

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

FACULTAD DE INGENIERÍA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



Diseño y selección de equipo del proceso de producción de propilenglicol a partir de glicerina, como subproducto de la producción de biodiesel, a presión y temperatura moderada
(150-250psi y 150/250°C)

Diego Rolando Sandoval Lemus

Guatemala

2009

Diseño y selección de equipo del proceso de producción de propilenglicol a partir de glicerina, como subproducto de la producción de biodiesel, a presión y temperatura moderada
(150-250psi y 150-250°C)

UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

FACULTAD DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

Diseño y selección de equipo del proceso de producción de propilenglicol a partir de glicerina, como subproducto de la producción de biodiesel, a presión y temperatura moderada
(150-250psi y 150/250°C)

Trabajo de investigación presentado por Diego Rolando Sandoval Lemus para optar el grado académico de Licenciatura en Ingeniería Química

Guatemala
2009

Vo. Bo. :

(f) _____
Ing. Gamaliel Zambrano

Tribunal Examinador:

(f) _____
Ing. Gamaliel Zambrano

(f) _____
Ing. Jorge Muñoz

(f) _____
Ing. Oscar Maldonado

Fecha de aprobación: Guatemala, 10 de diciembre de 2009

Contenido

	Página
Lista de tablas	vi
Lista de figuras.....	viii
Resumen.....	ix
Abstract.....	x
I. Introducción.....	1
II. Antecedentes.....	2
A. La glicerina como subproducto de la producción de biodiesel	2
B. Situación del propilen glicol	2
C. Síntesis de propilen glicol a partir de glicerina a presiones y temperaturas moderadas.....	3
D. Ingeniería de reacciones.....	8
E. Reactores químicos	9
III. Justificación.....	11
IV. Objetivos.....	12
A. General.....	12
B. Objetivos específicos	12
V. Problema a resolver	13
VI. Metodología.....	14
VII. Cronograma	15
VIII. Resultados.....	16
IX. Discusión	23
X. Conclusiones.....	26
XI. Recomendaciones	27
XII. Bibliografía.....	28
XIII. Apéndice.....	30
A. Cálculos de diseño de pretratamiento de glicerina.....	31
B. Cálculos de diseño de reactor.....	32
C. Cálculos para el diseño de equipo de separación de productos.....	49
D. Cálculos para el diseño de línea de hidrógeno y nitrógeno	52
E. Diseño de bombas, tuberías y accesorios auxiliares	54
F. Cálculo de costos	58
G. Figuras anexas.....	61

Lista de tablas

	Página
Tabla 1.	Resultados según catalítico6
Tabla 2.	Efecto de la cantidad de catalítico en la formación de propilen glicol a partir de glicerina. ..7
Tabla 3.	Efecto de la temperatura de reacción en la formación de propilen glicol.7
Tabla 4.	Efecto de la presión en la formación de propilen glicol a partir de glicerina.8
Tabla 5.	Efecto del contenido inicial de agua en la formación de propilen glicol.8
Tabla 6.	Fases de la elaboración del trabajo..... 14
Tabla 7.	Cronograma de fases..... 15
Tabla 8.	Especificaciones de las corrientes de Figura 6..... 17
Tabla 9.	Especificaciones de las corrientes de Figura 6 (Continuación)..... 18
Tabla 10.	Especificaciones de las corrientes de Figura 6 (Continuación)..... 19
Tabla 11.	Especificaciones de equipo del diagrama representado en Figura 721
Tabla 12.	Especificaciones de equipo del diagrama representado en la Figura 7. (Continuación)22
Tabla 13.	Resumen de costos del proceso propuesto en las Figuras 6 y 7.22
Tabla 14.	Composición de glicerina cruda.....31
Tabla 15.	Velocidad de conversión de glicerina en función de la temperatura.32
Tabla 16.	Conversión de glicerina en el proceso de hidrogenación.33
Tabla 17.	Selectividad hacia propilen glicol y acetol.....33
Tabla 18.	Dependencia de la temperatura en la constante de equilibrio K_p34
Tabla 19.	Condiciones según la temperatura de operación36
Tabla 20.	Dimensiones de reactor41
Tabla 21.	Flujo de hidrógeno requerido para el arrastre de glicerina42
Tabla 22.	Entalpías de formación43
Tabla 23.	Temperatura necesaria para mantener el equilibrio térmico dentro del reactor.45
Tabla 24.	Puntos de ebullición de componentes a la salida del reactor.....46
Tabla 25.	Propiedades de la corriente a la salida del reactor46
Tabla 26.	Características del agua de enfriamiento.....47
Tabla 27.	Propiedades de las corrientes de entradas y salidas49
Tabla 28.	Las condiciones a la entrada de la torre50
Tabla 29.	Cantidad de platos en la columna según recuperación de propilen glicol y acetol a un reflujo de 1.2Rmin.51
Tabla 30.	Cantidad de platos en la columna según recuperación de propilen glicol y acetol a un reflujo de 1.5Rmin.51
Tabla 31.	Condiciones de torre de destilación52
Tabla 32.	Corrientes de entrada y salida52
Tabla 33.	Propiedades de las corrientes.53

Tabla 34.	Especificaciones de compresor	53
Tabla 35.	Requerimientos para bombas peristálticas	54
Tabla 36.	Especificaciones de bombas peristálticas.....	54
Tabla 37.	Requerimientos para bomba centrífuga	54
Tabla 38.	Especificaciones de bombas centrífuga	55
Tabla 39.	Dimensiones de tubería para línea de hidrógeno	55
Tabla 40.	Dimensiones de tubería de alimentación de hidrógeno	56
Tabla 41.	Dimensiones de tubería después de evaporador.....	56
Tabla 42.	Dimensiones para la línea del aceite térmico.	57
Tabla 43.	Dimensiones de tubería para la alimentación de glicerina	57
Tabla 44.	Dimensiones de tubería para línea de agua	57
Tabla 45.	Dimensiones de tubería para la línea de los productos	58
Tabla 46.	Costos de materia prima.....	58
Tabla 47.	Costos de materia prima.....	59
Tabla 48.	Gastos energéticos del proceso	59
Tabla 49.	Costos de equipo para el proceso	60

Lista de figuras

	Página
Figura 1. Reacción global de la conversión de glicerol a propilen glicol.....	4
Figura 2. Mecanismo propuesto por Dasari para la síntesis de propilen glicol a partir de glicerina. (Dasari <i>et. al.</i> , 2005:228).....	5
Figura 3. Mecanismo de reacción para la conversión de la glicerina a propilen glicol propuesto por (Montassier <i>et. al.</i> , 1988).....	5
Figura 4. Efecto de la temperatura en la reducción previa del catalítico para la formación de propilen glicol a partir de glicerina.	6
Figura 5. Diagrama general de un proceso químico	9
Figura 6. Diagrama de flujo para las líneas del proceso.....	16
Figura 7. Diagrama de flujo para especificaciones de equipo	20
Figura 8. Constante de Equilibrio k_y en función de T(K) y P(Bar)	36
Figura 9. Fo(H ₂) L/min en función de la conversión de propilen glicol molPGmolAcetol, a condiciones óptimas (P = 2Bar, T = 483.15) para una alimentación de 2kg/h de glicerina.	38
Figura 10. Longitud de empaque Z (m) en función del diámetro interno Di (m).....	40
Figura 11. Esquema de reactor de cama empacada	41
Figura 12. Simulación de proceso de evaporación en Chemcad 6.0	42
Figura 13. Simulación de condensador de concha y tubo de 2 pasos.....	49
Figura 14. Diagrama de simulación de destilación multicomponente (FUG) en ChemCad 6.....	50
Figura 15. Diagrama de simulación de compresión adiabática	53
Figura 16. Dependencia de la constante de velocidad de la conversión de glicerina en acetol respecto a la temperatura.....	61
Figura 17. Dependencia de la selectividad de la conversión de glicerina en acetol respecto a la temperatura.....	62
Figura 18. Efecto de la temperatura en la constante de equilibrio K_p (acetol – hidrógeno - propilen glicol).....	63
Figura 19. Rendimiento según alimentación de hidrógeno, para una alimentación de 100g/h de glicerina y 1160g de catalítico en reactor.....	64
Figura 20. Equilibrio líquido vapor de acetol-propilen glicol a 0.6 Bares, en una mezcla multicomponente a 20% molar en contenido de agua.....	65

Resumen

El objetivo principal de este trabajo fue el diseño y selección de equipo del proceso para la síntesis de propilen glicol a partir de la hidrogenación de la glicerina con la ayuda de cromita de cobre como catalítico. El diseño se llevó a cabo a una escala de planta piloto a condiciones de temperatura y presión moderadas. (210°C y 2 bares).

El diseño propuesto se basa en un diseño continuo para operar con 2kg/h de glicerina durante períodos de hasta más de 24 horas. El diseño consiste en tres partes fundamentales: El tratamiento de la glicerina cruda, reacción de hidrogenación catalizada y la separación final de los productos.

El tratamiento de glicerina consiste en una separación química por precipitación de contaminantes en un tanque, en el cual se almacenará la glicerina para el transporte hacia la reacción de hidrogenación. En la parte de la hidrogenación catalizada se cuenta con tres líneas de alimentación principales: la del hidrógeno, el nitrógeno y la glicerina. El nitrógeno se utiliza mantener inerte el sistema y libre de oxígeno por seguridad. Para La alimentación hacia el reactor se realizará por un arrastre de glicerina con hidrógeno, este pasará a un reactor continuo de concha y tubo empacado donde se dará la hidrogenación catalizada. Este sistema cuenta con un sistema de aceite térmico auxiliar para mantener las temperaturas de operación controladas.

La separación de los productos se lleva a cabo con la ayuda de un condensador para una separación de fases primarias. El hidrógeno en la fase gaseosa será recirculado y la fase líquida será destilada para obtener propilen glicol al 96%. Para esto se utilizará una columna de destilación de 17 platos.

Con el diseño propuesto se espera tener un rendimiento global del proceso de 82% de propilen glicol respecto a la glicerina alimentada. El costo aproximado de equipo es de Q 363,069.00, con un costo de producción de Q7.84 por kilogramo de propilen glicol siendo los costos energéticos los más representativos.

Abstract

The main objective of this study was to design a process for the synthesis of propylene glycol by the hydrogenation of glycerol with the aid of copper chromite as a catalyst. The design was carried out at a pilot plant scale at moderate conditions of temperature and pressure.

The proposed design is based on a continuous design that operates with 2kg/h of glycerol during over periods up to 24 hours. The design consists of three main parts: The treatment of crude glycerin, a catalyzed reaction of hydrogenation and the final separation of products.

The treatment of glycerin is made by chemical precipitation of pollutants in a tank in which the glycerin is stored for the future transportation to the hydrogenation reactor. In the catalyzed hydrogenation are three main lines, the hydrogen, the nitrogen and the glycerin line. Nitrogen is used to maintain inert and oxygen-free the system for safety. To feed the reactor at the conditions of the reaction was proposed an evaporation system with circulation of hydrogen through liquid glycerol to carry the necessary amount of glycerol vapor. The proposed reactor was a continuous shell and tube packed bed reactor. This system has an auxiliary heat transfer oil system to maintain controlled the operating temperature.

The separation of the products is made with the help of a condenser for the separation of the primary phases. The hydrogen in the gas phase is recirculated and the liquid phase is distilled to obtain propylene glycol at 96% of purity. For this process, was proposed a distillation column of 17 stages.

With the proposed design is expected to have an overall process yield of 82% of propylene glycol from glycerol fed. The approximate cost of equipment is Q 363,069.00, with a production cost of Q7.84 per kilogram of propylene glycol being the energy costs the most representative.

I. Introducción

La producción de biodiesel surgió de la necesidad de buscar energías renovables inmediatas, ya que el mercado de combustibles a nivel mundial se encuentra con una gran demanda. El proceso de producción de biodiesel consiste en la transesterificación de un aceite para formar aceites de cadenas largas. Actualmente el biodiesel se produce de aceite tanto vegetal como animal. Algunos ejemplos de materia prima son: Aceite de palma, aceite de algas marinas, aceite de jatropha, entre otros. En el proceso de transesterificación del aceite se produce un subproducto que hoy en día es la fuente de problemas más grande en la industria de biodiesel, la glicerina.

El mercado de la glicerina hoy en día es un mercado saturado y poco atractivo. Por esta razón la glicerina generalmente se desecha en estos procesos. El costo del diesel común es significativamente más bajo que el del biodiesel, esto hace que el mercado del biodiesel sea mucho más pequeño que el de combustibles fósiles. Para aumentar la rentabilidad de industrias como esta es necesario aprovechar todas las herramientas y oportunidades que la tecnología ofrece. La glicerina ha sido objeto de estudio para aumentar la rentabilidad de esta industria, pues se necesita una tecnología barata y accesible que agregue valor a la industria transformando la glicerina en otro producto con un mejor mercado. La hidrogenación selectiva ha sido considerada para la producción de sustancias con más valor como isopropanol, etilenglicol, propilen glicol, entre otros.

Por otra parte el mercado de propilen glicol ha aumentado la demanda y los precios a una razón significativa en los últimos años. Estos hechos hacen que el mercado de propilen glicol sea bastante atractivo. Ésta es la razón por la cual se han realizado esfuerzos por encontrar procesos con tecnologías baratas que ayuden a aumentar la selectividad en la producción de propilen glicol a partir de glicerina. Por lo tanto el diseño de un proceso de producción de propilen glicol a partir de glicerina, como subproducto de la producción de biodiesel, a presión y temperatura moderada sería una herramienta muy útil para determinar costos y la viabilidad para ser tomado en la industria de biodiesel como un proceso que agregue rentabilidad a la misma.

II. Antecedentes

A. La glicerina como subproducto de la producción de biodiesel

En las últimas décadas los aceites de origen vegetal específicamente han adquirido una gran importancia en el campo de los combustibles alternativos ya que mediante un proceso de transesterificación se pueden transformar en biodiesel (Suppes *et. al.*, 2004), (Chiu, 2005) y (Suppes *et. al.*, 2002). La producción mundial actual de biodiesel se aproxima a un billón de galones al año. El biodiesel es un combustible alternativo y renovable que reduce las emisiones de partículas e hidrocarburos. Por cada nueve kilogramos de biodiesel producidos aproximadamente un kilogramo de glicerina cruda es formado como subproducto; y hoy en día las plantas de producción de biodiesel se encuentran en la necesidad de encontrar métodos para incrementar los ingresos a partir de esta glicerina.

La producción de biodiesel en Estados Unidos tiene un objetivo de 400 millones de galones para el año 2012. Sin embargo el mayor problema en su comercialización es su alto costo comparado con el diesel. El costo de producción de biodiesel está entre \$0.65 – \$1.50 por galón (Higgins Jenna. 2002). A esta capacidad 3.5 millones de galones de glicerina cruda son producidos cada año. Esta glicerina puede ser purificada mediante varios métodos incluyendo destilación al vacío para la producción de glicerina en grado USP. Sin embargo, refinar la glicerina cruda que contiene residuos de catalíticos, agua e impurezas orgánicas es demasiado complejo y costoso de manipular para pequeños productores. Como consecuencia el 50% de la glicerina cruda total que es generada como subproducto se desecha y el resto es vendido a un precio mínimo. Otro problema que resulta de refinar esta glicerina cruda es que el mercado de glicerina no puede absorber esta cantidad. En 1998, la glicerina refinada era abundante y su producción decayó. Pero al final del 1999 y principios del 2000, el mercado de glicerina se volvió fuerte de nuevo. Hoy en día con tanta glicerina disponible en el mercado mundial, los precios han decaído significativamente. Los precios en el mercado de la glicerina continuaran decayendo con un mercado sobresaturado debido a la industria del biodiesel.

Hoy en día, las plantas de producción de biodiesel se encuentran en la necesidad de realizar métodos para aumentar sus ingresos a partir del glicerol. Si la glicerina cruda se pudiera convertir a propilen glicol, esta tecnología podría utilizarse en las plantas de producción de biodiesel para aumentar la rentabilidad. La tecnología óptima sería convertir la glicerina cruda a temperaturas y presiones moderadas.

B. Situación del propilen glicol

El propilen glicol, por ejemplo 1,2 propanodiol, es un diol de tres carbonos con un centro esteriogénico en el átomo de carbono central. El propilen glicol es un producto químico importante, con una producción

anual de más de mil millones de libras en los Estados Unidos y se vende alrededor de \$0.81 por libra, con un crecimiento del 4% en el tamaño del mercado anual. La ruta comercial para producir propilen glicol es a partir de la hidratación del óxido de propileno derivado del propileno. Algunos usos típicos del propilen glicol son: en las resinas de poliéster insaturado, líquidos funcionales (anticongelante, transferencia de calor, etc.), productos farmacéuticos, alimentos, cosméticos, detergentes líquidos, humectantes de tabaco, sabores y fragancias, cuidado personal, las pinturas y la alimentación animal.

