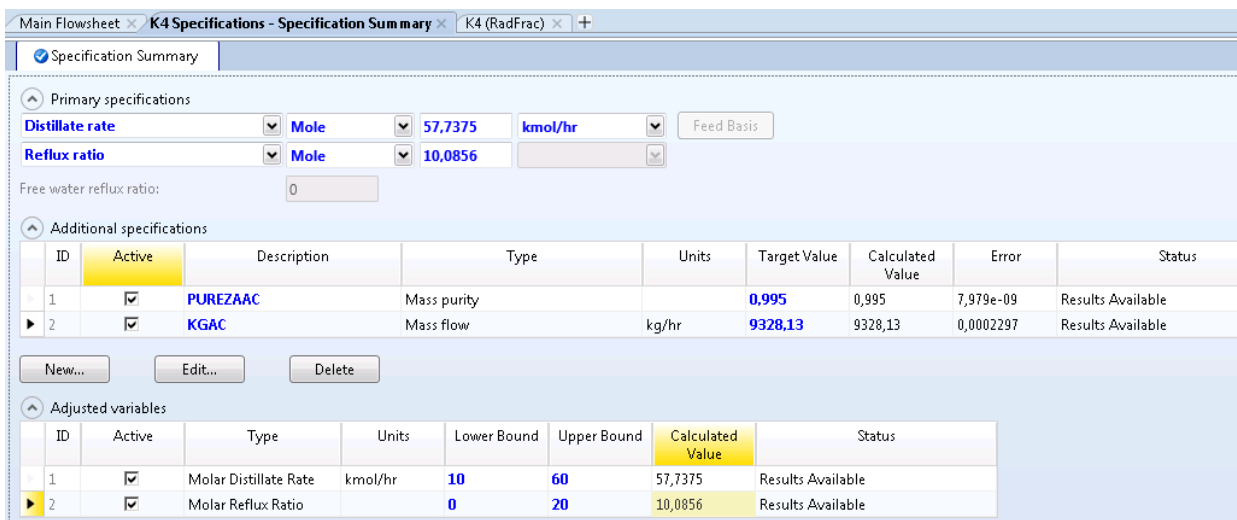


Figura 21: Diseño de especificaciones K4.

Se obtiene ácido acético por la parte inferior de la columna, al tener mayor punto de ebullición, y en la cantidad y pureza deseadas.

El análisis de sensibilidad, da una idea de cuál es la mejor configuración de la columna, para ahorrar en costes, reduciendo el número de platos posibles, siempre persiguiendo la cantidad de producto buscada. Se obtiene como resultado una columna de 15 platos con la alimentación en el cuarto plato.

Por tanto, en esta columna salen, por la parte inferior, 9375 kg/h de ácido acético con un 99,5% de pureza, el objetivo de este TFM, que se explica a continuación:

$$75\,000\text{ t/año} = \frac{75\,000\,000\text{ kg/año}}{8000\text{ h/año}} = 9375\text{ kg/h} \cdot 99,5\% = 9328,13\text{ kg/h} \quad (15)$$

Considerado 8000 horas operativas al año.

Una vez ha salido el ácido acético de la columna, pasa por un intercambiador de calor, W7, para enfriar el producto hasta 25°C, estando listo para su venta.

Además, por la zona superior de la columna se obtiene el destilado, también en fase líquida, una corriente con el 24,8%p de agente extractor, que se va a aprovechar para reducir costes de materias primas en el posterior estudio económico. Por consiguiente con una bomba, P4, ya que es un líquido, se impulsa hacia otra columna de destilación, que se explica en el siguiente apartado.

### 3.2.8. Columna de destilación para el agente extractor y recirculación

Una vez obtenido el producto, la última fase es intentar recuperar recursos para así reducir costes y conseguir mayor viabilidad económica. Por tanto para recuperar la máxima cantidad posible de agente extractor, se implanta otra columna Radfrac, K5, esta vez con un diseño de 30 platos, introduciendo la alimentación por el décimo plato y con un flujo de destilado de 6 kmol/h. Una vez pase la corriente por la columna, obtenemos un producto por la parte superior con el 98,9%p en peso de agente extractor, valor aceptable para ser aprovechado.

El proceso de dimensionado y configuración de esta columna K5, ha sido el mismo que en la columna K4.

La corriente, con el agente extractor recuperado, se introduce de nuevo al proceso con ayuda de una bomba, P5, seguida de un intercambiador de calor, W9, ya que a continuación entra en un mezclador, R6, junto con el agente extractor de entrada, para que así estén ambos a la misma temperatura, 25°C.

También se consigue, por la parte inferior de la columna, una corriente con un 44% de ácido acético diluido en agua, el cual se considerará como un coproducto aprovechable, para el estudio económico. Este coproducto, de igual forma que se hizo con el producto principal, pasa por un intercambiador de calor W8 para tenerlo en condiciones óptimas de temperatura, 25°C.

Cabe destacar que además de este agente extractor, se utilizó previamente otro, descrito en bibliografía [3], isopropilbutiléter, con un punto de ebullición de 108,4°C, entre los puntos de ebullición del agua y del ácido acético. Al encontrarse su temperatura de ebullición entre los principales líquidos a separar, se encontraron muchos problemas, ya que aunque se consiguió el ácido acético como producto, fue imposible, en esta última columna su total separación del coproducto del ácido acético diluido en agua y por tanto su posterior recirculación y aprovechamiento, ya que este tipo de productos tienen un precio bastante elevado, como se observará en el estudio económico con el metiletilcetona. Por esta razón se decidió desechar este agente extractor y elegir el metiletilcetona, el cual tiene un punto de ebullición más favorable para la operación a realizar, 79,62°C. En la Figura 22 se muestra el diagrama ternario de equilibrio para el agua-metiletilcetona-ácido acético, obtenido con Aspen Plus®.

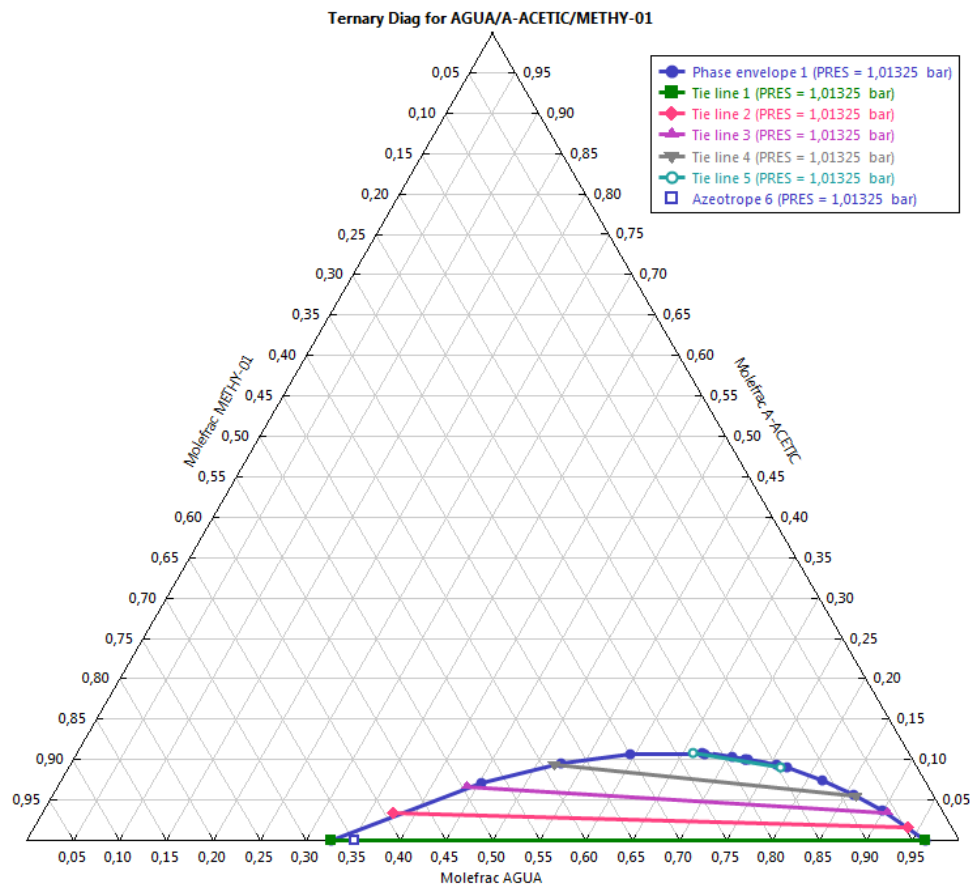


Figura 22: Diagrama ternario agua-metiletilcetona-ácido acético.

### 3.3. Integración energética

En cuanto al proceso de integración energética, la tecnología “Pinch” es una herramienta utilizada para la mejora del diseño de procesos que garantiza un nivel mínimo de energía en el diseño de propuestas de redes de intercambiadores de calor. El análisis “Pinch” se utiliza para estimar los costes energéticos, planteando unos objetivos de coste de capital en una red de intercambiadores de calor, estableciendo el punto “Pinch”. El proceso predice los requerimientos mínimos de energía, el área de transferencia de calor y las unidades, para el diseño dado en el punto “Pinch”. Finalmente diseña una red de intercambiadores de calor que satisfaga estos objetivos.

Por tanto, para maximizar la recuperación de energía o minimizar los requerimientos energéticos, se requiere una apropiada red de intercambio de calor [11], como se muestra en el ejemplo mostrado en la Figura 23.

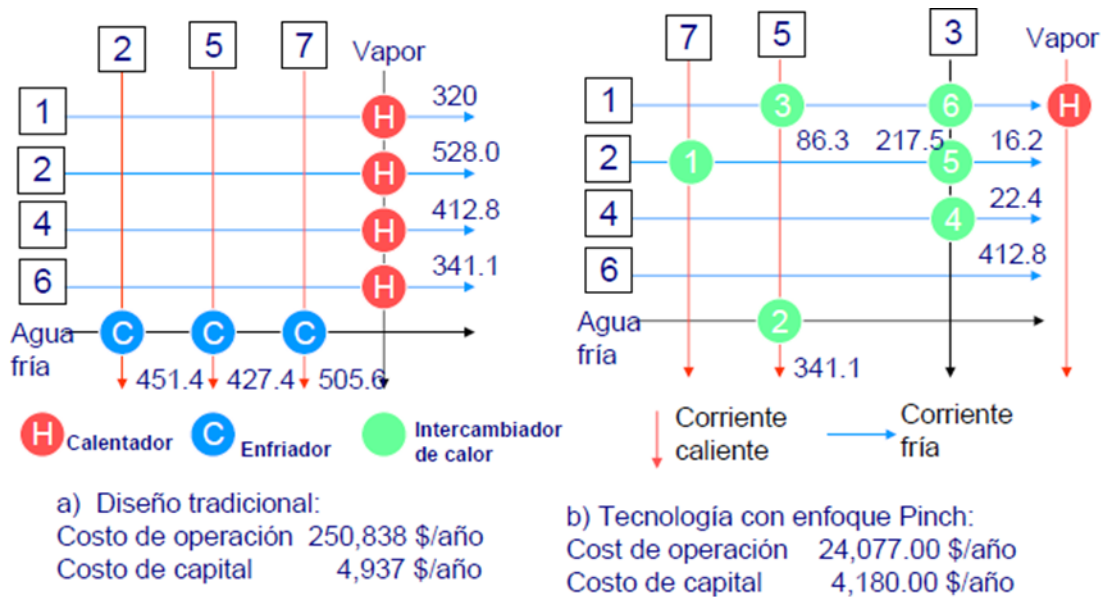


Figura 23: a) solución no-integrada, b) solución integrada.

El punto “pinch” se calcula a partir de las curvas compuestas, las cuales son construidas con los datos de las corrientes (calientes y frías) procedentes del balance de energía térmica del proceso. Estas curvas se obtienen por superposición de las corrientes frías y calientes en una gráfica donde se representan la temperatura frente a la entalpía. Dichas corrientes se separan por la mínima diferencia de temperatura ( $\Delta T_{min}$ ), punto “Pinch”, [9] y [10], ya que una corriente caliente solo puede ser enfriada por el acercamiento mínimo entre las temperaturas del intercambiador, sin que se crucen estas [11], observándose lo expuesto en este párrafo en la Figura 24.