Existen varias rutas para la producción de propilen glicol a partir de materias primas renovables. La ruta más común es la hidrogenación de azúcares o de alcoholes de azúcar a altas temperaturas y presiones en la presencia de un catalizador metálico que produce propilen glicol y otros polioles de cadena corta. A pesar de varios esfuerzos de investigación, esta reacción potencialmente importante se limita a una producción a escala de laboratorio a causa de los inconvenientes de las tecnologías existentes. Un inconveniente es el uso de altas temperaturas y presiones que requieren costosos equipos de alta presión, lo que aumenta el costo de capital del proceso. Presiones de hidrógeno típico en cualquier lugar entre 1450 y 4700 psi y temperaturas en el rango 200-350°C, se están utilizando para esta reacción. Un inconveniente adicional es el uso de soluciones diluidas de glicerol para esta reacción. Normalmente, 10-30% en peso de Glicerol. Sin embargo, no se ha informado mucho sobre el efecto positivo de la utilización de soluciones de glicerol diluido en lugar de 100% de glicerol. Un último inconveniente es la baja selectividad hacia propilen glicol. La mayoría de los informes de la literatura de alta selectividad hacia el glicol de etileno y otros subproductos como el ácido láctico, acetol, acroleína, y productos de degradación como propanol, metanol, dióxido de carbono, metano, etc.

Sin embargo esfuerzos más recientes han logrado selectividades hasta más del 90% hacia el propilen glicol pero utilizando presiones y temperaturas bajas y operando de forma continua en reactores empacados. Este tipo de investigaciones sugieren continuar con la experimentación para tener un panorama más amplio sobre la reacción a condiciones moderadas.

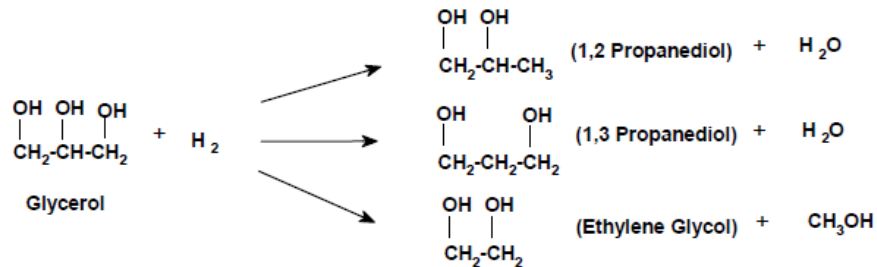
C. Síntesis de propilen glicol a partir de glicerina a presiones y temperaturas moderadas.

La síntesis de propilen glicol y etilen glicol a partir de glicerina ha surgido como una necesidad de la industria productora de biodiesel para aumentar la rentabilidad de la planta. La glicerina es el principal subproducto de dicha producción. Si se puede sintetizar propilen glicol a un bajo costo a partir de la glicerina resultante el impacto económico en la industria sería significativo.

Esta reacción ha sido estudiada desde hace varias décadas pero su aplicación se ha limitado a escala laboratorio debido a las condiciones de presión y temperatura altas que limitan a los equipos a una escala

mayor. La siguiente figura resume la reacción global de la conversión de glicerol en propilen glicol y etilen glicol mediante hidrogenación en presencia de un catalítico metálico. (Dasari *et. al.*, 2005:226)

Figura 1. Reacción global de la conversión de glicerol a propilen glicol

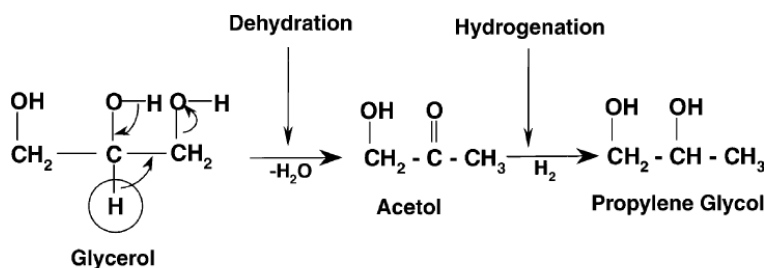


La patente de Cásale y Gómez (Cásale y Gómez, 1993) y (Cásale y Gómez, 1994) describe un método para la hidrogenación de glicerol utilizando cobre y zinc como catalítico. También describe un método utilizando sulfuro de rutenio como catalítico a presiones de 2175psi y temperaturas entre 240-270°C. La patente de Ludwing y Manfred (Ludwing, Manfred, 1997) describe un método para la producción de propilen glicoles usando catalítico que contiene cobalto, cobre, manganeso, molibdeno y un poliácido inorgánico obteniendo un rendimiento de 95% de propilen glicol utilizando presiones de 3625psi y temperaturas de 250°C. La patente de Tessie (Tessie, 1987) describe un método de producción de propilen glicoles con catálisis homogénea con tungsteno y metales de transición pertenecientes al Grupo VIH utilizando presiones de 4600psi y temperaturas de 200°C. La patente de Haas describe un proceso simultáneo de producción de propilen glicoles a partir de glicerol y azúcares (Haas, 1995) y (Cameron D.C., Clooney C.L., 1986).

Como se puede observar las condiciones de operación son sumamente altas por lo que replicar un procedimiento a una escala mayor representaría costos muy altos. El problema principal a resolver en esta síntesis es la selectividad sobre el propilen glicol, ya que la mayoría de literatura reporta una alta selectividad alta para etilen glicol, ácido láctico, acetol, acroleína, y otros productos más degradados como propanol, metanol, dióxido de carbono, metano, etc.

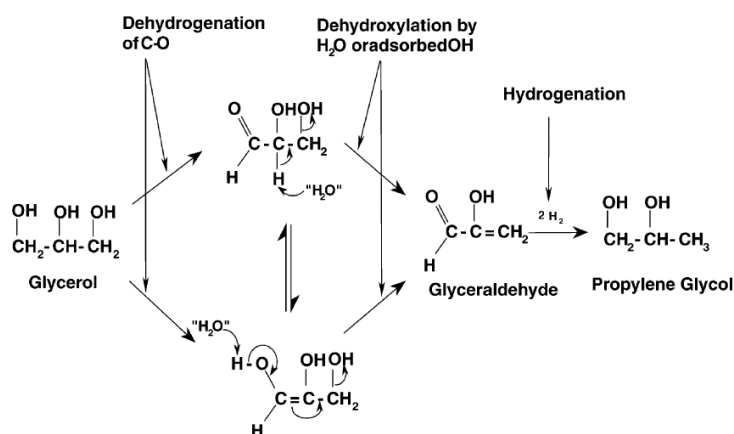
Dasari *et. al.* realizó estudios para mejorar la selectividad del propilen glicol a temperaturas y presiones moderadas mediante catálisis metálica, asimismo validó el mecanismo de reacción propuesto en su investigación que se muestra en la Figura 2. (Dasari *et. al.*, 2005:228)

Figura 2. Mecanismo propuesto por Dasari *et. al.* para la síntesis de propilen glicol a partir de glicerina. (Dasari *et. al.*, 2005:228)



En investigaciones hechas por Montassier se propuso otro mecanismo para la producción de propilen glicol a partir de glicerina a partir de una catálisis metálica. El mecanismo se muestra en la siguiente figura.

Figura 3. Mecanismo de reacción para la conversión de la glicerina a propilen glicol propuesto por (Montassier *et. al.*, 1988)



Los parámetros que se aconsejan a continuación como la catálisis, la temperatura de reducción, cantidad de catalítico, contenido inicial de agua, etc. Fueron tomados de (Dasari *et. al.* 2005:228)

1. **Catálisis recomendada.** Las prácticas tradicionales de hidrogenación de grupos carbonilos para formar alcoholes junto con las prácticas comunes de la hidrogenación de grupos esterés en grasas y aceites indican que los grupos alcoholes son muy estables y no reaccionan fácilmente a una hidrogenación en condiciones normales. Además, los alcoholes son conocidos como excelentes solventes para la hidrogenación, lo que implica que se resisten mucho a esta reacción. Otro problema es que la hidrogenación catalizada convencional con níquel, rutenio, y paladio no son muy efectivas para la hidrogenación de glicerina. El cobre es un catalítico es potencialmente un buen catalítico para esta hidrogenación. Se sabe debido a que tiene una actividad de muy pobre de hidratación frente al enlace C-C y una catálisis eficiente frente al enlace C-O para la deshidratación (Montassier, 1988) y (Runberg, 1985). Según Dasari *et. al.* la cromita de cobre es un catalítico muy conveniente ya que logra un porcentaje de conversión de 54.8% con

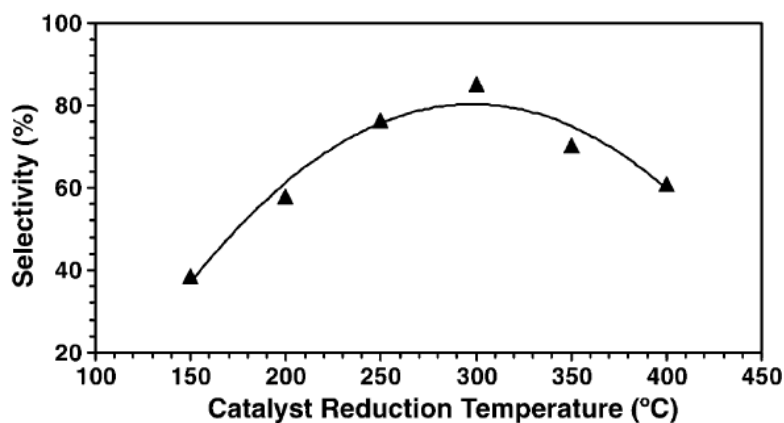
una selectividad de 85%. En la siguiente tabla se muestran la conversión, rendimiento y selectividad de varios catalíticos metálicos. Las reacciones fueron realizadas con una solución de glicerina al 80% a una temperatura de 200°C y 200psi de hidrógeno por 24 horas. (Dasari *et. al.*, 2005:227)

Tabla 1. Resultados según catalítico

Proveedor	Descripción	% Conversión	% Rendimiento	% Selectividad
Johnson Matthey	5% Ru/C	43.7	17.5	40
Johnson Matthey	5% Ru/alúmina	23.1	13.8	59.7
Degussa	5% Pd/C	5	3.6	72
Degussa	5% Pt/C	34.6	28.6	82.7
PMC Chemicals	10% Pd/C	8.9	4.3	48.3
PMC Chemicals	20% Pd/C	11.2	6.4	57.1
Grace Davision	Raneynickel	49.5	26.1	52.7
Grace Davision	Raney cobre	48.9	33.8	69.1
Sud-Chemie	Cobre	53	21.1	39.8
Sud-Chemie	Cromita de cobre	54.8	46.6	85
Johnson Matthey	Ni/C	39.8	27.3	68.6
Alfa-Aesar	Ni/silica-alúmina	45.1	29.1	64.5

2. Efecto de la temperatura en la reducción previa del catalítico. Para un mejor funcionamiento de la cromita de cobre obtenida en forma de óxido se reduce total o parcialmente para aumentar su actividad. El estudio realizado por Dasari *et. al.* muestra pruebas para la reducción previa del catalítico a diferentes temperaturas para incrementar la actividad en la superficie. Los resultados obtenidos se muestran en la siguiente figura. (Dasari *et. al.*, 2005:229)

Figura 4. Efecto de la temperatura en la reducción previa del catalítico para la formación de propilen glicol a partir de glicerina.



Todas las reacciones se trabajaron con una solución de 80% de glicerina a 200°C y 200psi. (Dasari *et. al.*, 2005:229)

3. Efecto en la cantidad del catalítico. En la misma investigación de Dasari *et. al.* la cantidad del catalítico utilizado, cromita de cobre, tiene un efecto directo en los resultados de la síntesis. La actividad del

catalítico se pierde antes de que la reacción se complete. El catalítico se puede regenerar lavándolo con solventes polares y reduciéndolo en un corriente de hidrógeno en algunos casos se debe reemplazar con catalítico intacto. Para reducir los costos del reemplazo del catalítico, se determinó una cantidad viable para su utilización. En la siguiente tabla se muestran los resultados obtenidos por *Dasari et. al.*

Tabla 2. Efecto de la cantidad de catalítico en la formación de propilen glicol a partir de glicerina.

% peso de catalítico	% Conversión	%Rendimiento	%Selectividad
1	28.3	17.9	63.3
2.5	33.5	26.2	78.2
5	54.8	46.6	85.0
10	58	45	77.6
15	70.1	45.2	64.5
20	78.5	48.7	62.0

Todas las reacciones fueron realizadas a 200°C y 200psi de hidrógeno durante 24h. (*Dasari et. al.*, 2005:230)

4. Efecto de la temperatura de reacción. Continuando con las investigaciones de *Dasari* la temperatura tiene un efecto significativo en el rendimiento del propilen glicol en la reacción. En dicha investigación se probaron varias temperaturas para observar el efecto. A continuación se muestra una tabla con los resultados. (*Dasari et. al.*, 2005:229)

Tabla 3. Efecto de la temperatura de reacción en la formación de propilen glicol a partir de glicerina.

Temperatura	% Conversión	% Rendimiento	% Selectividad
150	7.2	2.3	31.9
180	28	9.8	35.1
200	54.8	46.6	85
230	72	35.1	48.7
260	87	7.7	8.8

Todas las reacciones fueron realizadas a 200°C y 200psi de hidrógeno durante 24h. (*Dasari et. al.*, 2005:230)

5. Efecto de la presión de hidrógeno. *Dasari et. al.* trabajó también para encontrar las presiones óptimas de hidrógeno para lograr un rendimiento alto. Las reacciones fueron realizadas entre 50 y 500psi a una temperatura constante de 200°C para determinar el efecto en la reacción global. La siguiente tabla muestra los resultados. (*Dasari et. al.*, 2005:230)

Tabla 4. Efecto de la presión en la formación de propilen glicol a partir de glicerina.

Presión (PSI)	% Conversión	% Rendimiento	% Selectividad
50	25	9.1	36.4
100	37	15.7	42.4
150	44	22.3	50.7
200	54.8	46.6	85
300	65.3	58.5	89.6

Todas las reacciones fueron realizadas a 200°C y 200psi de hidrógeno durante 24h. (Dasari *et. al.*, 2005:230)

6. Efecto del contenido inicial de agua. Debido a que el agua es generada en esta reacción es preferible eliminar toda el agua posible en la mezcla inicial para lograr un equilibrio hacia los productos. La literatura ha utilizado esta reacción con un contenido inicial de agua alto entre 70 y 80% de agua inicial, el problema de tener mucha cantidad inicial de agua al inicio es el incremento del tamaño del reactor, y el inconveniente de tener la glicerina en un grado de pureza alto es el costo energético para la destilación. En las investigaciones de Dasari et al se hicieron corridas con distintos contenidos iniciales de agua en la mezcla de la glicerina. En la siguiente tabla se muestran los resultados. (Dasari *et. al.*, 2005:230)

Tabla 5. Efecto del contenido inicial de agua en la formación de propilen glicol a partir de glicerina.

% Agua (peso)	% Conversión	% Rendimiento	% Selectividad
80	33.5	21.7	64.8
40	48	28.5	59.4
20	54.8	46.6	85
10	58.8	47.2	80.3
0	69.1	49.7	71.9

Todas las reacciones fueron realizadas a 200°C y 200psi de hidrógeno durante 24h. (Dasari *et. al.*, 2005:230)

D. Ingeniería de reacciones

Desde el inicio de la historia los procesos químicos eran utilizados para preparar comida, fermentar granos, preparación de bebidas, refinación de material para fabricar herramientas y armas. Nuestros ancestros utilizaban en su mayoría procesos tipo batch, porque la gran escala no era de importancia cuando se hacía para provecho personal. (Schmidt, 1998:4)

Hasta la era industrial el humano necesitó fabricar productos en grandes cantidades. Fue hasta el siglo veinte que los procesos continuos fueron utilizados a gran escala. Las primeras consideraciones prácticas de estos reactores fueron originadas en Inglaterra y Alemania, donde los las primeras plantas a gran escala fueron

construidas y operadas. Sin embargo éstas fueron fabricadas a prueba y error lo que hoy en día es inaceptable. (Schmidt, 1998:4)

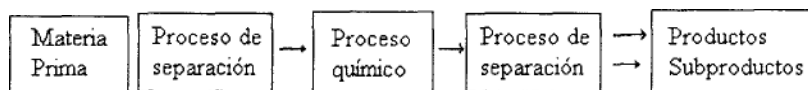
La consideración para reactores químicos a gran escala inició entre 1930-1940 en Alemania, Holanda e Inglaterra. Sin embargo fue hasta los finales de los 50 que se consideraron los reactores químicos para usos industriales específicos. (Schmidt, 1998:4)

Hoy en día muchas compañías a nivel mundial han acelerado la tecnificación y la mejora de procesos. Por ejemplo las industrias petroleras. Hoy en día la necesidad de diseñar procesos muy y reactores muy acertados ha llevado a los ingenieros químicos a desarrollar habilidades de diseño muy complejas. Las asunciones realizadas en reactores, como procesos isotérmicos, ya no son aceptables debido a que el grado de precisión requerido hoy en día es muy alto. Por otra parte el diseño de reactores es extremadamente complejo con múltiples reacciones, múltiples fases, flujos y transferencias de masa y calor muy complejas. El análisis de reactores químicos involucra esencialmente todo el material del currículo de un ingeniero químico. (Schmidt, 1998:7)

E. Reactores químicos

Los reactores químicos son el corazón de cualquier proceso químico. Los procesos químicos transforman químicos sin valor a sustancias con valor, y los ingenieros químicos son las únicas personas técnicamente entrenadas para entender y manipular estos procesos. Mientras las unidades de separación son los componentes más grandes en un proceso químico, su propósito es purificar una materia prima antes de entrar al reactor y purificar productos después que salen del mismo. A continuación se muestra un diagrama general de un proceso químico. (Schmidt, 1998:3)

Figura 5. Diagrama general de un proceso químico



La materia química de otro proceso químico generalmente pasa por un proceso de purificación hasta llegar a su composición deseada para ingresar al reactor. Después de abandonar el reactor, los reactivos sin conversión, los solventes y algunos subproductos deben de ser separados del producto deseado antes de venderlos o usarlos en otro proceso. (Schmidt, 1998:3)

El equipo principal en cualquier proceso es el reactor químico; si éste puede manejar materia prima impura o bien produce impurezas en el producto insignificantes, el ahorro en el proceso puede ser mayor si simplemente construimos unidades de separación mejores. En los procesos químicos típicos el capital y los

costos de operación del reactor son entre el 10 y 25% del total, y los costos de las unidades de separación tienen mayor influencia en el costo del proceso. Por lo tanto, el desempeño del reactor controla totalmente los costos y los modos de operación de las costosas unidades de separación, entonces el reactor químico controla la economía de la mayoría de los procesos. Mejoras en el reactor normalmente tienen impactos enormes en las corrientes de separación de materia prima y productos. (Schmidt, 1998:3)

El diseño de reactores es la vanguardia en tecnologías químicas nuevas. Los mayores retos en la ingeniería química incluyen:

1. Búsqueda de procesos alternativos para reemplazar otros antiguos,
2. Encontrar rutas para la fabricación de un producto a partir de materias primas diferentes, ó
3. Reducir o eliminar subproductos problemáticos.

Las regulaciones ambientales continuamente crean demandas a procesos químicos alternos. Por ejemplo, nos enfrentamos a una urgente reducción de cloro en los procesos químicos. Algunos procesos (propileno a oxido de propileno por ejemplo) comúnmente produce mucha cantidad de sales (conteniendo cantidades considerables de agua e impurezas orgánicas). Los límites de emisión de aire y agua cada vez se ponen más rígidos lo cual crea desafíos para desarrollar tecnologías más eficientes y a la vez ambientalmente limpias. (Schmidt, 1998:4)

III. Justificación

Actualmente, a nivel mundial la producción de biodiesel ha aumentado drásticamente debido a la demanda de combustibles alternativos. La producción de biodiesel tiene un gran impacto ambiental debido a que su producción es bastante sostenible. Sin embargo esta producción tiene un subproducto que actualmente es bastante problemático, la glicerina. Por cada 9kg de biodiesel producido se forma aproximadamente 1kg de glicerina, la cual generalmente se desecha y solo alguna se purifica para su venta. El motivo por el cual no se purifica toda la glicerina es por su alto costo energético y además el mercado mundial se encuentra saturado. El reto actual es adquirir métodos alternativos y de bajo costo para convertir la glicerina en otro producto con más valor en el mercado.

La producción de propilen glicol a partir de glicerina por hidrogenación catalizada ha sido considerada debido a la demanda creciente de propilen glicol en el mercado mundial. Sin embargo la literatura reporta únicamente intentos a nivel de laboratorio debido a las altas presiones y temperaturas usadas, lo que hace poco rentable una producción a gran escala. Investigaciones más recientes han realizado esta síntesis a presiones y temperaturas moderadas, con el objetivo de aumentar la selectividad en la hidrogenación hacia el propilen glicol. Además la Universidad del Valle de Guatemala a través del CONCYT está realizando esfuerzos para sintetizar propilen y etilen glicol a partir de glicerina, por lo tanto un diseño del proceso químico con la selección del equipo adecuado para replicarlo a una escala mayor sería de gran utilidad para determinar viabilidades en la industria de biodiesel.

IV. Objetivos

A. General

- Diseñar y seleccionar equipo del proceso de producción de propilen glicol a partir de glicerina, como subproducto de la producción de biodiesel, a presión y temperatura moderada.

B. Objetivos específicos

- Diseñar y seleccionar el equipo para el proceso de pretratamiento de la glicerina.
- Diseñar y seleccionar el equipo para el proceso de separación de los productos a la salida del reactor.
- Diseñar y seleccionar el reactor para la hidrogenación catalizada de la glicerina.
- Diseño y selección de equipo para alimentación de hidrógeno y nitrógeno.
- Seleccionar material de tuberías y accesorios auxiliares para el diseño de las distintas líneas de alimentación y salidas en el proceso.
- Calcular los costos de equipo y operación del proceso.

V. Problema a resolver

El diseño de procesos químicos es un problema que concierne específicamente a un ingeniero químico. Para el diseño de procesos químicos se requiere de herramientas como diseño de reactores, control de procesos, economía, diseño de equipo, selección de material, etc. Todas estas habilidades técnicas son adquiridas específicamente en el currículo de un ingeniero químico. El objetivo principal de un proceso químico es agregarle valor a la materia por medio de su transformación a una con más valor.

La industria de biodiesel es un proceso químico que genera como subproducto la glicerina, la cual no tiene un valor significativo ni una demanda atractiva en el mercado. Convertir la glicerina en un producto con más valor haría la industria de biodiesel más rentable. Estudios anteriores proponen una producción de propilen glicol a partir de glicerina por hidrogenación catalizada ya que es un producto que ha presentado una demanda creciente en los últimos años y por lo tanto un mejor precio en el mercado mundial. Sin embargo la producción de propilen glicol por hidrogenación catalizada de la glicerina con un rendimiento alto requiere presiones excesivamente altas por lo que únicamente se ha llevado a pequeña escala en laboratorios con equipo sofisticado. Investigaciones más recientes han realizado síntesis a temperaturas y presiones moderadas logrando selectividades y rendimientos aceptables, estas condiciones son más accesibles para una producción a mediana y gran escala. La realización de este trabajo ayudaría a determinar las necesidades técnicas que requiere llevar este proceso a una escala mayor que la de laboratorio, por lo tanto sería una herramienta muy útil para determinar costos y la viabilidad para ser tornado en la industria de biodiesel como un proceso que agregue rentabilidad a la misma.

VI. Metodología

La elaboración del trabajo se va a realizar con una metodología por fases, las cuales son sucesivos y dependen una de otra. A continuación se muestra una tabla con las fases requeridas.

Tabla 6. Fases de la elaboración del trabajo

Número de fase	Descripción
1	Diseño del protocolo
2	Adquisición de datos experimentales a partir de investigaciones recientes como la de Dasari (Dasari <i>et. al.</i> , 2005), y los resultados obtenidos en el proyecto del Fondo para el Desarrollo Científico y Tecnológico (FODECYT) 029-2009 llevado a cabo por la Universidad del Valle de Guatemala para la producción de propilen glicol y etilen glicol a partir de glicerina.
3	Diseño y selección del reactor químico. Esta fase será la que llevará más tiempo debido a que el diseño del reactor controlara totalmente el diseño y costo de todos los equipos auxiliares y todo el proceso estará delimitado por el mismo.
4	Diseño y selección de equipo para alimentación de hidrógeno y nitrógeno.
5	Diseño y selección de equipo para el pretratamiento de la glicerina.
6	Diseño y selección de equipo para la separación de los productos a la salida del reactor.
7	Diseño y selección de tubería y accesorios (válvulas, manómetros, termómetros, trampas de vapor, etc.) para el diseño de las distintas líneas de alimentación y salida en el proceso
8	Determinar los costos de equipo y operación del proceso.
9	Elaboración del documento final.

VII. Cronograma

El trabajo de las diferentes fases estará dividido en cinco meses. A continuación se muestra una tabla que describe el cronograma.

Tabla 7. Cronograma de fases

Fase	Junio					Julio					Agosto					Septiembre					Octubre				
	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
1	■	■																							
2			■	■	■	■	■	■																	
3					■	■	■	■	■	■															
4									■	■															
5											■	■													
6													■	■	■	■									
7																	■	■							
8																			■	■					
9																					■	■			

VIII. Resultados

Figura 6. Diagrama de flujo para las líneas del proceso

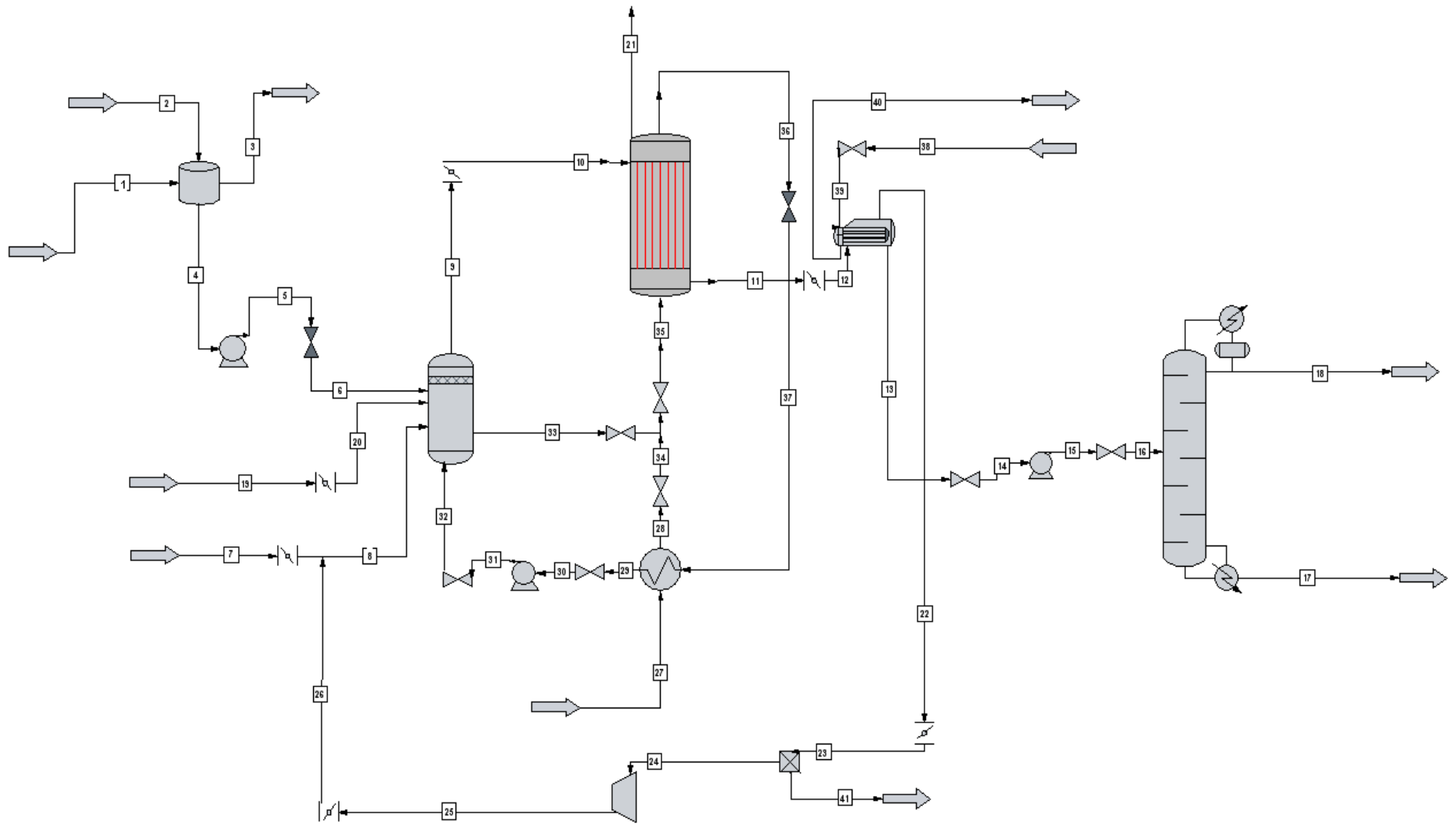


Tabla 8. Especificaciones de las corrientes de Figura 6.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Temperatura (K)	298.15	298.15	298.15	298.15	298.15	298.15	483.15	483.15	483.15	483.15	483.15	483.15	298.15	298.15
Presión (Bar)	1.00	1.00	1.00	1.00	1.20	1.20	2	2	2	2	1.9	1.9	1.5	1.5
Fracción de vapor	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1	1	1	1	1	1	0	0
Entalpía MJ/h	-16.66	-1.55	-0.06	-15.88	-15.88	-15.88	2.86	2.86	-10.45	-10.45	-12.45	-12.45	-17.31	-17.31
Flujo kg/h	2.16	0.07	0.13	2.10	2.10	2.10	1.07	1.07	3.17	3.17	3.17	3.17	2.04	2.04
HAP (p/p)	0.000	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Ácido fosfórico (p/p)	0.023	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Hidróxido de calcio (p/p)	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Trifosfato de sodio (p/p)	0.005	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Cromita de cobre (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Glicerina (p/p)	0.926	0.000	0.000	0.952	0.952	0.952	0.000	0.000	0.631	0.631	0.000	0.000	0.000	0.000
Agua (p/p)	0.046	0.000	0.000	0.048	0.048	0.048	0.000	0.000	0.032	0.032	0.163	0.163	0.208	0.208
Acetol (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.047	0.047	0.071	0.071
Propilen glicol (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.437	0.437	0.680	0.680
Etilen glicol (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.017	0.017	0.026	0.026
Propanol (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.012	0.012	0.014	0.014
Hidrógeno (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000	0.337	0.337	0.323	0.323	0.000	0.000
Nitrógeno (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Aceite térmico (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Tubería														
Diámetro	N/A	N/A	N/A	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/2 "	1/2 "	1/2 "	1/2 "	1/2 "	1/2 "	1/4 "	1/4 "
Cédula	N/A	N/A	N/A	40	40	40	40	40	40	40	40	40	40	41
Material	N/A	N/A	N/A	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX
Observaciones	N/A	N/A	N/A	---	---	---	---	---	A	A	A	A	---	---

HAP = $Ca_5(PO_4)_3OH$ (Hydroxyapatite)

p/p = porcentaje peso-peso respecto al flujo kg/h

N/A = no aplica ya que será introducido manualmente

A = Aislamiento

INOX = Acero inoxidable

1 Bar = 14.5 psi; $T(K) = T(^{\circ}C) + 273.15$

Tabla 9. Especificaciones de las corrientes de Figura 6 (Continuación)

	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28
Temperatura (K)	298.15	298.15	446.01	356.41	298.15	298.15	483.15	298.151	298.151	298.151	339.206	339.206	483.150	488.150
Presión (Bar)	1.5	1.5	0.62	0.6	2	2	2	1.5	1.5	1.35	3	3	1	1
Fracción de vapor	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0
Entalpía MJ/h	-17.31	-17.31	-8.90	-6.51	0.00	0.00	0.72	-1.32	0.00	0.00	0.60	0.60	9.13	11.21
Flujo kg/h	2.04	2.04	1.43	0.61	3.75	3.75	3.75	1.13	1.02	0.94	1.02	1.02	205.50	205.50
HAP (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Ácido fosfórico (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Hidróxido de calcio (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Trifosfato de sodio (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Cromita de cobre (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Glicerina (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Agua (p/p)	0.208	0.208	0.000	0.696	0.000	0.000	0.000	0.082	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Acetol (p/p)	0.071	0.071	0.001	0.234	0.000	0.000	0.000	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Propilen glicol (p/p)	0.680	0.680	0.962	0.023	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Etilen glicol (p/p)	0.026	0.026	0.037	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Propanol (p/p)	0.014	0.014	0.000	0.047	0.000	0.000	0.000	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Hidrógeno (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.905	1.000	1.000	1.000	1.000	0.000	0.000
Nitrógeno (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Aceite térmico (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000
Tubería														
Diámetro	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/2 "	1/2 "	1/2 "	1/2 "	1/2 "	N/A	1/4 "
Cédula	42	43	44	45	40	40	41	40	40	40	40	40	N/A	81
Material	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	INOX	Hierro
Observaciones	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	A	A	N/A	A

HAP = $Ca_5(PO_4)_3OH$ (Hydroxyapatite)

p/p = porcentaje peso-peso respecto al flujo kg/h

N/A = no aplica ya que será introducido manualmente

A = Aislamiento

INOX = Acero inoxidable

1 Bar = 14.5 psi; $T(K) = T(^{\circ}C) + 273.15$

Tabla 10. Especificaciones de las corrientes de Figura 6 (Continuación)

	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41
Temperatura (K)	488.150	488.150	488.150	488.150	483.150	483.150	483.150	470.000	470.000	298.150	298.150	321.780	298.151
Presión (Bar)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1.350
Fracción de vapor	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.000
Entalpía MJ/h	11.21	11.21	11.21	11.21	9.13	9.13	9.13	3.75	3.75	-952.61	-952.61	-946.68	-1.56
Flujo kg/h	205.50	205.50	205.50	205.50	205.50	205.50	205.50	205.50	205.50	60.00	60.00	60.00	0.11
HAP (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Ácido fosfórico (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Hidróxido de calcio (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Trifosfato de sodio (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Cromita de cobre (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Glicerina (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Agua (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000	1.000	0.863
Acetol (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.041
Propilen glicol (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.013
Etilen glicol (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Propanol (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.083
Hidrógeno (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Nitrógeno (p/p)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Aceite térmico (p/p)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Tubería													
Diámetro	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "	1/4 "
Cédula	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94
Material	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro	Hierro
Observaciones	A	A	A	A	A	A	A	A	A	---	---	---	---