La energía puede ser recuperada donde las curvas se superponen, mientras que las aberturas muestran los requerimientos de calentamiento y enfriamiento [11]. La tecnología “pinch” consiste en combinar las corrientes calientes con las frías para que intercambien calor.

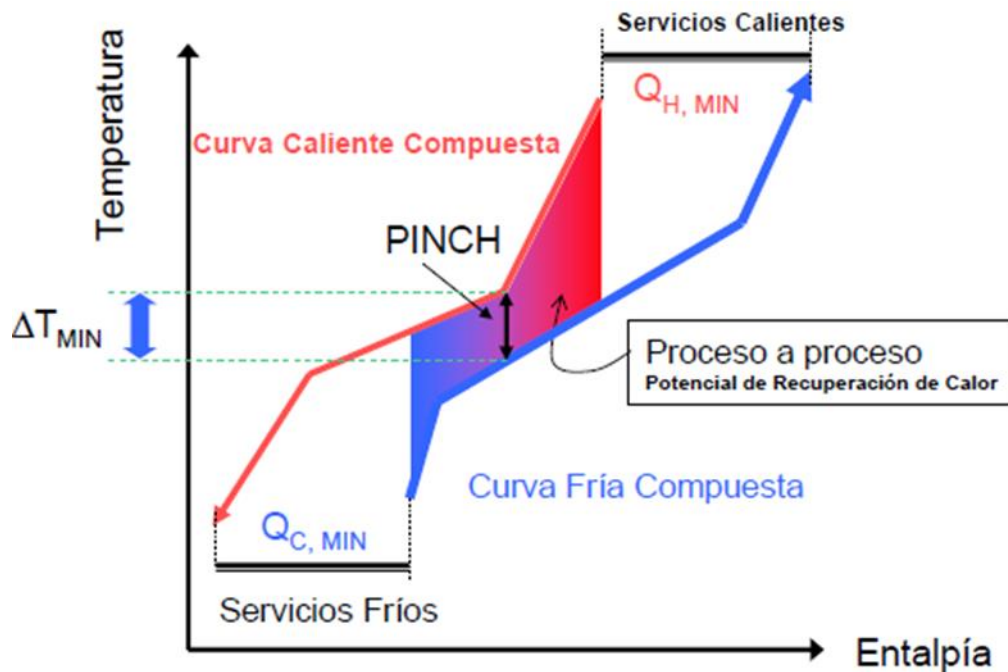


Figura 24: Curvas compuestas.

Figura. Curvas compuestas combinadas, “pinch”: Mínima distancia entre las dos curvas;  $Q_c$ , min: mínima capacidad de enfriamiento requerida por el proceso y entregada por una fuente externa;  $Q_H$ , min: Mínima capacidad de calentamiento requerida por el proceso y entregada por una fuente externa.

La evaluación energética sirve para estimar la cantidad de energía que se consume en forma de calentamiento y enfriamiento en todo el proceso y las posibles propuestas que se podrían llevar a cabo para conseguir una mejora energética.

En primer lugar, se deben establecer una serie de utilidades, en Aspen Plus<sup>®</sup>, que se van a utilizar en los diferentes equipos en los que hay intercambio de calor. En nuestro caso, hemos definido agua para enfriar, con una temperatura de entrada de 15 °C y una temperatura de salida de 20 °C. Para calentar se ha dispuesto un vapor de media presión, de la base de datos del programa Aspen Plus<sup>®</sup>, entrada a 175 °C y salida a 174 °C. Y por último, para equipos que necesitan temperaturas muy frías, los relacionados con la obtención del oxígeno, se utiliza un refrigerante, que también nos ha proporcionado en este caso el programa, desde -200°C hasta -199°C.

Una vez definidas todas las utilidades, se establecen en cada uno de los equipos dependiendo de sus necesidades, identificando si circulan en ellos corrientes frías o calientes y si precisan calentamiento o enfriamiento, y este último hasta que nivel de temperatura, ya que para temperaturas muy bajas se usará refrigerante. A continuación se van a definir estas necesidades.

En la etapa de obtención del oxígeno, a partir del aire, se precisará lo siguiente, mostrando su esquema correspondiente en la Figura 14.

Para el intercambiador W1, la temperatura de su corriente de entrada será de  $312,57^{\circ}\text{C}$  y la de salida  $-171,33^{\circ}\text{C}$ , por lo que para llevar a cabo ese intercambio de calor se utiliza el refrigerante proporcionado por el programa, ya que es el único de los tres con capacidad para llegar a esa temperatura.

En la columna K1, tienen lugar las temperaturas,  $-172,27^{\circ}\text{C}$  y  $-176,63^{\circ}\text{C}$  en el hervidor y condensador respectivamente, por lo que al igual que en el caso anterior, se necesita el uso del refrigerante en el condensador y vapor en el hervidor.

En la siguiente columna K2, se bajan aún más las temperaturas,  $-191,78^{\circ}\text{C}$  y  $-178,07^{\circ}\text{C}$  en el condensador y hervidor respectivamente, para así conseguir la obtención del oxígeno, como se explicó más arriba. Por lo tanto, en este caso se precisa también del refrigerante en el condensador y vapor en el hervidor.

En el caso de los intercambiadores W2 y W3, se sube la temperatura del nitrógeno y oxígeno, respectivamente, que salen de K2 hasta  $25^{\circ}\text{C}$ . Para ello se hará uso del vapor a media presión, ya que es la utilidad definida para calentar.

Finalmente en W4 se necesita volver a calentar, con el vapor a media presión, hasta  $25^{\circ}\text{C}$  ya que, como respuesta del cambio de fase líquida a vapor del oxígeno en W3, este se enfría hasta  $-4,45^{\circ}\text{C}$ .

En el caso de la zona de reacción, suceden los siguientes cambios de temperatura, su esquema aparece en la Figura 15.

En W5 se calientan los reactivos hasta la temperatura de reacción  $150^{\circ}\text{C}$ , para la entrada de los gases al reactor. Por tanto se hace uso del vapor a media presión. En cambio en W6 se enfría hasta  $25^{\circ}\text{C}$ , para la posterior separación líquido-gas.

La siguiente etapa para analizar es la etapa de separación (Figura 17).

En la columna de destilación K4, donde se produce la purificación del ácido acético, se necesita agua en el condensador para enfriar y vapor a media presión en el hervidor para calentar, ya que llega la corriente Q25 a 60,95°C y saldrá Q26 a 116,55°C y Q27 a 97,22°C.

En W7 y W8, utilizamos agua para enfriar el producto y el subproducto, hasta una temperatura de 25 °C.

La columna K5 presenta las mismas necesidades que K4 con Q29 a 98,78°C y Q31 a 79,58°C.

Por último en el intercambiador de calor W9, al venir el agente extractor caliente de la columna K5 se necesita agua para pasarlo a 25 °C, y posteriormente recircularlo de nuevo al proceso.

### 3.4. Estudio económico

Una vez diseñada la simulación y desarrollada su correspondiente integración energética, se pasa a la realización del análisis económico, utilizando los resultados obtenidos en la simulación del proceso junto con otros conceptos como el coste de personal, equipos y servicios, coste de materias primas, precio de venta del producto, impuestos e intereses marcados por la localización. Todos ellos determinarán los flujos de caja (ingresos-costes) y la correspondiente rentabilidad económica. Este análisis económico busca los siguientes resultados, para estudiar la rentabilidad de la inversión [12]:

- 1) El valor actual neto (VAN): es el beneficio total al final de la vida útil del proyecto. Para que la planta de producción de ácido acético sea viable económicamente, el VAN debe ser superior a 0.
- 2) El tiempo de recuperación de la inversión: es el tiempo que tarda en recuperarse la inversión inicial. Para que sea aceptable debe ser menor que la vida útil del proyecto, cuanto más pequeño, mayor será la rentabilidad.
- 3) La tasa interna de retorno (TIR): es el tipo de interés en donde el beneficio de la planta de producción de ácido acético es 0. Debe ser superior al interés

bancario, para que sea una buena inversión. Cuanto mayor sea más rentable será la planta.

Estos conceptos se muestran en la Figura 25.

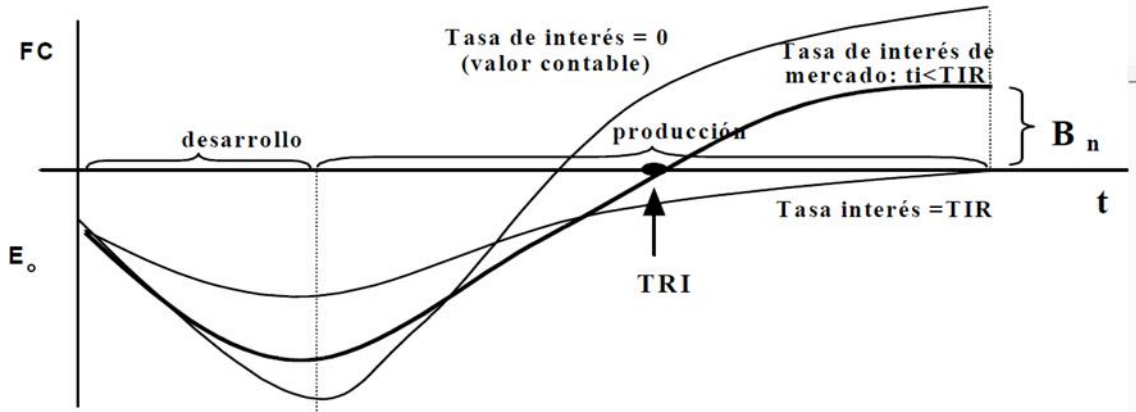


Figura 25: Estudio económico,  $B_n$ : beneficio total, TIR: tasa interna de retorno, TRI: tiempo de recuperación de la inversión, en función de la vida útil del proyecto,  $t$ .

Es momento de realizar un estudio económico al proceso para estudiar su rentabilidad. A partir del programa Aspen Process Economic Analyzer, se van a analizar diferentes escenarios, para estudiar el caso de la viabilidad económica de la planta de producción de ácido acético.

En primer lugar se considerará el producto principal, ácido acético con una pureza del 99,5%, los coproductos ácido acético diluido y nitrógeno, como se definió en la simulación.

Además se analizará un estudio económico sin la venta del nitrógeno, ya que se obtendrá el oxígeno a partir de su compra y no a partir del aire.

Finalmente se realizará una comparativa de los 2 supuestos explicados más arriba para así considerar cual es la opción más viable en términos económicos

El primer paso es establecer la ubicación de la planta, Europa (Figura 26).

Standard Basis - Metric	
Name	Item 1
Process Description	Proven process
Process Complexity	Typical
Process Control	Digital
PROJECT INFORMATION	
Project Location	Europe

Figura 26: Localización planta.

A continuación se definen 3 turnos, ya que será una fabricación continuada (Figura 27).

General Wage Rate/Productivity - Metric		
Name	Units	Item 1
Construction workforce number		1
Construction workforce name		
Number of shifts		3

Figura 27: Número de turnos.

El siguiente paso es establecer, el coste de impuestos e interés, la vida útil del proyecto, el número de horas de operación y las fases presentes en el proceso (Figura 28).

Tax Rate	Percent/period	25
Interest Rate/Desired Rate of Return	Percent/period	5
Economic Life of Project	Period	10
Operating Hours per Period	Hours/period	8.000
Process Fluids		Liquids and Gases

Figura 28: Impuestos, interés y vida útil.

También se introducen las utilidades definidas anteriormente en el análisis de integración energética, cuyos costes aparecen en la Tabla 11.

<b>Utilidad</b>	<b>Precio (\$/tonelada)</b>
<b>Refrigerante</b>	0,08
<b>Agua</b>	0,04
<b>Vapor</b>	40

Tabla 11: Precios utilidades.

Lo siguiente es definir del coste de los salarios de los trabajadores, la electricidad y el agua potable (Figura 29).