HAP = $Ca_5(PO_4)_3OH$ (Hydroxyapatite)

p/p = porcentaje peso-peso respecto al flujo kg/h

N/A = no aplica ya que será introducido manualmente

A = Aislamiento

INOX = Acero Inoxidable

1 Bar = 14.5 psi; $T(K) = T(^{\circ}C) + 273.15$

Figura 7. Diagrama de flujo para especificaciones de equipo

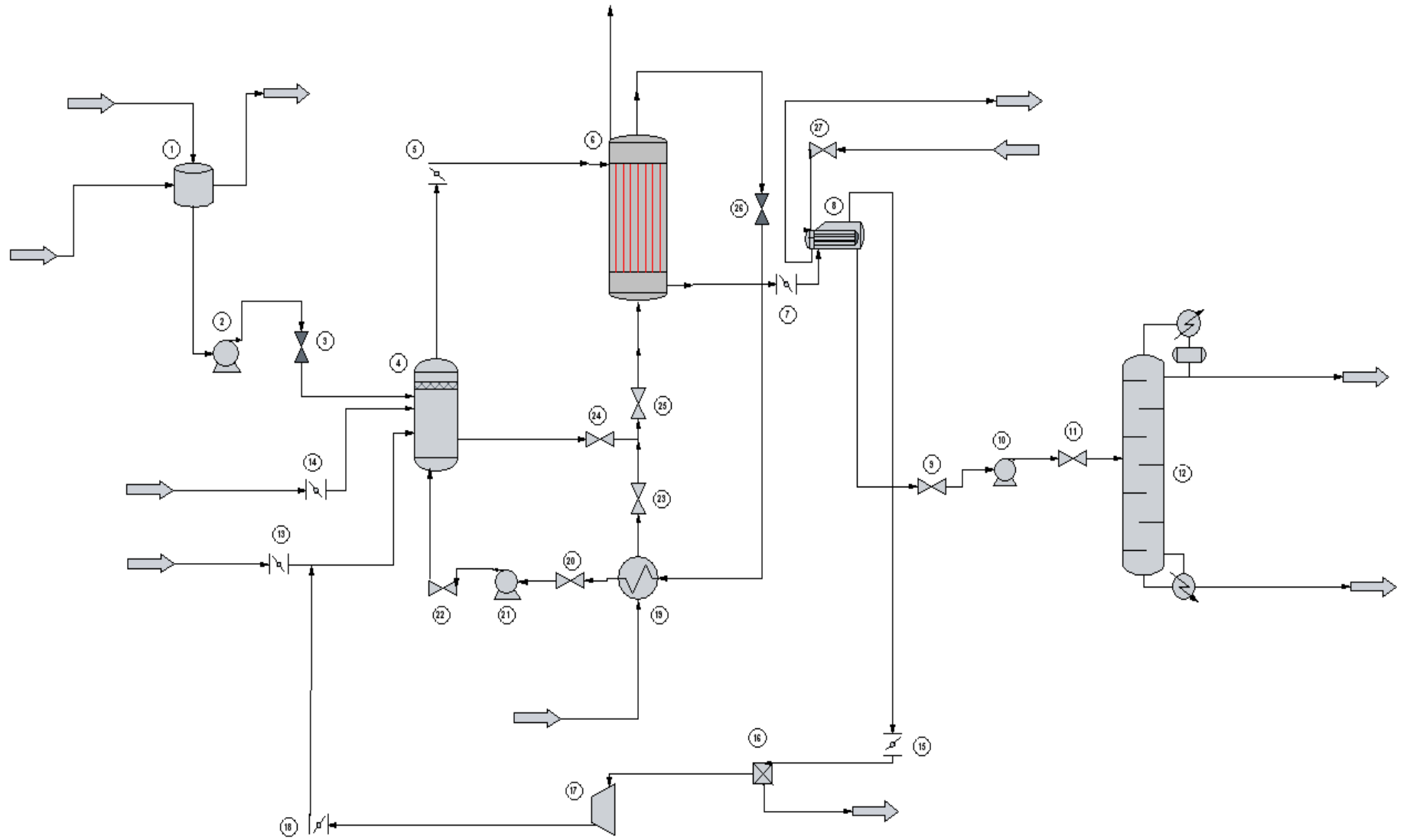


Tabla 11. Especificaciones de equipo del diagrama representado en Figura 7

ID	Equipo	Tipo	Especificaciones
1	Tanque	Cilíndrico	Material: Acero inoxidable; Dimensiones: 0.17m x 0.25m. Volumen nominal 60 L
2	Bomba	Peristáltica	Capacidad: 0-185mL/min; Motor: Imán permanente; Material policarbonato; Potencia 20Watt, Diámetro de tubería 1/4".
3	Válvula	Globo	Material: Acero inoxidable; Diámetro: 1/4", conexión a proceso: roscado
4	Evaporador	Simple efecto	Capacidad: 30L; Material: Acero inoxidable con aislamiento; Chaqueta: Acero inoxidable; Calentamiento: Aceite térmico.
5	Válvula	Mariposa	Material: Acero inoxidable; Diámetro: 1/2", conexión a proceso: roscado
6	Reactor	Cama empacada (Concha y tubos)	Material: Acero inoxidable con aislamiento, Concha: 2", 3 Tubos internos: 1/2".
7	Válvula	Mariposa	Material: Acero inoxidable; Diámetro: 1/2", conexión a proceso: roscado
8	Condensador	Concha y tubos	Material: Acero inoxidable; Longitud 12"; 6 tubos internos 1/4"; Concha 2"; arreglo: triangular; pasos: 2.
9	Válvula	De paso	Material: Acero inoxidable; Diámetro: 1/4", conexión a proceso: roscado
10	Bomba	Peristáltica	Capacidad: 0-185mL/min; Motor: Imán permanente; Material policarbonato; Potencia 20Watt, Diámetro de tubería 1/4".
11	Válvula	Globo	Material: Acero inoxidable; Diámetro: 1/4", conexión a proceso: roscado
12	Columna de destilación	De platos	Material: Acero Inoxidable aislado; Número de platos: 17, altura 2.2m, diámetro 0.1m Condensador 0.5kW, rehervidor 0.75kW.
13	Válvula	Mariposa	Material: Acero inoxidable; Diámetro: 1/2", conexión a proceso: roscado
14	Válvula	Mariposa	Material: Acero inoxidable; Diámetro: 1/4", conexión a proceso: roscado
15	Válvula	Mariposa	Material: Acero inoxidable; Diámetro: 1/2", conexión a proceso: roscado
16	Filtro	De Aire	Medio filtrante: Borosilicato, poros 0.01µm; Material: Acero inoxidable; Explosion proof.
17	Compresor	Centrífugo	Presión de salida 3Bar; Potencia 1/4 hp; Explosion proof
18	Válvula	De cheque	Material: Acero inoxidable; Diámetro: 1/2", conexión a proceso: roscado

Tabla 12. Especificaciones de equipo del diagrama representado en la Figura 7. (continuación)

ID	Equipo	Tipo	Especificaciones
19	Intercambiador de calor	Eléctrico	Capacidad 0-20L/min; Potencia: 3kW; Voltaje: 110/220
20	Válvula	Compuerta	Material: Hierro al carbón; Diámetro: 1/4"; conexión: roscado; Tubería aislada
21	Bomba	Centrífuga	Bomba: 1/4hP; motor: 1hP; Velocidad 1750rpm; Dimensiones 1x1x3.8", Material interno: Grafito.
22	Válvula	Globo	Material: Hierro al carbón; Diámetro: 1/4"; conexión: roscado; Tubería Aislada
23	Válvula	Globo	Material: Hierro al carbón; Diámetro: 1/4"; conexión: roscado; Tubería aislada
24	Válvula	Compuerta	Material: Hierro al carbón; Diámetro: 1/4"; conexión: roscado; Tubería aislada
25	Válvula	Compuerta	Material: Hierro al carbón; Diámetro: 1/4"; conexión: roscado; Tubería aislada
26	Válvula	Compuerta	Material: Hierro al carbón; Diámetro: 1/4"; conexión: roscado; Tubería aislada
27	Válvula	Compuerta	Material: Hierro al carbón; Diámetro: 1/4"; conexión: roscado; Tubería aislada

Tabla 13. Resumen de costos del proceso propuesto en las Figuras 6 y 7.

Costo de equipo	Q	363,069.00
Costos de operación por kilogramo de propilen glicol producido	Q	7.84

IX. Discusión

El objetivo de este trabajo fue el diseño y selección de equipo del proceso de producción a escala planta piloto de propilen glicol mediante una hidrogenación selectiva de glicerina vía compuesto intermedio (acetol) a condiciones de temperatura y presión moderada. El diseño elaborado comprende de tres etapas fundamentales: el pretratamiento de la glicerina cruda proveniente del biodiesel, la hidrogenación selectiva de la glicerina, y la separación de los productos. El diseño final fue elaborado fijando una conversión de glicerina a una razón de 2kg/h. El proceso está diseñado para operarse continuamente, con una producción de propilen glicol diaria de 32.93kg. Teniendo así un rendimiento global de 82%. Gran parte del diseño fue elaborado con la ayuda de ChemCad 6, software de simulación de operaciones unitarias en ingeniería química, con una amplia base de datos de propiedades termodinámicas.

El núcleo del diseño, como todo diseño químico, es el reactor. Fue elegido un reactor continuo de concha y tubo empacado del lado de la concha. El reactor fue diseñado de una manera continua ya que la reacción se da en una fase de vapor y es catalizada mediante un catalítico de cobre. Cuando las reacciones son catalizadas heterogéneamente, el envenenamiento del catalítico es de los mayores problemas del proceso. Utilizando un proceso continuo se asegura un mayor tiempo de utilización del catalítico ya que estará en presencia de una menor cantidad de contaminantes. Otra ventaja de un proceso continuo es que las presiones a utilizar para tener una reacción en su fase de vapor son menores a las de un sistema batch, además los coeficientes de transferencia de masa son más altos debido a que solo se tiene una transferencia del vapor hacia el catalítico, luego difusión hacia los poros en donde se da la reacción, y otra transferencia de los poros hacia el vapor nuevamente. En un sistema batch las condiciones de presión son más altas para promover una difusión del hidrógeno hacia la fase líquida, y de esta hacia el catalítico.

Las condiciones fijadas para la reacción fueron de 210°C y 2 bares de presión. Debido a que la reacción global se divide en dos reacciones, conversión hacia acetol e hidrogenación hacia propilen glicol, las condiciones se eligieron de tal modo que se tuviera una conversión adecuada, una selectividad alta hacia el intermedio y un equilibrio alto hacia la producción de propilen glicol. Con estas condiciones se obtiene una conversión de 100% de glicerina, con una selectividad hacia el acetol de 93.11%, del cual el 90% se convierte en propilen glicol, y el 10% restante no se obtiene debido a restricciones en el equilibrio de la reacción. La distribución de los productos a la salida del reactor consisten en su mayoría propilen glicol, agua y acetol, los subproductos del proceso son etilen glicol y propanol principalmente.

La alimentación hacia el reactor se hace a partir de glicerina previamente tratada de forma química, se eligió un proceso de tratamiento químico para quitar todos los interferentes que puedan contaminar el catalítico en el reactor. Este tipo de tratamiento se limita a remover por precipitación solo algunos interferentes que pueda tener la glicerina como ácido fosfórico, sales de fosfato, y sales de sodio. Si se tienen

contaminantes como cloruros o sulfatos, la reacción no se dará pues estos compuestos son sumamente contaminantes para el catalítico, pudiendo desactivarlo totalmente en concentraciones de mg/L. Esta glicerina tratada puede contener hasta un máximo de 10% de agua para evitar una reducción en la selectividad hacia el acetol. La glicerina a 210°C y 2 bares se encuentra en estado líquido, y para transportar 3kg/h de vapor de glicerina a estas condiciones se utilizó el hidrógeno como un gas de transporte. A flujos mayores de 175L/min, se puede arrastrar 2kg/h a las condiciones establecidas sin ningún problema, además pequeñas concentraciones de agua en la glicerina aumentan la volatilidad de la mezcla haciendo su transporte más fácil. Utilizando presiones mayores y temperaturas menores el arrastre de glicerina se convierte inoperable, debido a que los flujos de hidrógeno requeridos aumentan hasta 6 veces su magnitud. Para mantener estas condiciones dentro del reactor se diseñó un equipo enfriamiento con aceite térmico a temperaturas cercanas a 200°C. Es necesario este tipo de sistema ya que la reacción es exotérmica, entonces si no se controla la temperatura mediante un enfriamiento liviano las condiciones en el reactor se modifican aumentando la velocidad de conversión y disminuyendo la selectividad hacia el producto de interés. Este mismo sistema térmico se diseñó para el calentamiento de un evaporador de acero inoxidable de 30L de capacidad, en el cual se encuentra la glicerina tratada para ser arrastrada con hidrógeno. El material elegido para toda la línea de alimentación y salida del reactor fue acero inoxidable para evitar contaminaciones en el catalítico.

En la salida del reactor se diseñó un condensador de concha y tubo para separar los productos del hidrógeno en la mezcla. Este condensador trabaja con agua como líquido de enfriamiento, con flujos pequeños debido a que el flujo saliente del reactor es aproximadamente de 3kg/h, este flujo se puede enfriar a temperatura ambiente con flujos tan pequeños de agua desde 1L/min. El material elegido fue acero inoxidable debido a que existirá constante condensación de vapores, lo que hubiera podido ocasionar abrasión en otro tipo de material. La separación de estos componentes tiene dos objetivos, la separación del hidrógeno para su recirculación al sistema y la condensación del resto de compuestos para la destilación y separación del propilen glicol. Para la recirculación del hidrógeno se utilizó un filtro deshumidificador para separar los vapores restantes de la condensación, después del filtro se colocó un compresor centrífugo de 1/4hP en operación adiabática para elevar la presión y temperatura del hidrógeno para ser reingresado al sistema.

El condensado saliente del intercambiador de concha y tubos pasa a su etapa final del proceso, a la separación por destilación. Para la simulación de esta destilación se utilizó el método de separación multicomponente de Fenske-Underwood-Gillian (FUG), con este método se determinó la cantidad de platos necesarios, el plato de alimentación óptimo, el reflujo mínimo y demás condiciones necesarias para el diseño de una columna de destilación. La columna necesaria es de 17 platos con una altura de 2.2 m y un diámetro de 0.1 m, con condensador de 0.5kW y rehervidor de 0.75kW. La operación de la torre se realiza a una razón de reflujo de 1.5 veces el reflujo mínimo. A estas condiciones la torre será capaz de destilar 2 kg/h de producto, obteniendo el 99% del acetol alimentado en el destilado y el 99% de propilen glicol de la alimentación en la parte inferior de la torre. En este diseño no se planteó una recirculación del acetol hacia el proceso, ya que el propósito inicial fue minimizar el contenido del acetol saliente del reactor forzando el equilibrio hacia la

producción de propilen glicol. El rendimiento del proceso desde la alimentación hasta la separación tiene un 82% de rendimiento global del proceso.

Los costos de equipo de la planta piloto son de aproximadamente Q363,069.00, datos provenientes de cotizaciones locales, internacionales vía internet, y aproximadas mediante métodos de relaciones de capacidad con índices de costos. Los costos de operación totales para el proceso son de Q258.19 diarios con una producción de propilen glicol de 32.93kg. Esto equivale a Q7.84 el costo de producción de un kilogramo de propilen glicol. De este costo Q2.77 proviene de materia prima (asumiendo una vida del catalítico de 30 días operando continuamente) y Q5.07 corresponde a costos energéticos. Sabiendo que el costo del kilogramo de propilen glicol industrial en el mercado internacional se encuentra entre Q10 - Q12 el kilogramo, el proceso tiene un gran potencial para su producción a gran escala.

X. Conclusiones

- A. El rendimiento global del proceso con el diseño propuesto es de aproximadamente 82%, obteniendo así una producción diaria de 32.93kg a partir 48kg de glicerina diarios.

- B. El costo estimado del equipo para la planta piloto es de Q363,069.00 siendo el más representativo el costo de la columna de destilación. Los costos de operación son de Q5.07/kg propilen glicol correspondientes al gasto energético y Q2.77/kg propilen glicol a los costos de la materia prima utilizada. Estos representa un costo de producción de Q7.84 por kilogramo de propilen glicol. Esto representa una buena oportunidad para futuras producciones a escala industrial.

- C. El diseño está conformado mayoritariamente con acero inoxidable para evitar contaminación en el catalítico y para evitar abrasión dentro de los equipos. Además los flujos a operar en el sistema están controlados principalmente por bombas peristálticas y válvulas de control. El tamaño de tuberías se encuentra entre $\frac{1}{4}$ y $\frac{1}{2}$ pulgada para todo el sistema.

- D. El pretratamiento de la glicerina es fundamental para obtención de rendimientos altos y para la conservación de la actividad del catalítico. Pequeñas trazas de contaminantes pueden anular la conversión de la glicerina hacia acetol.