Operating Unit Costs - Metric		
Name	Units	Item 1
<b>LABOR UNIT COSTS</b>		
Operator	Cost/Operator/H	20
Supervisor	Cost/Supervisor/H	25
<b>UTILITY UNIT COSTS</b>		
Electricity	Cost/KWH	0,12
Potable Water	Cost/M3	1,8

Figura 29: Precios servicios.

El próximo paso es introducir los costes de las materias primas, siendo estas etileno, agua, el catalizador empleado en la reacción y el agente extractor. Sus precios se detallan en la Tabla 12

<b>Materia Prima</b>	<b>Precio (\$/kg)</b>
<i>Etileno</i>	0,750
<i>Agua</i>	0,0018
<i>Catalizador</i>	763,28
<i>Agente extractor</i>	5,65

Tabla 12: Precios materias primas.

El precio del catalizador se ha calculado según el precio de sus componentes y el porcentaje en peso de cada uno, explicado en el apartado del reactor de la simulación. El precio de cada uno de los componentes del catalizador se muestra en la Tabla 13.

<b>Componente</b>	<b>Precio (\$/kg)</b>	<b>Porcentaje en peso (%)</b>	<b>Precio final en catalizador (\$/kg)</b>
<i>Paladio</i>	38160	2	763,2
<i>Selenio</i>	2,44	2	0,049
<i>Ácido silicotungstónico</i>	0,044	11	0,0048
<i>Sílice</i>	0,027	85	0,023
<b>Total</b>			<b>763,28</b>

Tabla 13: Precios componentes catalizador.

También es necesario introducir el precio de los productos. Los precios se detallan en la Tabla 14.

<b>Producto</b>	<b>Precio (\$/kg)</b>
<i>Ácido acético</i>	1
<i>Ácido acético diluido</i>	0,44
<i>Nitrógeno</i>	0,5

Tabla 14: Precios productos.

Por último, antes de realizar el análisis económico, han de “mapearse” cada uno de los bloques, es decir, indicar cada bloque con que equipo de la realidad se corresponde para que así el programa pueda estimar su coste. Este “mapeado” aparece en la Figura 30: Precios equipos..

Item	User Tag Number	Item Description	Model	No. Ite...	Equipment Cost (USD)	Direct Cost (USD)	Installat
8	K4-tower	K4-tower	TW TOWER		91600	305300	
9	P3	P3	CP CENTRIF		5000	38100	
10	K5-bottoms split	K5-bottoms split	C		0	0	
11	K5-cond	K5-cond	HE TEMA EXCH	1	14400	78500	
12	K5-cond acc	K5-cond acc	HT HORIZ DRUM		14700	97000	
13	K5-overhead split	K5-overhead split	C		0	0	
14	K5-reb	K5-reb	RB U TUBE	1	14600	87500	
15	K5-reflux pump	K5-reflux pump	CP CENTRIF		4900	38000	
16	K5-tower	K5-tower	TW TOWER		174300	405700	
17	W1	W1	HE TEMA EXCH		27900	165900	
19	P4	P4	CP CENTRIF		4600	32100	
20	C1	C1	TW PACKED		86400	288400	
23	P5	P5	CP CENTRIF		4500	30900	
24	W2	W2	HE TEMA EXCH	1	16400	84000	
25	D1-flash vessel	D1-flash vessel	VT CYLINDER		23400	132700	
26	W3	W3	HE TEMA EXCH	1	9000	67000	
28	W4	W4	HE TEMA EXCH	1	8800	66800	
29	P2	P2	CP CENTRIF		4800	36100	
31	K2-bottoms split	K2-bottoms split	C		0	0	
32	K2-cond	K2-cond	HE TEMA EXCH		11200	143000	
33	K2-cond acc	K2-cond acc	HT HORIZ DRUM		12900	145500	
34	K2-overhead split	K2-overhead split	C		0	0	
35	K2-reb	K2-reb	RB U TUBE	1	11300	125800	
36	K2-reflux pump	K2-reflux pump	CP CENTRIF		5000	39800	
37	K2-tower	K2-tower	TW TOWER		611200	977800	
40	W9	W9	HE TEMA EXCH	1	8700	51200	
41	W6	W6	HE TEMA EXCH	1	35400	128100	
42	K1-cond	K1-cond	HE TEMA EXCH		15200	178600	
43	K1-cond acc	K1-cond acc	HT HORIZ DRUM		16500	158000	
44	K1-overhead split	K1-overhead split	C		0	0	
45	K1-reflux pump	K1-reflux pump	CP CENTRIF		6800	43000	
46	K1-tower	K1-tower	TW TOWER		162200	392200	
47	W5	W5	HE TEMA EXCH	1	14900	86300	
48	V1	V1	GC CENTRIF		2921900	3180400	
49	V2	V2	TURTURBOEXP		97200	274400	
50	P1	P1	CP CENTRIF		5300	44100	
51	W7	W7	HE TEMA EXCH	1	14300	79200	
52	W8	W8	HE TEMA EXCH	1	9000	65300	
55	K3	K3	TW TRAYED		134800	440700	
56	R1	R1	MX STATIC		97100	3223800	
57	R2	R2	MX STATIC		1400	40600	
58	R3	R3	MX STATIC		97100	3223800	
59	R4	R4	MX STATIC		140600	4845700	
60	R6	R6	MX STATIC		1400	40600	
61	R5	R5	MX STATIC		82900	2614400	

Figura 30: Precios equipos.

## **4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

### **4.1. Simulación**

A continuación, se representa, en la Figura 31, el esquema general del proceso de simulación desarrollado, como se vio en el apartado anterior de forma detallada, donde además, se puede observar la fase de cada una de las corrientes.

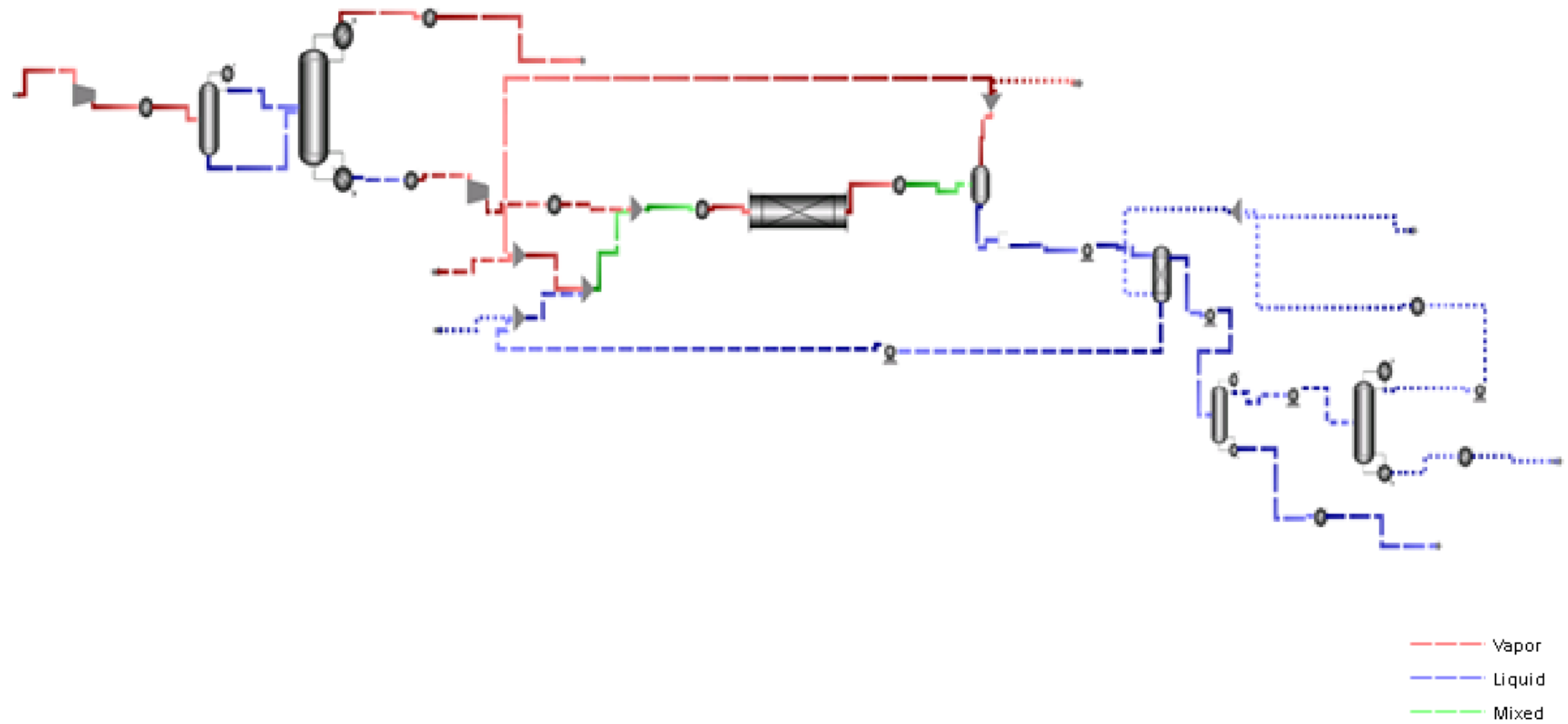


Figura 31: Diagrama general del proceso con fases.

Después del esquema general, se exponen todos los resultados de cada una de las corrientes, en la Tabla 15 referentes a la Figura 14.

	Unidades	AIRE	Q1	Q2	Q3	Q4	Q5	Q6	N <sub>2</sub>	Q7	Q8	O <sub>2</sub>
<b>Desde</b>			V1	W1	K1	K1	K2	K2	W2	W3	V2	W4
<b>A</b>		V1	W1	K1	K2	K2	W2	W3		V2	W4	R4
<b>Fase:</b>		Vapor	Vapor	Vapor	Líquido	Líquido	Vapor	Líquido	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
<b>Flujo másico</b>												
<b>Etileno</b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>O<sub>2</sub></b>	kg/h	6033,374	6033,374	6033,374	8,484	6024,890	42,628	5990,745	42,628	5990,745	5990,745	5990,745
<b>Ácido acético</b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>CO<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>H<sub>2</sub>O</b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>N<sub>2</sub></b>	kg/h	19695,210	19695,210	19695,210	11518,850	8176,365	19695,210	0,000	19695,210	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>	kg/h	335,084	335,084	335,084	44,668	290,416	297,604	37,480	297,604	37,480	37,480	37,480
<b>Metil-etil-cetona</b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Fracción másica</b>												
<b>Etileno</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>O<sub>2</sub></b>		0,231	0,231	0,231	0,001	0,416	0,002	0,994	0,002	0,994	0,994	0,994
<b>Ácido acético</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>CO<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>H<sub>2</sub>O</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>N<sub>2</sub></b>		0,756	0,756	0,756	0,995	0,564	0,983	0,000	0,983	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>		0,013	0,013	0,013	0,004	0,020	0,015	0,006	0,015	0,006	0,006	0,006
<b>Metil-etil-cetona</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Flujo</b>	kg/h	26063,6	26063,6	26063,6	11572,0	14491,6	20035,4	6028,2	20035,4	6028,2	6028,2	6028,2

<b>másico total</b>		70	70	70	00	70	50	26	50	26	26	26
<b>Temperatura</b>	°C	25,000	312,574	-171,339	-176,632	-172,275	-191,983	-178,068	25,000	25,000	-4,450	25,000
<b>Presión</b>	bar	1,000	6,500	6,500	6,000	6,087	1,500	1,677	1,500	1,677	1,000	1,000
<b>Fracción de vapor</b>		1	1	1	0	0	1	0	1	1	1	1
<b>Fracción de líquido</b>		0	0	0	1	1	0	1	0	0	0	0

Tabla 15: Resultados simulación-corrientes obtención oxígeno.

Las temperaturas de licuefacción para los elementos que componen el aire son muy bajas, por lo que para alcanzar la fracción líquida, se juega con una compresión del gas y un intercambio de calor, antes de entrar en las columnas de destilación.

Una vez se enfría lo necesario, el aire se introduce en una serie de columnas, para separar sus elementos gracias su diferencia de volatilidad.