XI. Recomendaciones

- A. Se recomienda realizar estudios posteriores sobre análisis de recuperación de productos en el proceso, como recirculación de acetol, recuperación de agua, interconexión de sistema térmico a los diferentes procesos para aumentar la eficiencia energética del proceso.
- B. Se recomienda realizar simulaciones más rigurosas en el reactor para determinar perfiles de concentración más aproximados a lo largo del reactor, tomando en cuenta difusiones radiales y no solamente axiales como se consideró en el presente trabajo.
- C. Se recomienda utilizar glicerina proveniente de producción de glicerina en los cuales no se haya utilizado ácido clorhídrico, o sulfúrico para bajar el pH del aceite a transesterificar, ya que si contiene trazas de cloruro o sulfatos las conversiones de la glicerina son nulas.
- D. Se recomienda realizar estudios sobre tratamiento químico de glicerina continuo para unificar la naturaleza de todo el proceso y volver el proceso en un proceso totalmente continuo.
- E. Se recomienda utilizar el dimensionamiento del reactor propuesto o bien de un reactor con un tamaño superior para realizar estudios en los efectos de la distribución del catalítico, la longitud de empaque, alimentación de glicerina, hidrógeno, etc. Y así tener un panorama más amplio del proceso en sí.
- F. Se recomienda mantener las condiciones de operación con basicidad moderada ya que a pH muy alto el acetol tiende a polimerizarse y baja el rendimiento del proceso.
- G. La operación del proceso se recomienda realizarla entre 190-210°C, y 0.5-4 bares, para evitar selectividades muy bajas hacia el acetol y propilen glicol que afecten la rentabilidad del proceso.
- H. Se recomienda tomar en cuenta todas las medidas de seguridad para la instalación y operación de la línea de hidrógeno.
- I. Se recomienda considerar otros tipos de diseño para el reactor y estudiarlos a nivel de planta piloto para determinar que reactor es el más efectivo para un escalamiento a nivel industrial.

XII. Bibliografía

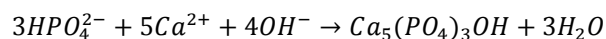
- A. Runberg, J. Baiker, J. Kijenski, 1985. *Applied Catalysis*. 17 (1985) 309
- B. Casale, A.M. Gomez. 1993 *Us Patent 5,214,219*.
- B. Casale, A.M. Gomez. 1994. *Us Patent 5,276,181*.
- C. Montassier, D. Graud, J. Barbier, *Heterogeneous Catalysis of Fine Chemicals*, (1988) 165
- C. Tessie. 1987. *Us Patent 4,642,394*.
- C.W. Chiu, L.G. Schumacher, G.J. Suppes. 2004. *Impact of cold floy improvers on soyben biodiesel blend*. Biomass and Bioenergy, In Press.
- Chemical Cost Guide 2008. <http://ed.icheme.org/costchem.html>
- Chuang-Wei Chiu. Diciembre 2006. *Catalytic conversion of glycerol to propylene glycol: Synthesis and Technology Assessment*. Missouri-Columbia
- D.C. Cameron, C.L. Cooney. 1986. *Biotechnology 4*
- Dasari, Mohanprasad; Kiatsimkul, Pim-Pahn; Sutterlin, Willian; Suppes, Galen J. 2005. *Low-pressure hydrogenolysis of glycerol to propylene glycol*. Departamento de Ingeniería química, Universidad de Missouri, Columbia USA.
- Froment, Gilbert. 1979. *Chemical Reactor Analysis and Design*. John Wiley & Sons.
- Higgins Jenna. 2002. *On the Road to Fueling the Future*. Bioenergy'02, Proceedings, Paper 2062, Publicadopor: Pacific Regional Biomass Energy Program, Boise, ID, Sep2002
- Hilder, M. 1998. *Reactor design and safety*. Univeler Research, Manufacturing Application Group. Vlaardinge, Holanda.
- Maloney, James. 2008. *Perry`s chemical engineers` Handbook*. 8th Edition. McGraw-Hill

- McCabe Smith. 1989. *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. 4ta Edición. McGraw-Hill.
- Peters M. Klaus, M. 1991. *Plants Design and Economics for chemical engineers*. 4ta Edición. McGraw-Hill. Singapore.
- R. Habaut, J. P. Bonnelle, J. 1989. *Mol. Catal.* 55 (1989) 170.
- S. Ludwig, E. Manfred. 1997. *Us Patent 5,616,817*.
- Schmidt D. Lanny. 1998. *The Engineering of Chemical Reactions*. Universidad de Minnesota. Oxford University Press. Nueva York. Estados Unidos
- Suppes, G. J., M.A. Dasari, E.J. Doskocil, P.J. Mankidy, M.J. Goff 2004. *Transesterification of Soybean Oil with Zeolite and Metal Catalyst*. *Catalysis A: General*, 257, 213-223.
- Suppes, G.J., M.J., Goff, and M. Dasari. 2002. *Homogeneous Alcoholysis Kinetics of Soyben Oil*. *JAOCS*
- T. Haas, A. Neher, D. Arntz, H. Klenk, W. Girke. 1995. *Us Patent 5,426,249*

XIII. Apéndice

A. Cálculos de diseño de pretratamiento de glicerina

Para el tratamiento de glicerina se utilizará un método químico para precipitar todos los interferentes que puedan contaminar el catalítico en el reactor. Estos son: fosfatos y sales de sodio. Para esto se utilizará la siguiente reacción



1. Cálculos para el diseño del tanque. Este tipo de reacción produce diferentes tipos de sales con el sodio que también pueden ser removidas de la glicerina. Para una alimentación de glicerina con las siguientes propiedades

Tabla 14. Composición de glicerina cruda

Temperatura (K)	298.15
Presión (Bar)	1.00
Flujo mol/h	27.84
Ácido Fosfórico (mol/mol)	0.018
Trifosfato de Sodio (mol/mol)	0.0022
Glicerina (mol/mol)	0.78
Agua	0.20

Para el tratamiento de esta corriente se necesita la siguiente cantidad de moles de CaOH,

$$0.501 \text{ mol Trifosfato de Sodio} \rightarrow 0.8352 \text{ mol Ca(OH)}_2$$

$$0.0612 \text{ mol Ácido Fosfórico} \rightarrow 0.102 \text{ mol Ca(OH)}_2$$

$$Ca(OH)_2 = 0.102 + 0.8352 = 0.9372 \text{ mol} \rightarrow 67.48 \text{ g}$$

$$\text{Se utilizará una razón de } \frac{31.26 \text{ g Ca(OH)}_2}{\text{kg Glicerina Cruda}}$$

Debido a que el proceso es a escala planta piloto es mejor tratar una buena cantidad de glicerina cruda de forma batch en un tanque y luego esta alimentarla de forma continua hacia el evaporador de simple efecto. Para poder trabajar continuamente durante un día se necesita un tanque que almacene 51.84kg de glicerina tratada (41.4L). Por lo tanto se diseñó un tanque con una capacidad nominal de 60L.

$$Volumen = \frac{\pi D^2}{4} \cdot h$$

Además se recomienda la siguiente relación para altura y diámetro

$$\frac{h}{D} = 1.5$$

Por lo tanto

$$0.06m^3 = \frac{\pi D^2}{4} \cdot 1.5D \rightarrow D = 0.172m \text{ y } h = 0.26m$$

El material será de acero inoxidable para evitar contaminaciones de metales que agoten el catalítico en el reactor.

B. Cálculos de diseño de reactor

1. Cálculos para determinar la velocidad de reacción. La conversión de la glicerina hacia propilen glicol está constituida por dos reacciones en serie. La primera etapa de la reacción es la conversión de la glicerina en acetol (Ac) por un medio catalítico de cromita de cobre. Esta reacción está limitada cinéticamente, esto implica que esta reacción es la que establece la velocidad de la reacción global. La segunda reacción es la hidrogenación de acetol a propilen glicol utilizando el mismo medio catalítico.

A continuación se muestra una tabla para la velocidad de conversión de glicerina en la primera etapa de la reacción:

Tabla 15. Velocidad de conversión de glicerina en función de la temperatura.

T (C)	Ko (mol/h*gCatalítico)
220	0.19
230	0.36
240	0.53

Reacciones realizadas a 14.5psi = 1 bar en un reactor de cama empacada. (Chuang-WeiChiu)

Teniendo en cuenta que una reacción sigue la relación establecida por Arrhenius

$$\ln k_o = \ln A - \frac{E}{R} \left(\frac{1}{T} \right)$$

Graficando $\ln k_o$ contra $\frac{1}{T}$ como se muestra en la Figura 16, se obtiene la siguiente relación

$$\ln k_o = 24.737 - 13000 \left(\frac{1}{T} \right) \rightarrow k_o(T) = 5.53 \times 10^{10} e^{\frac{-13000}{T}}$$

2. Cálculos para determinar la selectividad hacia acetol y propilen glicol. La conversión de la glicerina en la primera etapa de la reacción puede darse hacia una gran variedad de productos, sin embargo

se desea su conversión hacia acetol que servirá como intermedio de la reacción. Los estudios realizados por Chuang-WeiChiu se realizaron en un reactor continuo de cama empacada por lo que las dos reacciones se dan dentro del mismo reactor, entonces la selectividad se definirá como la cantidad de moles convertidos en acetol o bien propilen glicol. La distribución de los productos obtenidos en la conversión de la glicerina a diferentes temperaturas en un reactor de cama empacada se muestra a continuación.

Tabla 16. Conversión de glicerina en el proceso de hidrogenación.

T (C)	Conversión %	Acetol	Propilen Glicol	Agua	otros subproductos	Rendimiento %
200	78.1	26.1	35.3	15.8	2.3	78
210	91.6	30.6	39.3	18.6	3.2	85.6
220	100	32.1	42.4	20.9	4.6	91.2
230	100	32.3	38.7	23.2	5.9	87
240	100	31.4	35.1	25.6	8.3	81.5

Reacciones realizadas a 14.5psi = 1 bar en un reactor de cama empacada. (Chuang-WeiChiu)

A partir de la tabla anterior se puede determinar la selectividad de la glicerina hacia el acetol + propilen glicol. La selectividad se puede definir como la cantidad del producto deseado obtenido respecto a la cantidad de reactivo consumido. En este caso la selectividad se define de la siguiente manera:

$$Selectividad (S) = \frac{moles(Acetol + Propilen glicol)}{moles Glicerina consumidos}$$

En la siguiente tabla se muestra la dependencia de la selectividad con la temperatura de reacción.

Tabla 17. Selectividad hacia propilen glicol y acetol.

T (K)	Selectividad
473.15	96.25%
483.15	93.45%
493.15	91.22%
503.15	86.99%
513.15	81.52%

Graficando las dos variables como se muestra en la Figura 17, se puede observar una dependencia lineal que puede describirse mediante la siguiente ecuación.

$$Selectividad(T) = -0.0036T + 2.6705$$

3. Cálculos para la determinación de la constante de equilibrio. La velocidad de reacción de la segunda etapa es mucho mayor que la primera, por lo que puede considerarse que la velocidad que rige la reacción global es la velocidad de conversión de la glicerina en la primera etapa. La constante de equilibrio de la segunda etapa de la reacción juega un papel muy importante en la velocidad de conversión de glicerina hacia propileno glicol. La constante de equilibrio del sistema se puede escribir de la siguiente manera:

$$k_{eq} = \frac{a_{PG}}{a_{Acetol}a_{H_2}} = k_a$$

Donde a es la actividad. Para el caso de reacciones homogéneas en fase gaseosa la actividad (a) es igual a la fugacidad (f). Además a presiones moderadas la fugacidad es aproximadamente igual a las presiones parciales de cada componente.

$$k_a \cong k_f \cong k_p = \frac{\bar{P}_{PG}}{\bar{P}_{Acetol}\bar{P}_{H_2}}$$

Por lo tanto se puede decir que el equilibrio respecto a la concentración de los componentes en la mezcla gaseosa k_Y (tomando en cuenta que la presión parcial de un componente es el producto de su fracción molar por la presión total) es la siguiente:

$$k_p = \frac{k_Y}{P_{total}} = \frac{Y_{PG}}{Y_{Acetol}Y_{H_2}} \cdot \frac{1}{P_{Total}} \rightarrow k_Y = k_p P_{Total}$$

Además la constante de equilibrio k_p mantiene la siguiente relación respecto a la temperatura

$$\ln k_p = \frac{A}{T} + B$$

Donde A y B son constantes arbitrarias. La siguiente tabla muestra las relaciones entre el $\ln k_p$ y $\frac{1}{T}$.

Tabla 18. Dependencia de la temperatura en la constante de equilibrio K_p

$1/T$	$\ln K_p$
0.001945	-0.1
0.002035	0.6
0.00211	0.9
0.00218	1.55

Reacciones realizadas a 14.5psi = 1 bar en un reactor de cama empacada. (Chuang-WeiChiu)

Los datos se graficaron y se presentan en la Figura 18, esta muestra una tendencia lineal respecto a las dos variables como era de esperarse. Las variables guardan la siguiente relación:

$$\ln k_p = \frac{6728.1}{T} - 13.173 \rightarrow k_p = 1.901 \times 10^{-6} e^{\frac{6728.1}{T}}$$

4. Cálculos para optimización de P y T en conversión de glicerina. Para la optimización de las variables se escogió un intervalo de presión de 1-4 bar y de temperatura de 190-240C. En el caso de la presión para la conversión de la glicerina hacia acetol en fase vapor no tiene influencia en la velocidad de reacción ya que la velocidad de reacción únicamente depende de las concentraciones de los reactivos, la energía de activación y consecuentemente la temperatura. A partir de la ley de Arrhenius se puede encontrar la constante de velocidad de conversión de la glicerina en la primera etapa de la reacción, de la siguiente manera:

$$\ln k_o = 24.737 - 13000 \left(\frac{1}{T} \right) \rightarrow k_o(T) = 5.53 \times 10^{10} e^{\frac{-13000}{T}}$$

Como se puede observar la función anterior es creciente en todo intervalo, es decir la conversión de glicerina se ve beneficiada a temperaturas altas. La temperatura, en el intervalo propuesto, se maximiza en 513.15K (240°C).

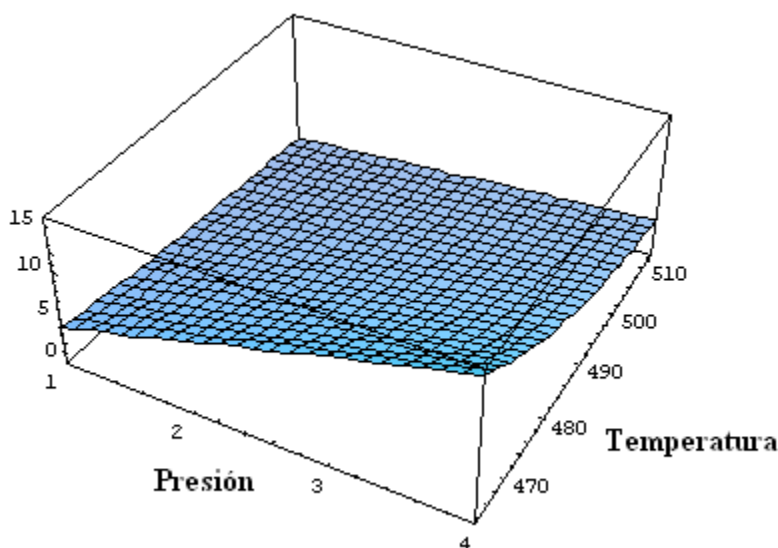
5. Cálculos para optimización de T en la selectividad del acetol. La selectividad de la primera etapa de la reacción hacia el acetol es de suma importancia ya que es el intermedio para la producción del propilen glicol. Con la selectividad hacia el acetol aumentan las probabilidades que los productos no deseados disminuyan. La función de la selectividad respecto a la temperatura es la siguiente:

$$\text{Selectividad}(T) = -0.0036T + 2.6705$$

Ésta es una función decreciente en todo intervalo, lo que indica que la selectividad hacia el acetol y propilen glicol aumenta cuando disminuye la temperatura. Por lo tanto la selectividad se maximiza a 463.15K (190°C).

6. Cálculos para optimización de P y T en el equilibrio. La segunda etapa de la reacción está limitada principalmente por el equilibrio, ya que la hidrogenación del acetol es mucho más rápida que la conversión de la glicerina en acetol lo que no modifica la velocidad global de la reacción. Sin embargo esta reacción se ve muy afectada por el equilibrio químico. Las condiciones de equilibrio se deben optimizar mediante el principio de Le Châtelier que indica que Si un sistema en equilibrio es perturbado por un estrés externo, el sistema desplazará su posición de equilibrio de modo que se contrarreste el efecto de la perturbación. Modificando la presión y la temperatura se logrará desplazar el equilibrio hacia los productos. El equilibrio se ve afectado por la temperatura y la presión de la siguiente manera:

$$k_Y = k_P P_{Total} = P \cdot \left(1.901 \times 10^{-6} e^{\frac{6728.1}{T}} \right)$$

Figura 8. Constante de Equilibrio k_y en función de T(K) y P(Bar)

Como se muestra en la Figura 8, la constante de equilibrio se maximiza a temperaturas bajas y altas presiones. $P = 4$ bares, y $T = 463.15$ K. A estas condiciones la constante de equilibrio k_y es 15.4868 mol^{-1} .