Se disponen 2 columnas de destilación con distintas presiones, alta y baja presión, 6 y 1 bar aproximadamente.

En la columna de alta presión se reduce la temperatura de las corrientes pero no lo suficiente como para separar el nitrógeno del oxígeno.

Por tanto, para obtener el oxígeno, los caudales procedentes de la primera columna, se llevan a la columna de baja presión, para que a partir de la expansión, se enfríen lo necesario para conseguir una separación óptima.

	Unidades	Etileno	H <sub>2</sub> O	Q18	Q23	Q9	Q10	Q11	Q12	Q13	Q14
<b>Desde</b>				R5	P2	R1	R2	R3	R4	W5	C1
<b>A</b>		R1	R2	R1	R2	R3	R3	R4	W5	C1	W6
<b>Fase:</b>		Vapor	Líquido	Vapor	Líquido	Vapor	Líquido	Mezcla	Mezcla	Vapor	Vapor
<b>Flujo másico</b>											
<b>Etileno</b>	kg/h	5274,107	0,000	5445,544	0,000	10719,650	0,000	10719,650	10719,650	10719,650	5871,207
<b>O<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	5990,745	5990,745	0,000
<b>Ácido acético</b>	kg/h	0,000	0,000	332,054	0,012	332,054	0,012	332,091	332,091	332,091	10277,890
<b>CO<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	8117,426	0,000	8117,426	0,000	8117,425	8117,425	8117,425	8751,942
<b>H<sub>2</sub>O</b>	kg/h	0,000	540,458	353,329	4704,448	353,329	5244,907	5598,351	5598,351	5598,351	5858,088
<b>N<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>	kg/h	0,000	0,000	479,490	0,000	479,490	0,000	479,490	516,970	516,970	516,970
<b>Metil-etil-cetona</b>	kg/h	0,000	0,000	0,064	0,024	0,064	0,024	0,088	0,088	0,088	0,088
<b>Fracción másica</b>											
<b>Etileno</b>		1,000	0,000	0,370	0,000	0,536	0,000	0,425	0,343	0,343	0,188
<b>O<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,192	0,192	0,000
<b>Ácido acético</b>		0,000	0,000	0,023	0,000	0,017	0,000	0,013	0,011	0,011	0,329
<b>CO<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,551	0,000	0,406	0,000	0,322	0,260	0,260	0,280
<b>H<sub>2</sub>O</b>		0,000	1,000	0,024	1,000	0,018	1,000	0,222	0,179	0,179	0,187
<b>N<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>		0,000	0,000	0,033	0,000	0,024	0,000	0,019	0,017	0,017	0,017
<b>Metil-etil-cetona</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Flujo másico total</b>	kg/h	5274,107	540,458	14727,910	4704,484	20002,010	5244,942	25247,100	31275,330	31275,330	31276,180

<b>Temperatura</b>	°C	25,000	25,000	25,000	59,417	24,995	55,876	33,476	30,379	150,000	150,000
<b>Presión</b>	bar	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
<b>Fracción de vapor</b>		1,000	0,000	1,000	0,000	1,000	0,000	0,683	0,740	1,000	1,000
<b>Fracción de líquido</b>		0,000	1,000	0,000	1,000	0,000	1,000	0,317	0,260	0,000	0,000

Tabla 16: Resultados simulación-corrientes etapa reacción (1).

	<b>Unidades</b>	<b>Q15</b>	<b>Q16</b>	<b>Q17</b>	<b>Q19</b>	<b>Q22</b>
<b>Desde</b>		W6	D1	R5	B	K3
<b>A</b>		D1	R5		P1	P2
<b>Fase:</b>		Mezcla	Vapor	Vapor	Líquido	Líquido
<b>Flujo másico</b>						
<b>Etileno</b>	kg/h	5871,207	5871,207	425,663	0,000	0,000
<b>O<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ácido acético</b>	kg/h	10277,890	358,010	25,956	9919,878	0,012
<b>CO<sub>2</sub></b>	kg/h	8751,942	8751,942	634,516	0,000	0,000
<b>H<sub>2</sub>O</b>	kg/h	5858,088	380,947	27,619	5477,141	4704,448
<b>N<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>	kg/h	516,970	516,970	37,480	0,000	0,000
<b>Metil-etil-cetona</b>	kg/h	0,088	0,070	0,005	0,019	0,024
<b>Fracción másica</b>						
<b>Etileno</b>		0,188	0,370	0,370	0,000	0,000
<b>O<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ácido acético</b>		0,329	0,023	0,023	0,644	0,000
<b>CO<sub>2</sub></b>		0,280	0,551	0,551	0,000	0,000

<b>H<sub>2</sub>O</b>		0,187	0,024	0,024	0,356	1,000
<b>N<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>		0,017	0,033	0,033	0,000	0,000
<b>Metil-etil-cetona</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Flujo másico total</b>	kg/h	31276,180	15879,147	1151,238	15397,040	4704,484
<b>Temperatura</b>	°C	25,000	25,000	25,000	25,000	59,417
<b>Presión</b>	bar	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
<b>Fracción de vapor</b>		0,488	1,000	1,000	0,000	0,000
<b>Fracción de líquido</b>		0,512	0,000	0,000	1,000	1,000

Tabla 17: Resultados simulación-corrientes etapa reacción (2).

En la Tabla 16 y la Tabla 17, referentes a la Figura 15 hay que destacar, el estado de las fases de los reactivos en el proceso, el oxígeno, O<sub>2</sub>, en estado de vapor y Q11, la corriente procedente de las entradas de etileno y agua con sus respectivas corrientes de recirculación, siendo en este caso mezcla al ser etileno vapor y agua líquida. Finalmente todo entra al reactor, Q13, en estado vapor, como es preciso, gracias a W5 que le proporciona su temperatura de reacción, 150°C.

	Unidades	Q20	Q21	Q24	Q25	Q26	Ácido acético
<b>Desde</b>		P1	R6	K3	P3	K4	W7
<b>A</b>		K3	K3	P3	K4	W7	
<b>Fase:</b>		Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
<b>Flujo másico</b>							
<b>Etileno</b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>O<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ácido acético</b>	kg/h	9919,878	0,222	9920,062	9920,062	9328,130	9328,130
<b>CO<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>H<sub>2</sub>O</b>	kg/h	5477,141	3,992	776,684	776,684	42,540	42,540
<b>N<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Metil-etil-cetona</b>	kg/h	0,019	442,668	442,661	442,661	4,335	4,335
<b>Fracción másica</b>							
<b>Etileno</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>O<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ácido acético</b>		0,644	0,000	0,891	0,891	0,995	0,995
<b>CO<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>H<sub>2</sub>O</b>		0,356	0,009	0,070	0,070	0,005	0,005
<b>N<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Metil-etil-cetona</b>		0,000	0,991	0,040	0,040	0,000	0,000
<b>Flujo másico total</b>	kg/h	15397,040	446,882	11139,410	11139,410	9375,005	9375,005
<b>Temperatura</b>	°C	25,000	24,998	60,949	60,950	116,549	25,000
<b>Presión</b>	bar	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000

<b>Fracción de vapor</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Fracción de líquido</b>		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000

Tabla 18: Resultados simulación-corrientes etapa separación (1).

	<b>Unidades</b>	<b>Q27</b>	<b>Q28</b>	<b>Q29</b>	<b>Q30</b>	<b>Q31</b>	<b>Q32</b>	<b>Q33</b>	<b>Metil-etil-cetona</b>
<b>Desde</b>		K4	P4	K5	W8	K5	P5	W9	
<b>A</b>		P4	K5	W8		P5	W9	R6	R6
<b>Fase:</b>		Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
<b>Flujo másico</b>									
<b>Etileno</b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>O<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ácido acético</b>	kg/h	591,932	591,932	591,710	591,710	0,222	0,222	0,222	0,000
<b>CO<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>H<sub>2</sub>O</b>	kg/h	734,144	734,144	730,152	730,152	3,992	3,992	3,992	0,000
<b>N<sub>2</sub></b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>	kg/h	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Metil-etil-cetona</b>	kg/h	438,326	438,326	21,927	21,927	416,399	416,399	416,399	26,269
<b>Fracción másica</b>									
<b>Etileno</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>O<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ácido acético</b>		0,335	0,335	0,440	0,440	0,001	0,001	0,001	0,000
<b>CO<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>H<sub>2</sub>O</b>		0,416	0,416	0,543	0,543	0,009	0,009	0,009	0,000

<b>N<sub>2</sub></b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Ar</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Metil-etil-cetona</b>		0,248	0,248	0,016	0,016	0,990	0,990	0,990	1,000
<b>Flujo másico total</b>	kg/h	1764,402	1764,402	1343,789	1343,789	420,613	420,613	420,613	26,269
<b>Temperatura</b>	°C	97,226	86,813	98,788	25,000	79,580	78,780	25,000	25,000
<b>Presión</b>	bar	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
<b>Fracción de vapor</b>		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
<b>Fracción de líquido</b>		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000

Tabla 19: Resultados simulación-corrientes etapa separación (2).

Los resultados referentes a la Figura 17, se muestran en la Tabla 18 y la Tabla 19, donde se pueden observar que efectivamente sale el producto esperado 9375 kg/h de ácido acético con una pureza del 99,5%p.

#### 4.2. Integración energética

Una vez definidas todas las utilidades, pasamos a realizar un análisis energético global, para ver el potencial de ahorro de utilidades, como se muestra en la Figura 32 y la Figura 33, que se explica a continuación.

En la Figura 32 aparece el consumo (Actual), objetivo (Target), y ahorro (Available Savings) en forma de flujo, mientras que en la Figura 33 ese flujo se traduce en coste anual. Como se muestra en el cuadro de la Figura 33, se podrían ahorrar el 100% de las utilidades utilizadas para calentar, en cambio se podría llegar a ahorrar un 56,17% de las utilidades frías. Si se pudieran alcanzar los objetivos obtenidos se ahorraría un 74,97 % del gasto actual. Es importante resaltar que estos objetivos son teóricos, los máximos posibles considerando una integración energética del proceso absoluta. Por tanto, a priori, se desconoce si en la práctica son viables ya que habría que ver la red de intercambiadores de calor que permitan una buena integración energética sin tener un coste en dichos equipos desmesurado ni gran complejidad de dicha red.

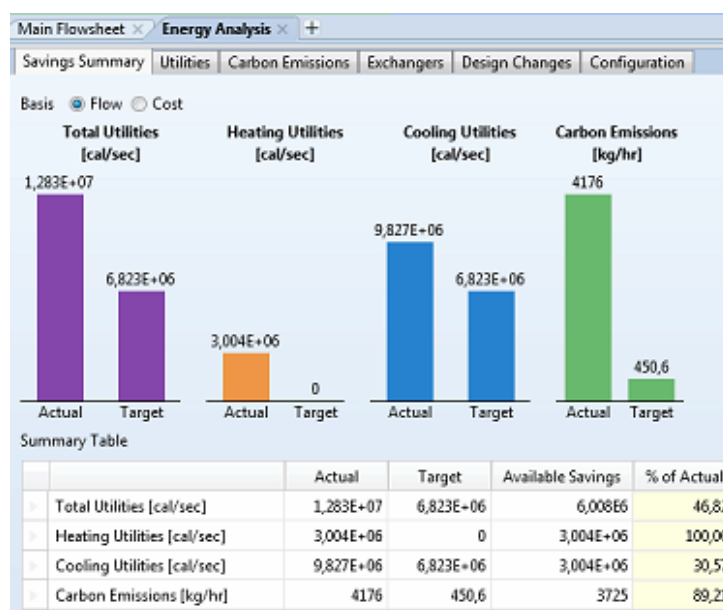


Figura 32: Potencial de ahorro en flujo.

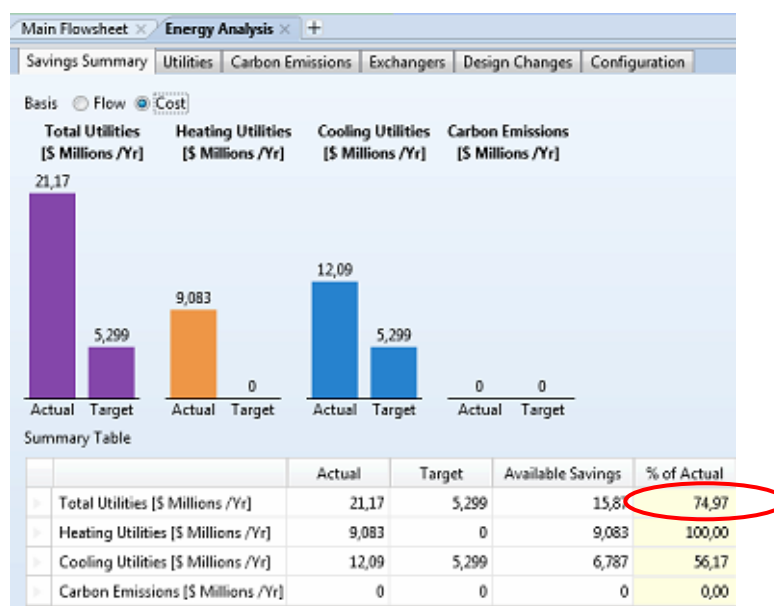


Figura 33: Potencial de ahorro en costes.

Seguidamente a partir de los balances de materia y energía obtenidos en la etapa anterior en el programa Aspen Energy Analyzer, se realiza la integración energética.

En primer lugar se identifican las corrientes calientes y frías y cómo están conectadas a las utilidades en el proceso, en la Figura 34, pudiendo observarse como las corrientes frías se conectan al vapor para calentarse y las corrientes calientes al agua y refrigerante, para enfriarse.

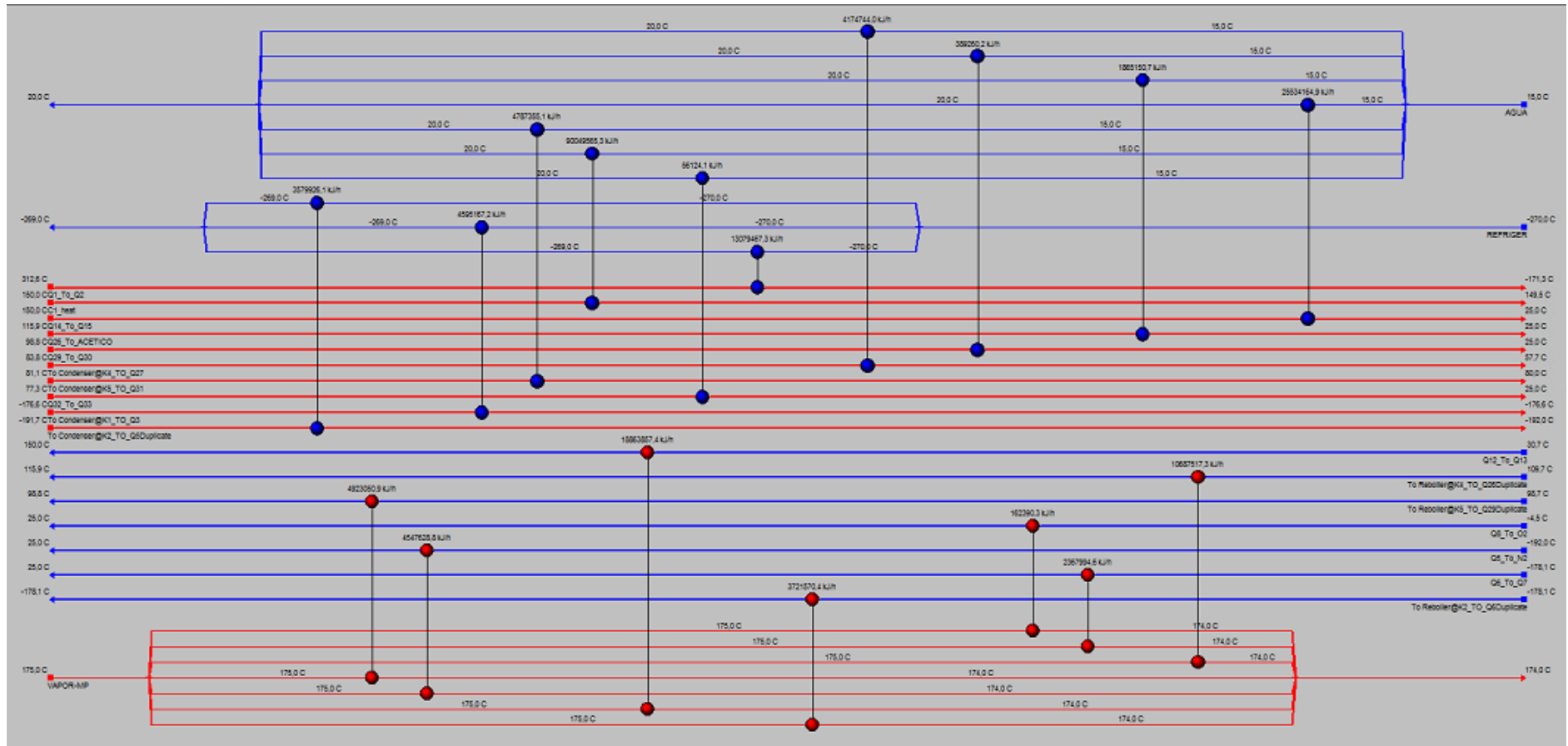


Figura 34: Conexión corrientes-utilidades.

A continuación, en la Figura 35, se muestra el coste capital del diseño que se ha llevado a cabo en este trabajo, según la red de intercambiadores actual, siendo este de 1.300.000 dólares. También se pueden observar el número de unidades, 17, y el área total de transmisión de calor 4548 m<sup>2</sup>. Además se muestran diversos conceptos más, como el coste de las utilidades calientes y frías y sus correspondientes energías consumidas.

Network Cost Indexes			Network Performance		
	Cost Index	% of Target		HEN	% of Target
Heating [Cost/s]	0.2878	INF	Heating [kJ/h]	4.527e+007	INF
Cooling [Cost/s]	0.3830	228.1	Cooling [kJ/h]	1.481e+008	144.0
Operating [Cost/s]	0.6709	399.5	Number of Units	17.00	94.44
Capital [Cost]	1.300e+006	74.49	Number of Shells	26.00	96.30
Total Cost [Cost/s]	0.6841	374.8	Total Area [m2]	4548	80.43

Figura 35: Coste capital red de intercambiadores.

El siguiente paso es establecer  $\Delta T_{min}$  (punto “Pinch”), y en este caso se han estimado 10°C, al igual que la representación de las curvas compuestas a partir de las corrientes calientes y frías, en función de sus temperaturas y sus niveles de entalpía. Todo lo expuesto en este párrafo se muestra en la Figura 36 y la Figura 37.

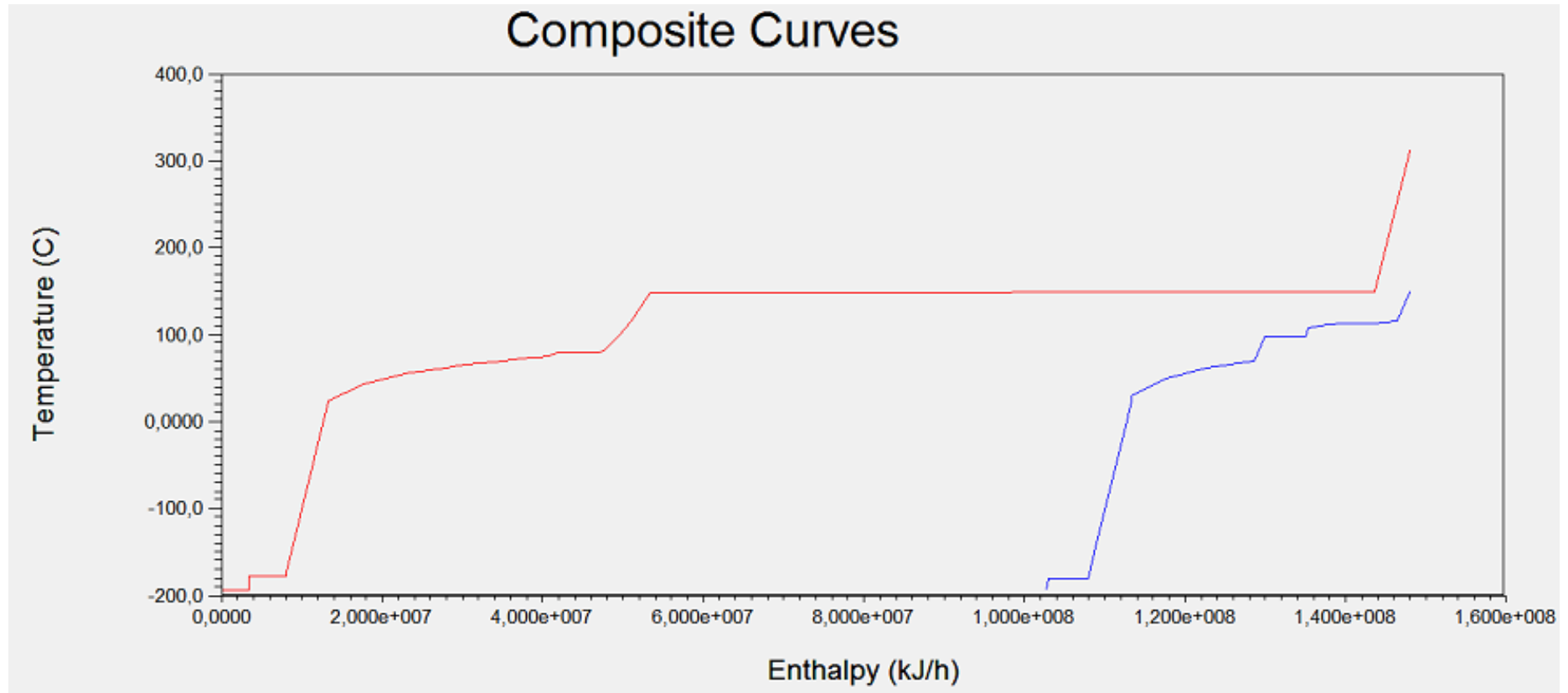


Figura 36: Curvas compuestas diseño red de intercambiadores.

Data	Name	Inlet T [C]	Outlet T [C]	MCp [kJ/C-h]	Enthalpy [kJ/h]	Segm.	HTC [kJ/h-m <sup>2</sup> -C]	Flowrate [kg/h]	Effective Cp [kJ/kg-C]	DT Cont. [C]
Process Streams	Q32_To_Q33	77.3	25.0	...	5,612e+004	...	...	486.6	...	Global
Utility Streams	Q5_To_N2	-192.0	25.0	2,096e+004	4,548e+006	...	68,88	2,004e+004	1,046	Global
Economics	Q8_To_Q2	-4.5	25.0	5514	1,624e+005	...	28,94	6028	0,915	Global
	Q6_To_Q7	-178.1	25.0	...	2,368e+006	...	...	6028	...	Global
	Q12_To_Q13	30.7	150.0	...	1,886e+007	...	...	3,165e+004	...	Global
	Q14_To_Q15	150.0	25.0	...	2,553e+007	...	...	3,165e+004	...	Global
	Q26_To_ACETICO	115.9	25.0	...	1,865e+006	...	...	9374	...	Global
	Q1_To_Q2	312.6	-171.3	2,703e+004	1,308e+007	...	289,66	2,606e+004	1,037	Global
	Q29_To_Q30	98.8	25.0	...	3,893e+005	...	...	1344	...	Global
	To Condenser@K4_TO_Q2'	83.8	57.7	...	4,175e+006	...	...	8004	...	Global
	To Reboiler@K4_TO_Q26D	109.7	115.9	...	1,069e+007	...	...	2,413e+004	...	Global
	To Condenser@K2_TO_Q5I	-191.7	-192.0	...	3,580e+006	...	...	2,131e+004	...	Global
	To Reboiler@K5_TO_Q29D	98.7	98.8	...	4,923e+006	...	...	4750	...	Global
	To Condenser@K1_TO_Q3	-176.6	-176.6	...	4,595e+006	...	...	2,704e+004	...	Global
	To Condenser@K5_TO_Q3'	81.1	80.0	...	4,787e+006	...	...	1,022e+004	...	Global
	To Reboiler@K2_TO_Q6Du	-178.1	-178.1	...	3,722e+006	...	...	2,409e+004	...	Global
	C1_heat	150.0	149.5	1,801e+006	9,005e+007	...	720,00	...	...	Global
	"New"									

DTmin 10,00 C

Figura 37: Temperatura-entalpía corrientes.