Para la maximización global de las condiciones del proceso se debe evaluar la importancia que se le asignen a las variables del proceso. La selectividad hacia los productos deseados es la condición más importante ya que los costos de separación disminuyen y se aprovechan mejor los recursos, una selectividad mayor al 90% ya es considerada una muy buena selectividad. Posteriormente conducir el equilibrio hacia el propilen glicol es muy importante para disminuir costos en la separación acetol - propilen glicol, por último se evalúa la velocidad de conversión de la glicerina sin dejar de ser importante ya que un proceso muy lento no es conveniente de igual forma ya que para producciones posteriores a gran escala se tendría que utilizar equipos muy grandes por lo consiguiente muy caros. Se fijó un parámetro mínimo de selectividad de 90%, a continuación se muestra una tabla con los valores calculados de cada variable a diferentes condiciones.

Tabla 19. Condiciones según la temperatura de operación

T (°C)	K_o (mol/gCat*h)	K_y (2Bar) (mol^{-1})	Selectividad (mol acetol + mol propilen glicol)/ mol glicerina
190	0.035699396	7.743423078	0.9912
195	0.048178677	6.630580992	0.98516
200	0.064609625	5.69631874	0.96716
205	0.086114098	4.90926423	0.94916
210	0.114095554	4.24399764	0.93116
215	0.150300342	3.679843842	0.91316
220	0.196890217	3.199924774	0.89516*

* Selectividad < 0.9

Para obtener una buena selectividad, velocidades de reacción aceptables, y un buen equilibrio hacia los productos deseados, el reactor debe trabajar 2 bares y a temperaturas entre 200-210 °C.

7. Cálculos para densidad de empaque de catalítico. El empaque de catalítico es muy importante, pues es necesario determinar las condiciones óptimas de la densidad del catalítico dentro del reactor. Poca densidad causaría muy poca conversión y mucho catalítico es probable que se den reacciones secundarias que generen productos indeseados. Además poner catalítico en exceso aumenta las caídas de presión en el sistema, sin mencionar que aumentan los costos. Por otra parte el tamaño de la partícula, para evitar caídas de presión grandes, debe estar dentro del rango de 1 a 5 mm (Perry 2007). La velocidad de la reacción respecto a la concentración del catalítico es de primer orden (Chuang-WeiChiu), lo que indica que al aumentar la concentración del catalítico dentro del sistema aumentara la velocidad de conversión de la glicerina. Sin embargo a saturaciones de catalítico el orden de la reacción puede cambiar de 1 a 0.5, lo que bajaría la eficiencia de catálisis (Perry 2007).

Otra complicación sobre el catalítico es que la actividad decrece respecto al tiempo. El catalítico puede desactivarse químicamente (envenenamiento y agentes enmascarantes), térmicamente, o mecánicamente. En los trabajos de Chuang-WeiChiu y Dasari *et. al.*, se muestra que el catalítico mediante métodos de reducción antes de su desactivación el catalítico dura varios días sin mostrar desactivación. Una densidad de empaque de catalítico levemente inferior o igual a su densidad a granel (0.8g/cm^3) sería la óptima para aprovechar una superficie de partículas alta y velocidad alta de conversión del producto respecto a la longitud de empaque. Por lo tanto se recomienda una densidad de catalítico en el empaque de ($600\text{-}800\text{kg/m}^3$)

8. Cálculos para el flujo de hidrógeno. El flujo de hidrógeno para favorecer la producción de propilen glicol debe ser muy alto. Como muestra la constante de equilibrio una concentración alta en el sistema de hidrógeno favorece la producción de propilen glicol. En la Figura 20, como muestra los estudios de Chuang-WeiChiu el aumento del flujo de hidrógeno favorece a la producción de propilen glicol.

$$k_Y = k_p P_{Total} = P \cdot \left(1.901 \times 10^{-6} e^{\frac{6728.1}{T}} \right)$$

$$(P = 2\text{Bar}, T = 483.15) \rightarrow k_Y = 4.244$$

$$4.244 = \frac{Y_{PG}}{Y_{Acetol} Y_{H_2}}$$

Considerando un equilibrio instantáneo se puede aproximar que $Y_{Acetol} \approx \text{Selectividad}(T) \cdot Y_{Glicerina \text{ de Alimentación}}$. Por ejemplo si consideramos como base de diseño un $2 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$ la alimentación de la glicerina ($F_{Glicerina} = 21.727 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$), al inicio de la reacción:

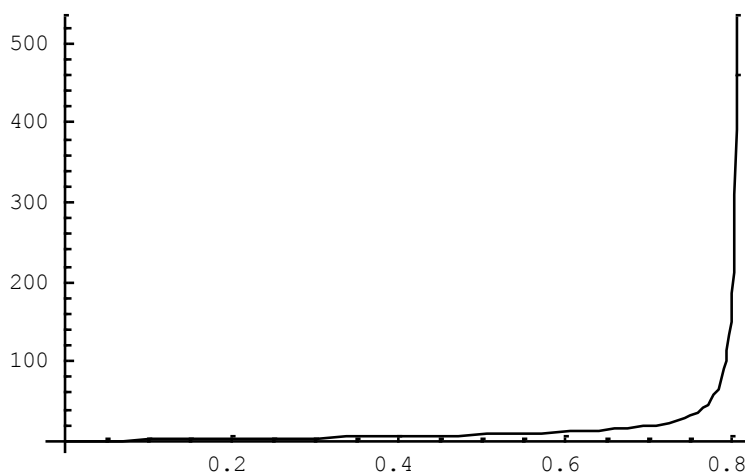
$$\begin{aligned}
 \text{Selectividad}(T) \cdot k_y &= \frac{Y_{PG}}{Y_{Glicerina} Y_{H_2}} = \frac{F_{PG}}{F_{Glicerina} F_{H_2}} \cdot F_{Total} \\
 F_{PG_0} &= 0, \quad F_{total} = F_{Acetol} + F_{H_2} - F_{PG} \\
 F_{Acetol} &= \text{Selectividad}(T) \cdot F_{Glicerina}
 \end{aligned}$$

Por lo tanto la reacción en el equilibrio

$$\text{Selectividad}(T) \cdot k_y = \frac{F_{PG}}{(F_{Glicerina} - F_{PG}) \cdot (F_{H_2} - F_{PG})} \cdot F_{Total}$$

Resolviendo para flujos muy altos de hidrógeno, el acetol se convierte en propilen glicol a una relación máxima de $\frac{F_{PG}}{F_{Acetol}} = \frac{k_y}{k_y+1} \rightarrow \frac{F_{PG}}{F_{Glicerina}} = \text{Selectividad}(T) \cdot \frac{k_y}{k_y+1}$, Para determinar el flujo de hidrógeno a las condiciones establecidas de operación (P = 2Bar, T = 483.15)

Figura 9. Fo(H2) L/min en función de la conversión de propilen glicol $\frac{\text{molPG}}{\text{molAcetol}}$, a condiciones óptimas (P = 2Bar, T = 483.15) para una alimentación de 2kg/h de glicerina.



Por lo tanto las condiciones de alimentación de hidrógeno para lograr el mejor rendimiento de propilen glicol deben ser superiores a 50L/min. Estas condiciones no variarían ya que las caídas de presión del fluido a través de este tipo de empaque son de 0.5 psi/m, esto resulta realmente insignificante para el equilibrio del sistema. (Chuang-WeiChiu)

9. Cálculos para el dimensionamiento de reactor. Debido a la naturaleza del catalítico, el diseño del reactor debe considerar un tipo de reactor que asegure una larga vida del catalítico. Los reactores continuos son ideales para este tipo de proceso. En este caso se diseñaría un reactor tipo concha y tubo (Shell and Tube reactor) empacado por la parte de la concha y enfriado por medio de los tubos interiores. Las dimensiones del equipo se calcularon a partir del tiempo de residencia y los fenómenos de transferencia dentro del reactor.

Considerando que los gradientes de concentración y temperatura se dan únicamente en dirección axial. Las ecuaciones de conservación pueden escribirse de la siguiente manera:

$$\left\{ \begin{array}{l} -u_s \frac{dC_A}{dz} = \rho_B r_A \\ u_s \rho_g c_p \frac{dT}{dz} = (-\Delta H) \rho_B r_A - 4 \frac{U}{d_t} (T - T_r) \\ -\frac{dp_t}{dz} = \frac{2f \rho_g u_s^2}{g d_p} \end{array} \right.$$

(Froment, 1979)

C = concentración,
 u_s = velocidad lineal del fluido,
 $z = 0$,
 ρ = densidad,
 r = velocidad de reacción,
 c_p = capacidad calorífica,
 $-\Delta H$ = Entalpía de reacción,
 U = coeficiente de transferencia térmica,
 T = Temperatura,
 p_t = Presión total,
 d_p = diametro de partícula del catalítico

Las condiciones iniciales son

$$z = 0, \quad T = T_o, \quad C_A = C_{A_o}, \quad p_t = p_{t_o}$$

La primera ecuación hace referencia al balance de masa en una sección transversal del reactor con una cantidad de catalítico dW , donde u_s es la velocidad lineal del flujo de alimentación, C es la concentración del producto, z la longitud del reactor, ρ la densidad y r_A la velocidad de reacción. Cuando se realiza un balance respecto a la cantidad del catalítico en el reactor el balance de masa es el siguiente: (Froment, 1979)

$$\begin{aligned} r_A dW &= F_{A_o} dx_A \\ r_A \rho_B \Omega dz &= F_{A_o} dx_A \end{aligned}$$

Donde F_{A_o} es la corriente de alimentación, x_A la fracción molar de la corriente, ρ_B la densidad del catalítico y Ω el área transversal del reactor. Teniendo en cuenta que el reactor a diseñar es isotérmico la velocidad de reacción y la velocidad lineal axial son constantes. Por lo tanto el balance se puede integrar de la siguiente manera

$$\begin{aligned} r_A \rho_B \Omega \int_0^z dz &= F_{A_o} \int_1^0 dx_A \\ r_A \rho_B \Omega z \Big|_0^z &= F_{A_o} x_A \Big|_1^0 \\ r_A \rho_B \Omega z = F_{A_o} &\rightarrow z = \frac{F_{A_o}}{r_A \rho_B \Omega} \end{aligned}$$

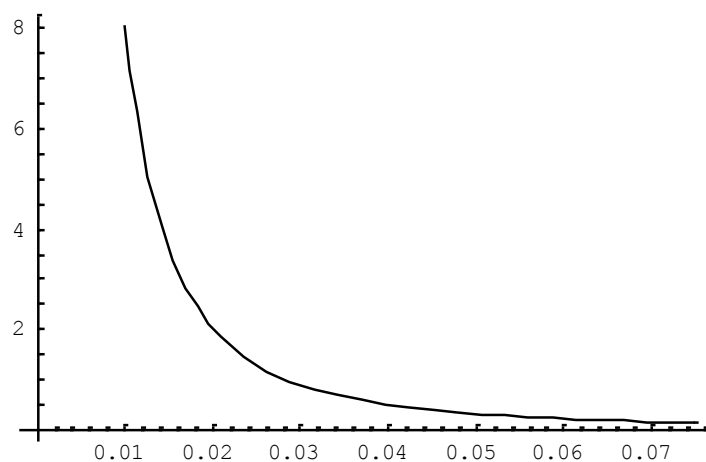
Para una temperatura de 210°C (483.15) $r_A = 114.1 \frac{\text{mol}}{\text{kg} \cdot \text{h}}$, $\rho_B = 600 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$, $F_{A_0} = 21.727 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$

$$z = \frac{21.727 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{114.1 \frac{\text{mol}}{\text{kg} \cdot \text{h}} \cdot 600 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot \Omega} = \frac{3.17 \times 10^{-4}}{\Omega} \rightarrow z \cdot \Omega = V_{\text{Reactor}}(\text{sección empacada})$$

Los reactores continuos de concha y tubo suelen ser mucho más largos que anchos para aumentar el tiempo de residencia del fluido, para tener más control en su operación. Sin embargo intercambiadores muy largos provocan caídas de presión altas ya que aumenta su velocidad lineal dentro del reactor. A continuación se muestra una relación de diámetro altura de la ecuación anterior, sabiendo que del área del tubo cilíndrico el 25% debe de estar ocupado por tubos de enfriamiento con aceite térmico para garantizar un proceso isotérmico.

$$z = \frac{3.17 \times 10^{-4}}{\Omega} = \frac{4 \times 3.17 \times 10^{-4}}{0.75 \cdot \pi D_i^2}$$

Figura 10. Longitud de empaque Z (m) en función del diámetro interno Di (m)



Una elección de un diámetro interno de 2 pulgadas (0.0508m), da como resultado una longitud de aproximada de $z = 0.6\text{m}$. Una longitud representativa con un diámetro relativamente pequeño se apega a las condiciones propuestas en el modelo matemático pues el cambio de concentración axialmente es mucho más representativo que el radial. A esta cantidad de empaque es suficiente un reactor con una longitud de 1m, este sobredimensionamiento da flexibilidad para aumentar la producción, modificar condiciones de temperatura y presión ya que la longitud de empaque es función de estas dos, por lo tanto la longitud de elegida es la siguiente

$$Z_{\text{real}} = 1.6Z \rightarrow Z_{\text{real}} = 0.6 \cdot 1.6 \approx 1\text{m}$$

Los tubos internos del reactor que llevarán aceite térmico para mantener la temperatura del reactor constante ocupan el 25% del área interna del intercambiador como se mencionó anteriormente. El dimensionamiento de los tubos es el siguiente:

$$A_{Enfriamiento} = 0.25 \cdot \frac{\pi D_i^2}{4}$$

$$A_{Enfriamiento} = 5.06 \times 10^{-4}$$

Se introducirán tres tubos por lo tanto el área transversal que debe ocupara cada tubo de enfriamiento debe ser de 1/3 del Área total

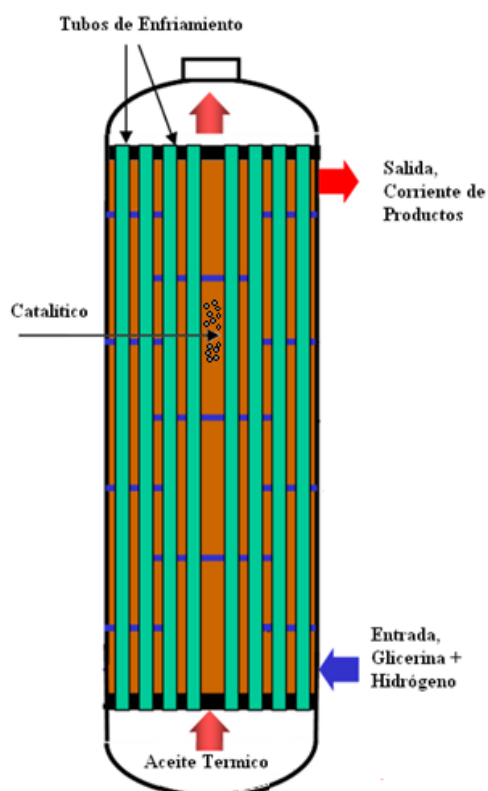
$$\frac{1}{3} A_{Enfriamiento} = \frac{\pi d_o^2}{4} \rightarrow d_o = 0.01465 \approx \frac{1}{2} \text{ pulg}$$

Entonces las dimensiones propuestas para el reactor son las siguientes:

Tabla 20. Dimensiones de reactor

Longitud	Diámetro interno de concha	Cantidad de tubos de enfriamiento	Diámetro externo de tubos de enfriamiento	Material
1m	0.0508 m (2")	3	1/2 pulgada	Acero inoxidable

Figura 11. Esquema de reactor de cama empacada



10. Cálculos para el diseño y selección de equipo auxiliar de reactor

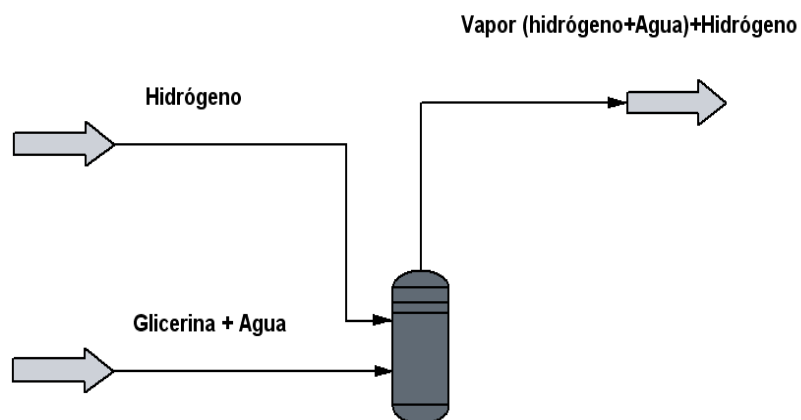
a. Cálculos para el diseño del evaporador para alimentación de glicerina e hidrógeno. Como se muestra en el esquema de la sección del reactor, se necesita un evaporador para vaporizar la glicerina con arrastre de hidrógeno. Con la ayuda del simulador *Chemcad 6*, se realizó un modelo riguroso para determinar el flujo necesario de nitrógeno para arrastrar los 2kg/h de glicerina propuestos para el proceso como se muestra en la Figura 6. A continuación se muestra el arrastre obtenido a diferentes flujos de hidrógeno a condiciones de evaporación de 2Bar y 483.15K.