Una vez, conocidas las curvas compuestas, el siguiente paso es realizar una propuesta de mejora, combinando entre sí las corrientes calientes y frías, reduciendo el gasto energético que supone enfriarlas o calentarlas con algunas de las utilidades. A la hora de obtener las propuestas solo se ha permitido el intercambio de calor entre dos corrientes para evitar complejidad en la red de intercambiadores de calor. La propuesta proporcionada por el programa es la representada en la Figura 38, en la cual solo se precisa calentar una corriente fría, con un agente externo (vapor). Como se puede ver además en la Figura 36, que la mínima capacidad de calentamiento,  $Q_{H, \min}$ , es menor que la mínima capacidad de enfriamiento,  $Q_{C, \min}$ .

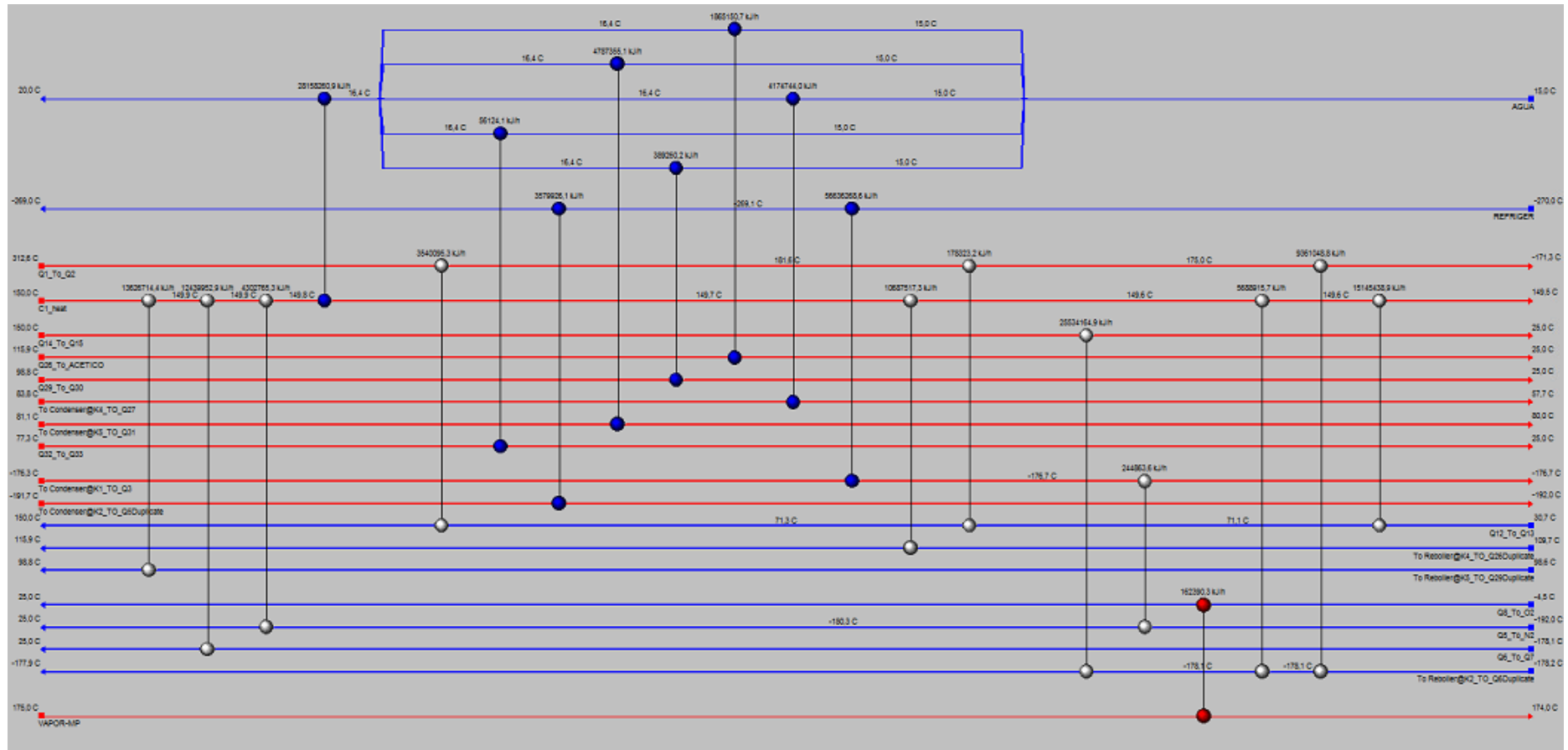


Figura 38: Propuesta integrada red de intercambiadores.

Además esta propuesta ha supuesto un ahorro energético en las utilidades frías y calientes y en el área de transmisión de calor. También, como consecuencia de lo que se ha explicado en el párrafo anterior, se ha reducido el coste de las utilidades calientes. Los valores del nuevo diseño propuesto, se muestran en la Figura 39.

Network Cost Indexes			Network Performance		
	Cost Index	% of Target		HEN	% of Target
Heating [Cost/s]	1.032e-003	INF	Heating [kJ/h]	1.624e+005	INF
Cooling [Cost/s]	0.9298	99.81	Cooling [kJ/h]	9.965e+007	100.2
Operating [Cost/s]	0.9309	99.92	Number of Units	20.00	111.1
Capital [Cost]	1.309e+006	88.38	Number of Shells	26.00	123.8
Total Cost [Cost/s]	0.9442	100.0	Total Area [m <sup>2</sup> ]	4238	88.88

Figura 39: Coste capital red de intercambiadores propuesta integrada.

### 4.3. Estudio económico

Una vez definidos todos los aspectos relevantes en el análisis económico, se pasa a realizar dicho análisis y los resultados se muestran a continuación. En primer lugar se representan los costes en la Tabla 20, en la cual se puede observar que el coste total de producción es de 94,03 millones de euros al año, siendo un 70,74% las materias primas. El coste por año de cada una de las materias primas se detalla en la Tabla 21 y la Figura 40.

Además se puede observar en la Tabla 20: Costes., que la planta de producción del ácido acético va a ser rentable, tal y como se ha diseñado en la simulación y con las consideraciones tenidas en cuenta, ya que su TIR es de 63,07%, el periodo de recuperación es de 3,11 años y el VAN, al final de la vida útil del proyecto (10 años), es 309,35 millones de euros.

<b>Concepto</b>	<b>M.\$/año</b>	<b>M.€/año</b>	<b>%</b>
<b>Coste total materias primas</b>	75,58	66,51	70,74
<b>Coste total utilidades</b>	18,65	16,41	17,46
<b>Coste total laboral</b>	1,48	1,30	1,39
<b>Coste total mantenimiento</b>	0,23	0,20	0,21
<b>Contingencias</b>	0,37	0,33	0,35
<b>Gastos generales</b>	0,85	0,75	0,80
<b>Costes de administración</b>	7,77	6,84	7,28
<b>Depreciación</b>	1,91	1,68	1,79
<b>Total</b>	106,85	94,03	100,00
<b>Coste total proyecto</b>	48,11	42,34	
<b>TIR(%)</b>	63,07		
<b>Índice de rentabilidad</b>	1,33		
<b>Periodo de recuperación(años)</b>	3,11		
<b>VAN(M.\$)</b>	351,53	309,35	

Tabla 20: Costes.

<b>Materia prima</b>	<b>Coste (M.\$/año)</b>	<b>Coste (M.€/año)</b>
Metil-etil-cetona	1,19	1,044
Catalizador	42,74	37,61
Agua	0,0078	0,0068
Etileno	31,64	27,85

Tabla 21: Costes materias primas anuales.

Además se puede ver el porcentaje que tiene cada materia prima sobre el coste total de las materias primas en la Figura 40, donde el catalizador tiene el mayor porcentaje de este, seguido del etileno. Esto se debe al precio del catalizador, ya que es muy elevado por contener paladio, además el etileno es el reactivo principal y también tiene un coste elevado.

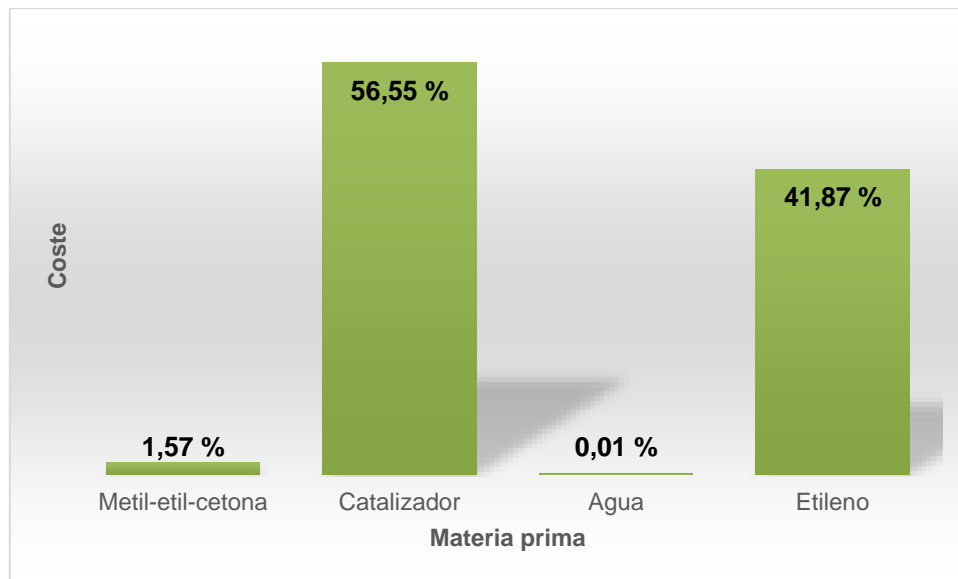


Figura 40: Porcentaje de costes anuales de las materias primas.

También es importante resaltar los ingresos que se obtienen por las ventas de productos al año y que porcentaje tiene cada producto. Estos ingresos aparecen en la Tabla 22. Al ser el total de las ventas mayor a los costes totales, la planta es rentable, como ya se adelantó más arriba.

Producto	Venta (M.\$/año)	Venta (M.€/año)
Nitrógeno	80,14	70,52
Acético diluido	4,73	4,16
Ácido Acético	75,00	66,00
<b>Total</b>	<b>159,87</b>	<b>140,69</b>

Tabla 22: Ventas productos anuales.

El nitrógeno es el producto con más porcentaje en las ventas, seguido muy de cerca del producto principal, ácido acético, esto da un adelanto a la probabilidad de que la planta no sea rentable en el segundo caso a analizar, cuando no haya venta de nitrógeno, que será explicado más adelante. Lo explicado en este párrafo se refleja en la Figura 41.

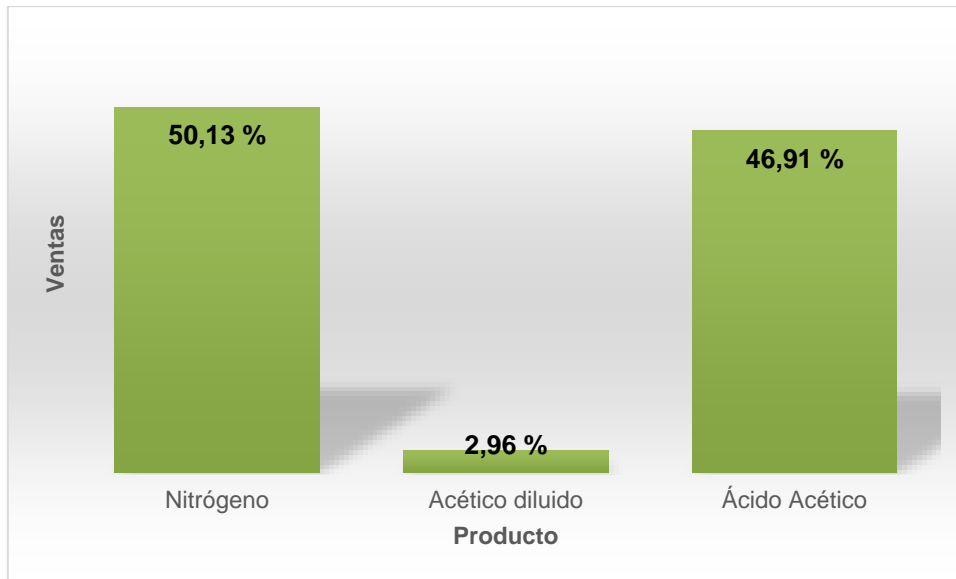


Figura 41: Porcentaje de ventas anuales de productos.

En la Figura 42 se representa el VAN en cada periodo, observándose además cuando tiene lugar el periodo de recuperación de la inversión (3,11 años).

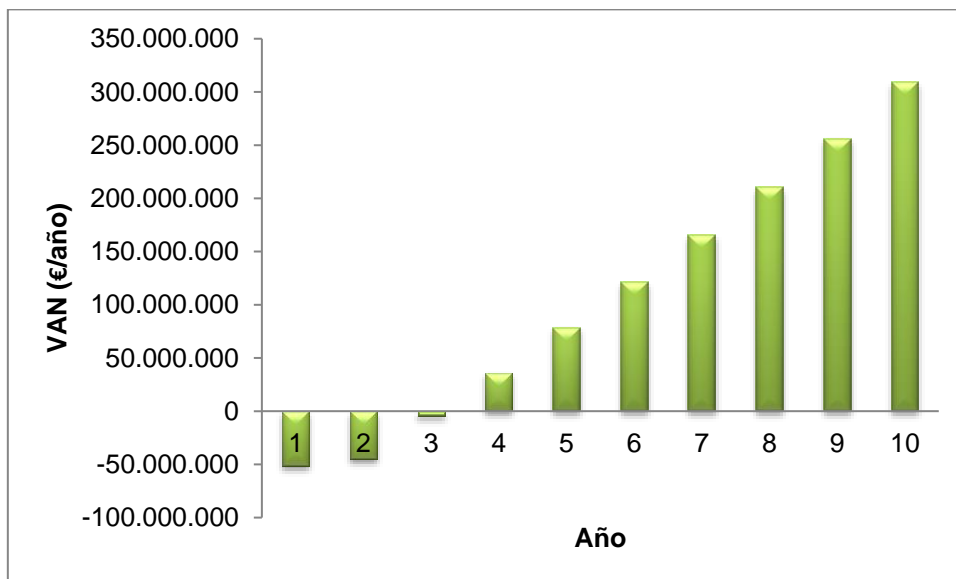


Figura 42: VAN.

A continuación se va a estudiar la viabilidad económica en el caso en el cual se compra el oxígeno, no se obtiene a partir del aire y no se vende el nitrógeno. No se tienen en cuenta los equipos usados en la obtención del oxígeno, por lo cual

no supondrían ningún coste al no existir, ni se emplearían utilidades en ellos, estos son V1, W1, K1, K2, W2, W3, V2 y W4.

En este caso, se comprará el oxígeno a un valor de 0,5 \$/kg y los resultados son los siguientes.

En primer lugar se presentan los costes en la Tabla 23, en cual ya se observa que la planta en este caso no será rentable al haber aumentado los costes totales, debido principalmente al aumento de costes de materias primas, ya que en este caso el oxígeno se compra, no se obtiene a partir del aire. Esta escasez de rentabilidad también se puede observar en el TIR y VAN.

<b>Concepto</b>	<b>M.\$/año</b>	<b>M.€/año</b>	<b>%</b>
<b>Coste total materias primas</b>	99,70	87,73	84,13
<b>Coste total utilidades</b>	6,14	5,41	5,18
<b>Coste total trabajos</b>	1,16	1,02	0,98
<b>Coste total mantenimiento</b>	0,06	0,05	0,05
<b>Contingencias</b>	0,29	0,26	0,24
<b>Gastos generales</b>	0,61	0,54	0,51
<b>Costes de administración</b>	8,64	7,60	7,29
<b>Depreciación</b>	1,91	1,68	1,61
<b>Total</b>	118,51	104,29	100,00
<b>Coste total del proyecto</b>	35,53	31,27	
<b>TIR (%)</b>	0,00		
<b>Índice de rentabilidad</b>	0,69		
<b>Periodo de recuperación (años)</b>	0,00		
<b>VAN (M.\$)</b>	-312,91	-275,36	

Tabla 23: Costes segundo caso.

En este caso el coste de cada materia prima se muestra en la Tabla 24 y el porcentaje de cada uno sobre el total en la Figura 43, en donde se observa que aunque el oxígeno esté en tercer lugar tiene un porcentaje elevado, razón por la que han aumentado los costes, a pesar de que se haya reducido el número de equipos y por tanto de utilidades, trabajos y mantenimiento.

<b>Materia prima</b>	<b>Coste (M.\$/año)</b>	<b>Coste (M.€/año)</b>
Oxígeno	24,11	21,22
Metil-etil-cetona	1,19	1,04
Catalizador	42,74	37,61
Agua	0,01	0,01
Etileno	31,64	27,85

Tabla 24: Costes anuales materias primas segundo caso.

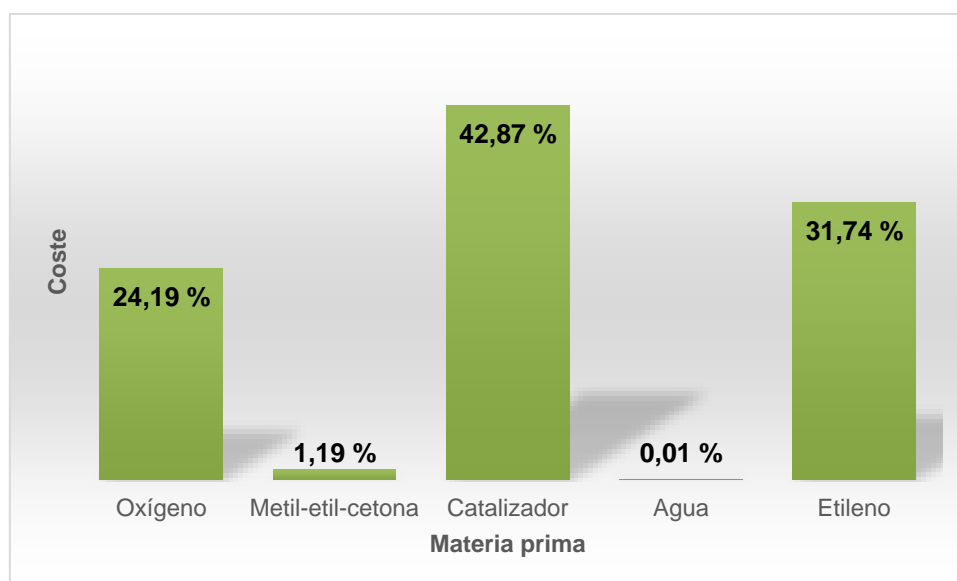


Figura 43: Porcentaje de costes anuales de las materias primas segundo caso.

En este escenario, las ventas se han reducido considerablemente, ya que anteriormente el nitrógeno tenía un alto porcentaje en estas. Las ventas de productos por año se muestran en la Tabla 25.

<b>Producto</b>	<b>Coste (M.\$/año)</b>	<b>Coste (M.€/año)</b>
Ácido acético	74,99	65,99
Acético diluido	4,73	4,16
<b>Total</b>	<b>79,73</b>	<b>70,16</b>

Tabla 25: Ventas anuales de productos segundo caso.

El mayor porcentaje, y prácticamente el total, de las ventas, ahora sí, es el producto principal, ácido acético (Figura 44), a pesar de que esta planta no sea rentable con las consideraciones que se han tomado, en este trabajo.

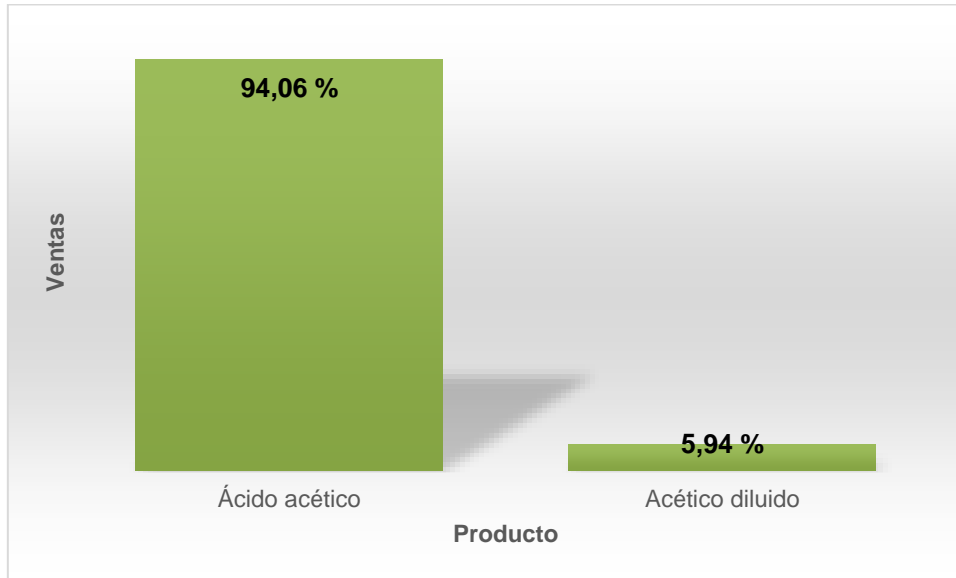


Figura 44: Porcentaje de ventas anuales de productos segundo caso.

El VAN en cada año, se refleja en la Figura 45, en donde no solo, se puede observar que la planta no es rentable, sino que además disminuye su valor actual neto por año, siendo mínimo al final de la vida útil del proyecto.

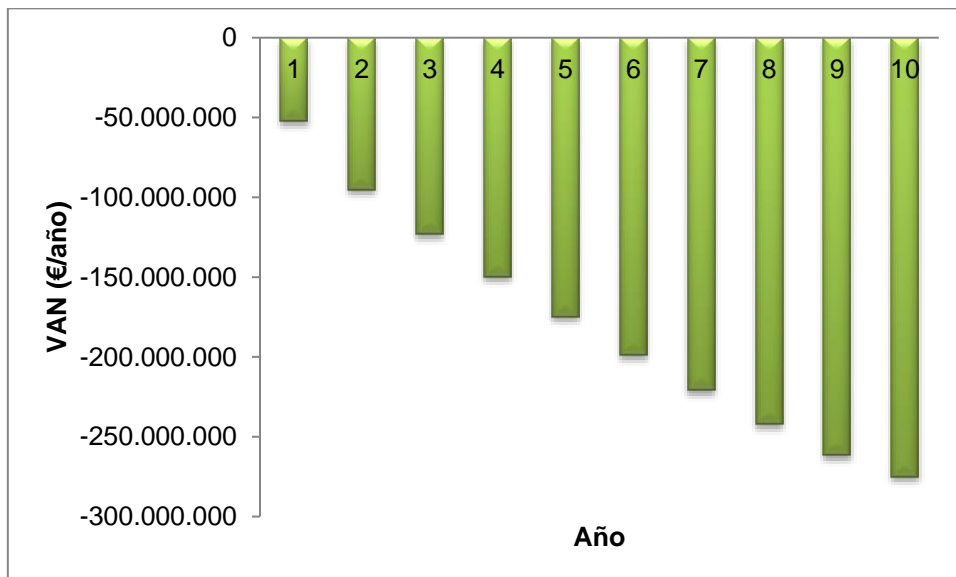


Figura 45: VAN segundo caso.