Tabla 21. Flujo de hidrógeno requerido para el arrastre de glicerina

Flujo hidrógeno	Glicerina arrastrada
25	0.681
50	0.606
100	1.17
150	1.731
175	2.01
200	2.292

Se necesita un evaporador para contener 20L de glicerina con un 5% de agua máximo, se alimentará constantemente 2kg/h de glicerina al evaporador para mantener un equilibrio en las corrientes de entrada y salida. El hidrógeno se alimentará a una razón de 175 L/min con una velocidad lineal del gas a 15 m/s para poder transportarlo en una tubería de entre ¼” a ½”. El exceso de hidrógeno se recirculará al sistema.

Figura 12. Simulación de proceso de evaporación en Chemcad 6.0



b. Cálculos para el intercambiador de calor. Para el diseño de un intercambiador de calor se necesita un balance de energía para determinar los requerimientos energéticos del reactor. Este intercambiador será el encargado de mantener la operación del reactor de una forma isotérmica a 210°C (483.15K).

El balance de energía global en el reactor es el siguiente:

$$u_s \rho_g c_p \frac{dT}{dz} = (-\Delta H) \rho_B r_A - 4 \frac{U}{d_t} (T - T_r)$$

Debido a que el proceso es isotérmico

$$0 = (-\Delta H) \rho_B r_A - 4 \frac{U}{d_t} (T - T_r)$$

$$(-\Delta H) \rho_B r_A = 4 \frac{U}{d_t} (T - T_r)$$

La entalpía de reacción a una temperatura T se puede calcular de la siguiente manera:

$$\Delta H_{rxn} = \sum_i^n v_i \Delta H_{f^0}(\text{productos}) + \int_{25}^T C_{p\text{productos}} dT - \int_T^{25} C_{p\text{reactivos}} dT - \sum_i^n v_i \Delta H_{f^0}(\text{reactivos})$$

Si se asume que la capacidad calorífica de la mezcla inicial de reactivos es igual que la de los productos la entalpía de reacción se simplifica de la siguiente forma.

$$\Delta H_{rxn} = \sum_i^n v_i \Delta H_{f^0}(\text{productos}) - \sum_i^n v_i \Delta H_{f^0}(\text{reactivos})$$

Tabla 22. Entalpías de formación

Componente	Entalpía de formación J/mol
Hidrógeno	0
Propilen glicol	-421500
Glicerina	-577900
Agua	-241820

$$\Delta H_{rxn} = -421500 - 241820 + 577900 = -85420 \text{ J/mol}$$

Regresando al balance energía

$$(-\Delta H) \rho_B r_A = -5.8479 \cdot 10^9 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{h}} = -1.624 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{s}}$$

$$4 \frac{U}{d_t} (T - T_r) = -5.518 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{s}}$$

El coeficiente de transferencia de calor global se puede determinar de la siguiente manera:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{\alpha_i} + \frac{eA}{\lambda A_0} + \frac{1A_i}{\alpha_o A_0}$$

α_i = coeficiente de transferencia del lado interno de los tubos de enfriamiento

α_o = coeficiente de transferencia del lado del empaque

$\lambda =$ conductividad térmica del tubo

$A_i =$ Area de transferencia interna

$A_o =$ Area de transferencia externa

Para calcular el coeficiente de transferencia interno, de los tubos de enfriamiento α_i se eligió una velocidad lineal alta del fluido para tener una temperatura constante dentro del reactor. La velocidad lineal es de 2m/s. El coeficiente de transferencia interno será el siguiente (McCabe, 1991)

$$\alpha_i = 0.023 \frac{G^{0.8} k^{2/3} Cp^{1/3}}{D^{0.2} \mu^{0.47}}$$

$$G = \text{Flux másico} \frac{kg}{m^2 \cdot s},$$

$k =$ conductividad,

$Cp =$ capacidad calorífica,

$D =$ diámetro,

$\mu =$ viscosidad.

Para el aceite térmico a 190°C aproximadamente

$$\alpha_i = 0.023 \frac{G^{0.8} k^{2/3} Cp^{1/3}}{D^{0.2} \mu^{0.47}} = \frac{1497^{0.8} \cdot 0.1325^{2/3} \cdot 2444^{1/3}}{0.0127^{0.2} \cdot 1.684 \times 10^{-3}} = 1345.97 \frac{J}{m^2 \cdot s \cdot K}$$

Para el lado del empaque se calcula α_o , y se puede utilizar la siguiente correlación. (Froment, 2009:476)

$$\alpha_o = \frac{\lambda_g}{d_t} 3.5 \left(\frac{d_p G}{\mu} \right)^{0.7} e^{-\frac{4.6 d_p}{d_t}} = 4130.0508 \left(\frac{0.003(0.3374)}{0.0335} \right)^{0.7} e^{-\frac{4.6(0.003)}{0.0508}} = 1871.31 \frac{J}{m^2 \cdot s \cdot K}$$

El coeficiente de transferencia en la pared se calcula de la siguiente manera

$$\frac{e A_i}{\lambda A_m}$$

Debido a que el área es proporcional a $DiDo^2 \rightarrow e\lambda A_i A_m = e\lambda DiDo^2$

El grosor de pared para un tubo de ½ de una cédula 80 es de 0.00373m, por lo tanto

$$\frac{d}{\lambda} \left(\frac{Di}{Do} \right)^2 = \frac{0.00373}{16.3} \left(\frac{0.00897}{0.0127} \right)^2 = 0.0001141$$

Entonces el coeficiente de transferencia global es:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{444} + 0.000162 + \frac{1}{28.09} \left(\frac{0.00897}{0.0127} \right)^2 \rightarrow U = 889.898 \frac{J}{m^2 \cdot s \cdot K}$$

Regresando al balance de energía

$$4 \frac{U}{d_t} (T - T_r) = -5.518 \cdot 10^6 \frac{j}{m^3 s}$$

$$4 \frac{945.395}{0.0127} (T - 210) = -5.518 \cdot 10^6 \frac{j}{m^3 s} \rightarrow T = 190.32^\circ C$$

Para poder mantener el lado de la concha a una temperatura constante de $210^\circ C$, se debe bombear aceite térmico a $2m/s$ a una temperatura de $190^\circ C$. Si se aumenta el flujo, las temperaturas a utilizar son las siguientes.

Tabla 23. Temperatura necesaria para mantener el equilibrio térmico dentro del reactor.

Velocidad Aceite Térmico (m/s)	Temperatura a Bombear C
1	180.67
2	190.32
3	193.92
4	195.86
5	197.08
6	197.93

Para la alimentación de aceite caliente a más de $180^\circ C$ es necesario un intercambiador de calor para fluidos térmicos, con una resistencia eléctrica que mantengan una temperatura constante en toda la línea. Este intercambiador también se utilizará para mantener la temperatura del evaporador con el que se alimentará la glicerina con el arrastre de hidrógeno. El balance de energía se muestra a continuación

$$\dot{m}_{Aceite} \Delta H = \dot{m}_{H_2+Glicerina+Agua} \Delta H$$

$$\dot{m}_{Aceite} Cp(T_1 - T_2) = \dot{m}_{H_2+Glicerina+Agua} (\Delta H)$$

$$\dot{m}_{Aceite} Cp(T_1 - T_2) = \dot{m}_{Glicerina+Agua+H_2} H_2 - (\dot{m}_{Glicerina+Agua} H_1 + \dot{m}_{H_2} H_1)$$

$$\dot{m}_{Aceite} 2500 \times (215 - 210) = -2902.6 - (-4410 + 793.956)$$

$$\dot{m}_{Aceite} = \frac{713.44}{12500} = 0.05707 \frac{kg}{s} = 3.425 \frac{kg}{min} = 3.60 L/min$$

Se debe bombear aceite a razón de $3.60 L/min$. El cambio de temperatura del aceite en todo el sistema, pasando por el evaporador y el reactor, sería de $(215-197.93 = 17.07K)$, por lo tanto la potencia necesaria para el intercambiador es la siguiente:

$$Potencia = \dot{m}_{Aceite} Cp(\Delta T) = 0.05707(2500)(17.07) = 2435.46Watt$$

Asumiendo una eficiencia térmica de 85% , la potencia se convierte en

$$\frac{2435.46Watt}{0.85} = 2865.24Watt \approx 3kW$$

Un intercambiador eléctrico de 3kW es suficiente para el proceso

c. Condensado de productos a la salida del reactor y separación por fase. En la salida del reactor se tendrá una corriente con compuestos con puntos de ebullición bastante altos, por lo tanto es sencillo realizar una separación del hidrógeno con un condensador. La corriente saliente principalmente está constituida por hidrógeno, acetol, propilen glicol, etilen glicol, agua y otros subproductos. Los puntos de ebullición de los componentes del sistema se muestran a continuación:

Tabla 24. Puntos de ebullición de componentes a la salida del reactor

Componente	Punto ebullición °C
Hidrógeno	-252.76
Acetol	145.6
Propilen glicol	187.56
Propanol	97.2
Glicerina	287.85
Agua	100
Etilen glicol	197.3

Debido a que el flujo es bastante pequeño esta separación se utilizará un condensador que reducirá la temperatura hasta temperatura ambiente. Para este intercambio se utilizará un pequeño intercambiador de concha y tubos, los flujos entrantes de agua para el enfriamiento serán pequeños debido a que la mezcla que sale del reactor es muy pequeña. Entonces un pequeño intercambiador será suficiente para condensar todos los productos excepto el hidrógeno.

Tabla 25. Propiedades de la corriente a la salida del reactor

Compuesto	mol/h	kg/h	Fracción
Acetol	2.023	0.150	0.047
Agua	28.688	0.517	0.163
Hidrógeno	508.343	1.025	0.323
Propilen glicol	18.207	1.385	0.437
Propanol	0.649	0.039	0.012
Etilen glicol	0.848	0.053	0.017

Para el dimensionamiento del primer intercambiador de calor de concha y tubos, se debe calcular el coeficiente de transferencia global y con esto calcular el área necesaria de transferencia. El intercambiador de calor a utilizar es un intercambiador de concha y tubos con las siguientes características.

Tabla 26. Características del agua de enfriamiento

Especificación	Valor
Pasos	2
Diámetro concha	2 ”
Cantidad tubos internos	4
Diámetro tubos internos	1/4”
Arreglo	Triangular
Longitud	12 ”
Área transferencia	0.0547 m ²
Material	Acero Inoxidable

Para el cálculo del coeficiente de transferencia del lado de los tubos:

$$Nu = \frac{h \cdot D_e}{k_f} = 0.36 \left(\frac{D_e G_s}{\mu} \right) Pr^{0.33} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14}$$

En donde:

Nu = número de Nusselt.

h = coeficiente individual de película (o, externo; i, interno).

k_f = conductividad térmica del fluido.

Pr = número de Prandtl.

G_s = velocidad másica del fluido

D_e = diámetro equivalente

μ = viscosidad del fluido

μ_w = viscosidad del fluido evaluada a la temperatura de pared de la placa

Para el diámetro equivalente

$$D_e = \frac{2D_o^2}{Pt}$$

Donde Pt = Pitch, de los tubos

La velocidad másica del fluido en la concha es la siguiente

$$G_s = \frac{\dot{m}}{S_b}$$

Donde S_b es el área transversal efectiva y se puede calcular de la siguiente manera:

$$S_b = f_b \frac{\pi D_s^2}{4} - N_b \frac{\pi D_o^2}{4}$$

f_b = Fracción del área de la sección transversal de la carcasa ocupada por la ventana de la placa deflectora (habitualmente 0.1955)

D_s = Diámetro interior de la carcasa

N_b = Número de tubos en la ventana de la placa deflectora

D_o = Diámetro exterior de los tubos

Entonces calculando todos los factores necesarios

$$D_e = \frac{2 \times 0.00635^2}{0.0127} = 0.00635$$

$$S_b = 0.1955 \frac{\pi 0.0508^2}{4} - 6 \frac{\pi 0.00953^2}{4} = 2.697 \times 10^{-4}$$

$$G_s = \frac{\dot{m}}{S_b} = \frac{8.8 \times 10^{-4}}{2.697 \times 10^{-4}} = 3.265$$

Entonces el número de Nusselt resulta el siguiente:

$$\frac{h \cdot D_e}{k_f} = 0.36 \left(\frac{0.00635 \cdot 3.265}{0.00001436} \right) 0.4224^{0.33} \left(\frac{0.00001436}{0.00199} \right)^{0.14} = 196.12$$

Y el coeficiente local de transferencia resulta:

$$h_o = 196.12 \frac{0.2032}{0.00635} = 6275.83 \frac{W}{m^2 \cdot s \cdot K}$$

El coeficiente de transferencia interno de los tubos de enfriamiento es:

$$h_i = 0.023 \frac{G_s^{0.8} k^{2/3} C_p^{1/3}}{D^{0.2} \mu^{0.47}}$$

$$h_i = 0.023 \frac{2631.36^{0.8} 0.6062^{2/3} 4185^{1/3}}{0.00635^{0.2} 0.000927^{0.47}} = 29139 \frac{W}{m^2 \cdot s \cdot K}$$

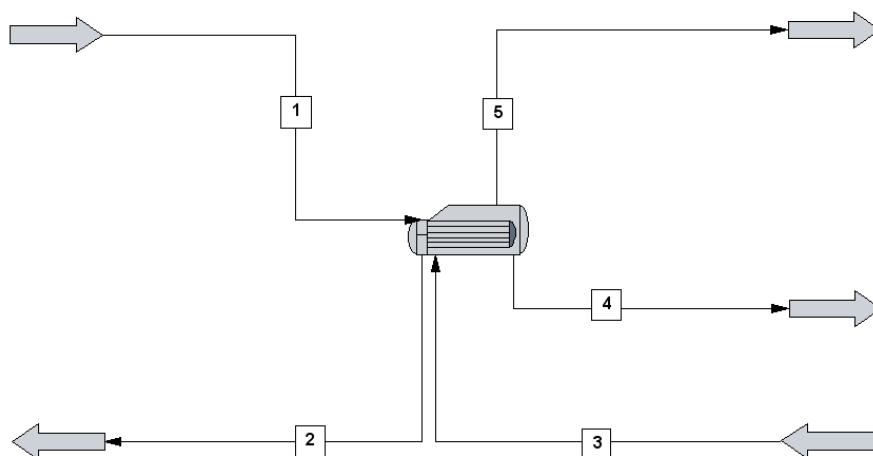
Entonces el coeficiente de transferencia global se puede calcular como

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{e}{\lambda} + \frac{1}{h_i} \frac{d_o}{d_i}$$

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{6275.83} + \frac{0.00124}{16.3} + \frac{1}{29139} \cdot \frac{0.00635}{0.00759} = 0.000264 \rightarrow U = 3785.87 \frac{W}{m^2 \cdot s \cdot K}$$

Teniendo especificado el área y el coeficiente de transferencia global, se pueden determinar las corrientes de salida del condensador.

Figura 13. Simulación de condensador de concha y tubo de 2 pasos



Con la ayuda de Chemcad 6, se realizó una simulación para determinar las propiedades de las corrientes de salida. La siguiente tabla muestra las corrientes representadas por la Figura 7.

Tabla 27. Propiedades de las corrientes de entradas y salidas

	1	2	3	4	5
T (Kelvin)	298.15	321.7796	483.15	298.1508	298.1508
P (Pa)	100000	100000	200000	200000	200000
Fracción Vapor	0	0	1	0	1
H (MJ/h)	-951.523	-945.599	-12.686	-16.959	-1.651
Flujo (kg/h)	60.000	60.000	3.169	2.036	191.862
Propilen Glicol	0.000	0.000	0.437	0.680	0.000
Etilen Glicol	0.000	0.000	0.017	0.026	0.000
Agua	1.000	1.000	0.163	0.208	0.006
Propanol	0.000	0.000	0.012	0.014	0.001
Acetol	0.000	0.000	0.047	0.071	0.000
Hidrógeno	0.000	0.000	0.323	0.000	0.993

La corriente 4 irá hacia una separación en una torre de destilación. La corriente 5 se recirculará para aprovechar el hidrógeno. El tratamiento de estas corrientes se muestra en las secciones correspondientes.

C. Cálculos para el diseño de equipo de separación de productos

Para la separación de productos condensados provenientes del intercambiador de concha y tubos, se utilizará una torre de destilación operada a bajas presiones y temperaturas moderadas. De acuerdo a los componentes establecidos en las corrientes se diseñará la torre de destilación de la siguiente manera.

1. Cálculos para el diseño de columna de destilación. Utilizando el método de Fenske-Underwood-Gillian (FUG) se determinaron la cantidad de platos necesarios para realizar una separación entre el propilen glicol y el acetol en un sistema multicomponente. (Perry, 2007. 13-25) Se utilizó el software ChemCad 6 para determinar diagramas de equilibrio entre el acetol-propilen glicol en un sistema multicomponente mostrado en el Figura 20, además se realizó una simulación a diferentes condiciones en la destilación para elegir una torre que se adapte al proceso. El proceso se operó a condiciones de presión baja y temperatura moderada (0.6 bares, 100°C). A continuación se muestra el sistema utilizado para la simulación.

Figura 14. Diagrama de simulación de destilación multicomponente (FUG) en ChemCad 6.