En la Figura 46, se comparan los dos escenarios propuestos donde el coste total y de materias primas aumentan, mientras que el de las utilidades disminuye, al requerir los equipos encargados de la obtención del oxígeno, gran cantidad de éstas, ya que como se vio en el análisis energético, necesitaba temperaturas muy bajas. Además disminuyen las ventas de productos, el porcentaje que tenía en éstas el nitrógeno, 50,13%.

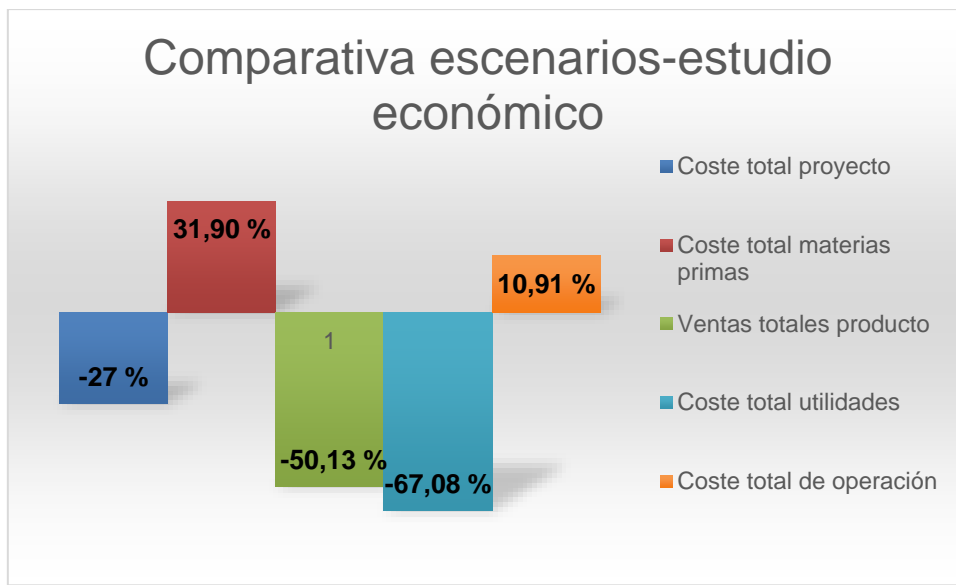


Figura 46: Comparativa escenarios.

Una de las soluciones, propuestas como trabajo futuro, sería estudiar la rentabilidad en el caso de aumentar la vida útil del catalizador, al ser la materia prima más cara, aunque también habría que tener en cuenta que podría dejar de ser efectivo en el momento en el que se empezara a llenar de impurezas, motivo por el cual se decidió darle una vida útil de un año.

## 5. CONCLUSIONES

Se ha elaborado una simulación del proceso de producción de ácido acético a partir de la oxidación directa del etileno, obteniendo los valores óptimos en cada una de las etapas para buscar el producto final deseado, además de un ahorro en energético y económico. Para ello se han considerado como subproductos, el ácido acético diluido y el nitrógeno en estado gaseoso, a partir de la purificación del oxígeno procedente del aire. Otra forma de ahorro considerada ha sido el aprovechamiento de todas las materias primas que intervienen en este proceso, como el etileno, agua y el agente extractor, metiletilcetona. Además, se han dimensionado los equipos optimizando su diseño, una vez cumplidas las necesidades del producto, objeto de este trabajo.

Después de realizar la evaluación energética al proyecto, en la cual se han utilizado agua y refrigerante para enfriar y vapor a media presión en los distintos equipos, el potencial máximo de ahorro sería del 74,97% del gasto actual.

Como conclusión cabe destacar que este proyecto es rentable tal y como se ha planteado, con un periodo de recuperación de 3,11 años, en cambio si estudiamos la posibilidad de comprar oxígeno en lugar de obtenerlo a partir del aire, deja de ser rentable, porque aumenta el coste de materias primas mientras la venta de productos disminuye al tener gran porcentaje el nitrógeno en éstos, a pesar de que nuestro producto principal es ácido acético.

## 6. BIBLIOGRAFÍA

[1] Sano, Uchida and Wakabayashi. (1999). A new process for acetic acid production by direct oxidation of ethylene. *Catalysis Surveys from Japan*, 3, 55-60.

[2] Aspen Plus®. How to model an Air Separation process.

[3] Kamal. I.M. Al-Malah.(2017). Chemical Engineering applications. Wiley.

[4] AENOR. (Septiembre 2001). Norma Española UNE-EN ISO 10628. Diagrama de flujo de plantas de proceso. Reglas generales.

[5] Suzuki et al. (1995). Process for producing acetic acid, United States patent number 5405996.

[6] New Jersey department of health and senior service. (2007). Hoja informativa sobre sustancias peligrosas.  
<http://www.dcne.ugto.mx/Contenido/CCESH/Fichas%20Seguridad/Oxigeno.pdf>.

[7] Cerrada Martínez, Pablo. (Julio 2017). Diseño y análisis de una planta de separación de aire. Universidad Politécnica de Madrid.

[8] Beltran y Monesterolo. (Consultado noviembre 2018). Simulación del proceso de deshidratación del ácido acético mediante destilación azeotrópica. Universidad Regional Villa María, Universidad Tecnológica Nacional.

[9] Vicente Morales, Yernier Omar. (2008). Aplicación del Aspen Plus en el análisis de la Integración energética en la papelera Damují. Universidad central "Marta Abreu" de Las Villas.

[10] Visbal Arteta, Eduver de Jesús y Proaño Avila, Jaime Frank. (2014) Analisis de integración energética por el método pinch de la unidad de destilación primaria de la refinería de Talara-Perú. Universidad de San Buenaventura Seccional Cartagena.

[11] Velazquez, Miguel. (2005). Análisis pinch de redes. Texas A&M University.

[12] Villamil García y García Hernandez. (2003). Introducción al proyecto de ingeniería.

[13] Sánchez Levoso, Ana. (Junio 2016). Modelado del proceso de extracción de ácido acético con recuperación del disolvente orgánico. Universidad politécnica de Madrid.

[14] Grand View Research. (Julio 2015). Acetic Acid Market Analysis by Application and Segments Forecasts to 2022.

<https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/acetic-acid-market>.

[15] Espínola Lozano, Francisco. (2015). Tutorial de Aspen Plus, Introducción y modelos simples de operaciones unitarias. Universidad de Jaén.

[16] Coininvest. (Consultado enero 2019). Precio del paladio.

<https://www.coininvest.com/es/graficos/precio-del-paladio/>.

[17] Quiminet. (Consultado enero 2019) Precio del Sílice.

<https://www.quiminet.com/productos/silice-2300471713/precios.htm>

[18] Quiminet. (Consultados enero 2019). Precio del Selenio.

<https://www.quiminet.com/productos/selenio-435231084/precios.htm>

[19] Quiminet. (Consultado en enero 2019). Precio del Etileno.

<https://www.quiminet.com/productos/etileno-212483503/precios.htm>

[20] Letslab. (Consultado enero 2019). Metiletilcetona.

<https://www.letslab.es/metil-etil-cetona.lab>

[21] Quiminet (Consultado enero 2019), Precio del ácido acético.

<https://www.quiminet.com/productos/acido-acetico-industrial-1560168535/precios.htm>

[22] Alibaba (Consultado enero 2019). Ácido silicotungstónico.

[https://www.alibaba.com/product-detail/Lowest-PriceSilicotungsticAcid\\_50040754143.html?spm=a2700.7724838.2017115.14.692e2fb44SArnV](https://www.alibaba.com/product-detail/Lowest-PriceSilicotungsticAcid_50040754143.html?spm=a2700.7724838.2017115.14.692e2fb44SArnV)

## 7. ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Propiedades físicas del etileno. ....	16
Tabla 2: Propiedades físicas del oxígeno. ....	17
Tabla 3: Propiedades físicas del agua. ....	18
Tabla 4: Propiedades físicas del argón. ....	19
Tabla 5: Propiedades físicas del nitrógeno. ....	20
Tabla 6: Propiedades físicas del metil-etil-cetona. ....	21
Tabla 7: Propiedades físicas del dióxido de carbono. ....	22
Tabla 8: Propiedades físicas del ácido acético. ....	23
Tabla 9: Características del catalizador. ....	31
Tabla 10: Datos cinéticos reacciones ....	33
Tabla 11: Precios utilidades. ....	47
Tabla 12: Precios materias primas. ....	47
Tabla 13: Precios componentes catalizador. ....	48
Tabla 14: Precios productos. ....	48
Tabla 15: Resultados simulación-corrientes obtención oxígeno. ....	54
Tabla 16: Resultados simulación-corrientes etapa reacción (1). ....	57
Tabla 17: Resultados simulación-corrientes etapa reacción (2). ....	58
Tabla 18: Resultados simulación-corrientes etapa separación (1). ....	61
Tabla 19: Resultados simulación-corrientes etapa separación (2). ....	62
Tabla 20: Costes. ....	71
Tabla 21: Costes materias primas anuales. ....	71
Tabla 22: Ventas productos anuales. ....	72
Tabla 23: Costes segundo caso. ....	74
Tabla 24: Costes anuales materias primas segundo caso. ....	75
Tabla 25: Ventas anuales de productos segundo caso. ....	75

## 8. ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Estructura del ácido acético. ....	6
Figura 2: Demanda mundial del ácido acético en 2014 [13]. ....	9
Figura 3: Evolución del mercado del ácido acético 2012-2022 [14]. ....	10
Figura 4: Diagrama de bloques. ....	14
Figura 5: Metodología Seguida. ....	15
Figura 6: Estructura del etileno. ....	16
Figura 7: Estructura del oxígeno. ....	17
Figura 8: Estructura del agua. ....	18
Figura 9: Estructura del nitrógeno. ....	19
Figura 10: Estructura metil-etil-cetona. ....	20
Figura 11: Estructura del dióxido de carbono. ....	21
Figura 12: Estructura del ácido acético. ....	22
Figura 13: Diagrama general de la simulación. ....	24
Figura 14: Diagrama obtención del oxígeno. ....	26
Figura 15: Diagrama etapa reacción. ....	29
Figura 16: Dimensiones del reactor. ....	32
Figura 17: Diagrama etapa de separación. ....	34
Figura 18: Curvas de equilibrio, agua-acético. ....	35
Figura 19: Datos análisis de sensibilidad K4. ....	36
Figura 20: Gráfica análisis de sensibilidad K4. ....	37
Figura 21: Diseño de especificaciones K4. ....	37
Figura 22: Diagrama ternario agua-metiletilcetona-ácido acético. ....	40
Figura 23: a) solución no-integrada, b) solución integrada. ....	41
Figura 24: Curvas compuestas. ....	42
Figura 25: Estudio económico ....	45
Figura 26: Localización planta. ....	46
Figura 27: Número de turnos. ....	46
Figura 28: Impuestos, interés y vida útil. ....	46
Figura 29: Precios servicios. ....	47
Figura 30: Precios equipos. ....	49
Figura 31: Diagrama general del proceso con fases. ....	51
Figura 32: Potencial de ahorro en flujo. ....	63

Figura 33: Potencial de ahorro en costes. ....	64
Figura 34: Conexión corrientes-utilidades. ....	65
Figura 35: Coste capital red de intercambiadores. ....	66
Figura 36: Curvas compuestas diseño red de intercambiadores.....	67
Figura 37: Temperatura-entalpía corrientes. ....	68
Figura 38: Propuesta integrada red de intercambiadores.....	69
Figura 39: Coste capital red de intercambiadores propuesta integrada. ....	70
Figura 40: Porcentaje de costes anuales de las materias primas.....	72
Figura 41: Porcentaje de ventas anuales de productos.....	73
Figura 42: VAN. ....	73
Figura 43: Porcentaje de costes anuales de las materias primas segundo caso. ....	75
Figura 44: Porcentaje de ventas anuales de productos segundo caso. ....	76
Figura 45: VAN segundo caso.....	76
Figura 46: Comparativa escenarios.....	77