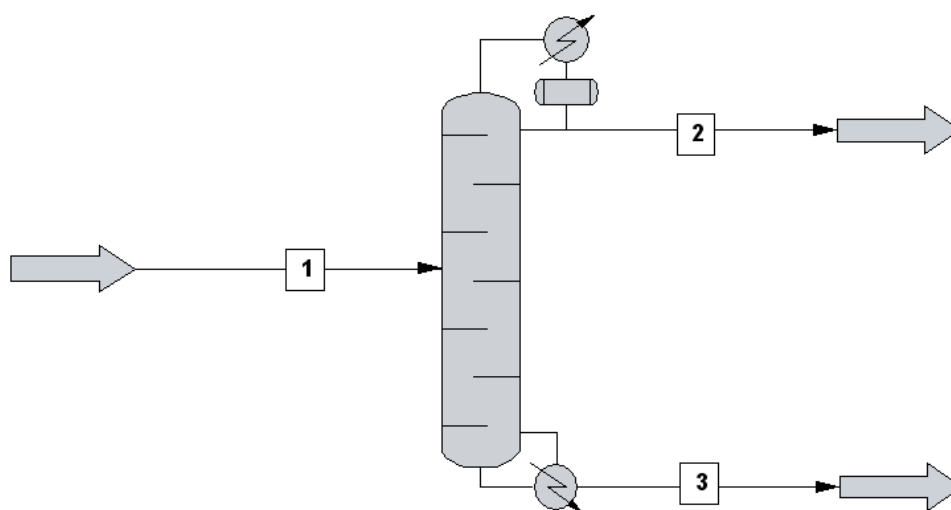


Tabla 28. Las condiciones a la entrada de la torre

T (Kelvin)	298.1508
P (Pa)	200000
Flujo (kg/h)	2.036
Propilen glicol	0.680
Etilen glicol	0.026
Agua	0.208
Propanol	0.014
Acetol	0.071

Utilizando una razón de reflujo de 1.2 y 1.5 del reflujo mínimo se determinó el número de platos según el rendimiento en las diferentes corrientes de los compuestos.

Tabla 29. Cantidad de platos en la columna según recuperación de propilen glicol y acetol a un reflujo de 1.2R_{min}.

		Recuperación de acetol inicial en el destilado				
		0.85	0.9	0.95	0.975	0.99
Recuperación del propilen glicol inicial en la corriente inferior	0.99	14.99	15.81	17.15	18.46	20.17
	0.98	14.65	15.51	16.92	18.31	20.14
	0.97	15.09	15.97	17.46	18.94	20.90
	0.96	16.66	17.49	19.03	20.63	22.79
	0.95	22.05	22.32	23.61	25.31	27.83

Tabla 30. Cantidad de platos en la columna según recuperación de propilen glicol y acetol a un reflujo de 1.5R_{min}.

		Recuperación de acetol inicial en el destilado				
		0.85	0.9	0.95	0.975	0.99
Recuperación del propilen glicol inicial en la corriente inferior	0.99	12.71	13.42	14.58	15.71	17.17
	0.98	12.22	12.96	14.17	15.36	16.90
	0.97	12.19	12.96	14.23	15.47	17.09
	0.96	12.64	13.41	14.72	16.02	17.75
	0.95	14.51	15.09	16.33	17.69	19.58

Para una separación óptima de propilen glicol y acetol se debe operar en una razón de reflujo de 1.5R_{min} en una torre de 17 platos con recuperaciones del 99% para los dos compuestos. Operando una columna de este tamaño con las recuperaciones propuestas, se determinó el plato óptimo para su alimentación. La simulación para una torre de 17 platos se muestra a continuación

Tabla 31. Condiciones de torre de destilación

Fracción de acetol en destilado	0.9867
Fracción de propilen glicol en destilado	0.01
R/R_{\min}	1.5
Número de platos	17
Número de platos mínimos	6.2409
Plato de alimentación	9
Condensador MJ/h	-1.245
Rehervidor MJ/h	2.1282
Presión (Pa)	60000
Reflujo mínimo	0.0821
Razón de reflujo calculada	0.1172
Caída de presión (Pa)	2000

Tabla 32. Corrientes de entrada y salida

Corriente	1	2	3
Temperatura (K)	273.15	356.41	446.01
Presión (Pa)	200000.00	60000.00	62000.00
Entalpía (MJ/h)	-17.10	-7.63	-8.58
Fracción de vapor	0	0	0
Propilen glicol (kg/h)	1.3859	0.0139	1.372
Etilen glicol (kg/h)	0.053	0.0001	0.0529
Agua (kg/h)	0.4239	0.4239	0
1-Propanol (kg/h)	0.0285	0.0285	0
Acetol (kg/h)	0.1447	0.1428	0.0019

D. Cálculos para el diseño de línea de hidrógeno y nitrógeno

1. Línea de nitrógeno. Para esto será necesario únicamente tanques a presión con nitrógeno, no se recirculará al sistema.

2. Línea de hidrógeno. En el caso del hidrógeno si es recomendable recircularlo al sistema, para esto se necesita un compresor que aumente la presión para reincorporarlo al sistema, y un filtro que remueva el agua y trazas de otros vapores presentes.

a. Diseño de filtro. Para el diseño de un filtro que remueva el agua del hidrógeno se debe determinar el tamaño del medio filtrante para que deje pasar el hidrógeno únicamente y el agua y el resto de vapores permanezcan en el filtro. Las especificaciones sugeridas para el filtro son las siguientes:

Tamaño de partícula 0.01 μ m

Material: Acero inoxidable

Medio de filtración: borosilicato exento de aglutinantes (prefiltración, microfibra no tejida)

Caída de presión: 0.12 bar

b. Cálculos para el diseño de compresor. Se modeló un compresor adiabático con ChemCad 6, para la corriente de gas proveniente del condensador. Se muestra el diagrama de la simulación a continuación.

Figura 15. Diagrama de simulación de compresión adiabática

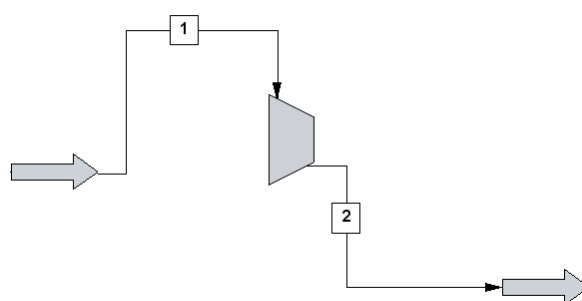


Tabla 33. Propiedades de las corrientes.

	1	2
T	298.15	339.21
P (bar)	2.00	3.00
MJ/h	-0.33	0.27
kg/h	1.02	1.02
Hidrógeno (p/p)	1.00	1.00

Para esta compresión ChemCad calculó los requerimientos de equipo considerando una eficiencia de compresión del 90%.

Tabla 34. Especificaciones de compresor

Presión de salida (Bar)	3
Tipo de compresor	Centrífugo
Eficiencia	0.9
Potencia	0.1675 kW o ¼ hP
Cp/Cv	1.4068

E. Diseño de bombas, tuberías y accesorios auxiliares

1. Cálculo para el diseño de bombas

a. Peristálticas. Las bombas peristálticas se utilizaron en los procesos que manejan flujos muy pequeños. Las partes del proceso que requieren este tipo de bomba son: alimentación de glicerina, y alimentación de torre de destilación.

Tabla 35. Requerimientos para bombas peristálticas

	Alimentación de glicerina	Alimentación torre de destilación
Presión de operación (bar)	1.00	2
Temperatura	298.15	298.15
Flujo kg/h	2.10	2.04

Para los diferentes procesos se seleccionaron las siguientes bombas

Tabla 36. Especificaciones de bombas peristálticas

	Alimentación de glicerina	Alimentación torre de destilación
Capacidad	0-185mL/min	0-185mL/min
Motor	Imán permanente	Imán permanente
Material rotores (2)	Policarbonato	Policarbonato
Potencia necesaria	20Watt	20Watt
Voltaje	110-330	110-330
Díámetro de tubería	¼ pulgada	¼ pulgada

b. Centrífugas. Se utilizará una bomba centrífuga para el funcionamiento de la línea de aceite térmico. Las condiciones de operación son las siguientes:

Tabla 37. Requerimientos para bomba centrífuga

Temperatura (K)	488.150
Presión (Bar)	1
Flujo kg/h	4 L/min
Fluido	Aceite térmico
Carga	Mínima

Para estas condiciones se requiere una bomba específica para transporte de fluidos con temperaturas altas, la bomba necesaria tiene las siguientes características:

Tabla 38. Especificaciones de bombas centrífuga

Bomba	¼ hP
Eficiencia	30%
Motor	1hP
Dimensiones	1"x1"x3.8"
Fluido	Aceite térmico
Material interno	grafito

2. Cálculos para el dimensionamiento de válvulas y tuberías. Se determinaron las válvulas y tuberías necesarias para cada línea en el proceso.

a. Línea de nitrógeno. Para la determinación del diámetro de la línea, se definió una velocidad lineal para el flujo del nitrógeno. Generalmente los gases poseen una velocidad lineal entre 9-30 m/s (McCabe, 1991). Con esta información y el flujo volumétrico necesario se puede definir el diámetro de la línea.

$$Area\ Transversal = \frac{Q}{v} = \frac{\pi D^2}{4} \rightarrow D = \sqrt{\frac{4Q}{\pi v}}$$

$$Q = \frac{50L}{min} \cdot \frac{1min}{60s} \cdot \frac{1m^3}{1000L} = 8.333 \times 10^{-4} \frac{m^3}{s}, \quad v \approx 20\text{ m/s}$$

$$D = \sqrt{\frac{4 \times 8.333 \times 10^{-4}}{20\pi}} = 0.00728m = 0.728cm$$

Para este diámetro interno se eligió según tablas normalizadas para dimensiones de tubería la siguiente tubería. (McCabe, 1991)

Tabla 39. Dimensiones de tubería para línea de hidrógeno

Tamaño nominal	1/4 pulgada
Cédula	40
Material	Acero Inoxidable

Las válvulas del sistema también tendrán el mismo diámetro de la tubería, por consiguiente la válvula de la línea de nitrógeno será una válvula de mariposa de ¼ pulgada.

b. Línea de hidrógeno. Para la línea de hidrógeno se siguió la misma metodología de cálculo que para la línea de nitrógeno. En la alimentación el flujo es el siguiente

$$Q = \frac{175L}{min} \cdot \frac{1min}{60s} \cdot \frac{1m^3}{1000L} = 2.917 \times 10^{-3} \frac{m^3}{s}, \quad v \approx 20\text{ m/s}$$

$$D = \sqrt{\frac{4 \times 2.9167 \times 10^{-3}}{20\pi}} = 0.0136m = 1.36cm$$

Para este diámetro interno se eligió según tablas normalizadas para dimensiones de tubería la siguiente tubería. (McCabe, 1991)

Tabla 40. Dimensiones de tubería de alimentación de hidrógeno

Tamaño nominal	1/2 pulgada
Cédula	40
Material	Acero inoxidable

La válvula de la alimentación tendrá el mismo diámetro de la tubería, por consiguiente la válvula de mariposa es de ½ pulgada.

Después del evaporador de simple efecto el flujo aumenta ya que se arrastra vapor de glicerina, por lo tanto la tubería podría ser más grande, y las válvulas de control también. El flujo a la salida del evaporador es el siguiente:

$$Q = \frac{208.2L}{min} \cdot \frac{1min}{60s} \cdot \frac{1m^3}{1000L} = 3.47 \times 10^{-3} \frac{m^3}{s}, \quad v \approx 20 \text{ m/s}$$

$$D = \sqrt{\frac{4 \times 3.47 \times 10^{-3}}{20\pi}} = 0.01486m = 1.486cm$$

Para este diámetro interno se eligió según tablas normalizadas para dimensiones de tubería la siguiente tubería. (McCabe, 1991)

Tabla 41. Dimensiones de tubería después de evaporador

Tamaño nominal	1/2 pulgada
Cédula	40
Material	Acero Inoxidable

La válvula de la alimentación tendrá el mismo diámetro de la tubería, por consiguiente la válvula de mariposa es de ½ pulgada.

Debido a que el flujo a través de la tubería se encuentra dentro del rango de los dos flujos anteriores, las dimensiones de tubería serán las mismas y las válvulas también.

c. Línea para el aceite térmico. Para el aceite térmico se realizará el mismo procedimiento que para las líneas de gases como nitrógeno e hidrógeno solamente que se corregirá mediante la velocidad promedio de líquidos en tuberías. Para un líquido la velocidad promedio se encuentra entre 1.2-3 m/s.

$$Q = \frac{3.6L}{min} \cdot \frac{1min}{60s} \cdot \frac{1m^3}{1000L} = 6.03 \times 10^{-5} \frac{m^3}{s}, \quad v \approx 2 \text{ m/s}$$

$$D = \sqrt{\frac{4 \times 6.032 \times 10^{-5}}{2\pi}} = 0.00620m = 0.620cm$$

Para este diámetro interno se eligió según tablas normalizadas para dimensiones de tubería la siguiente tubería. (McCabe, 1991)

Tabla 42. Dimensiones para la línea del aceite térmico.

Tamaño nominal	1/4 pulgada
Cédula	80
Material	Hierro al carbón

Se utilizará la misma tubería para toda la línea de aceite, y las válvulas también serán del mismo diámetro de 1/4 pulgadas, y del mismo material

d. Línea para la alimentación de la glicerina. Para la alimentación de Glicerina, se utilizará un diámetro acorde a la bomba peristáltica elegida para el proceso, pues en este caso la velocidad dentro de la tubería es insignificante y el factor de adaptación al proceso tiene más peso.

Tabla 43. Dimensiones de tubería para la alimentación de glicerina

Tamaño nominal	1/4 pulgada
Cédula	40
Material	Acero Inoxidable

e. Línea de agua. Para el dimensionamiento de la línea de agua se utilizó el mismo procedimiento que para la línea de aceite térmico.

$$Q = \frac{2L}{min} \cdot \frac{1min}{60s} \cdot \frac{1m^3}{1000L} = 3.33 \times 10^{-5} \frac{m^3}{s}, \quad v \approx 2 \text{ m/s}$$

$$D = \sqrt{\frac{4 \times 3.333 \times 10^{-5}}{2\pi}} = 0.0046m = 0.460cm$$

Para este diámetro interno se eligió según tablas normalizadas para dimensiones de tubería la siguiente tubería. (McCabe, 1991)

Tabla 44. Dimensiones de tubería para línea de agua

Tamaño nominal	1/4 pulgada
Cédula	40
Material	Hierro al carbón

f. Línea para los productos. Para los productos después del condensador también se utilizará las dimensiones requeridas por la bomba peristáltica para mejor adaptación al proceso.

Tabla 45. Dimensiones de tubería para la línea de los productos

Tamaño nominal	1/4 pulgada
Cédula	40
Material	Acero Inoxidable

F. Cálculo de costos

1. Costos de operación. Para los costos de operación se calculó el costo de la materia a utilizar y el consumo energético de cada equipo. Se calculó el costo de producción en un día y por kilogramo de propilen glicol producido.

a. Cálculos de costo de reactivos (cromita de cobre, hidrógeno, nitrógeno, glicerina cruda, hidróxido de calcio). Para el precio de reactivos se tomaron cotizaciones nacionales y precios del mercado internacional. Para las cotizaciones internacionales se utilizó como fuente la “Chemical Cost Guide 2008”. Los costos determinados son los siguientes

Tabla 46. Costos de materia prima

Glicerina cruda (ton)	\$ 44.00
Hidróxido de calcio (ton)	110.00 €
Hidrógeno (100 m3)	20.00 €
Nitrógeno (100 m3)	10.00 €
Aceite térmico (gal)	\$ 2.00
Cromita de cobre (kg)	\$ 200.00

A partir del consumo diario de cada reactivo se determinó el costo para 24 horas de operación, y el costo por kilogramo de propilen glicol producido. Ejemplo para el costo de glicerina cruda.

$$2 \frac{kgGlicerina}{h} \times \frac{\$ 66}{1000kg} \times \frac{Q8.30}{\$1} \times 24h = Q26.29$$

De la misma manera se realizó el cálculo para los demás compuestos. Los costos se resumen en la siguiente tabla.

Tabla 47. Costos de materia prima

Materia prima	Total (24h)	Costo/kgPG
Glicerina Cruda	Q 26.29	Q 0.80
Hidróxido de Calcio	Q 2.30	Q 0.07
Hidrógeno	Q 29.30	Q 0.89
Nitrógeno	Q 0.73	Q 0.02
Aceite térmico	Q 3.65	Q 0.11
Agua	Q 16.13	Q 0.49
Cromita de Cobre *	Q 12.85	Q 0.39
		Q 2.77

* Se asumió una rotación del catalítico cada 30 días utilizándolo bajo condiciones óptimas

b. Cálculo de costos energéticos. A partir de las especificaciones de los equipos se determinó el gasto de energía para la operación de un día. Ejemplo para el gasto energético del compresor:

$$gasto = Potencia \times tiempo = 3kW(24h) = 72kWh$$

$$72kWh \cdot \frac{Q1.2707}{1kW} = Q91.49$$

A continuación se muestra una tabla con los equipos que generan gasto energético, en el proceso:

Tabla 48. Gastos energéticos del proceso

Equipo	Potencia	Consumo Energético 24h (kWh)	Costo 24h	Costo/kgPG
1 Bomba peristáltica	20Watt	0.48	Q 0.61	Q 0.02
2 Bomba peristáltica	20Watt	0.48	Q 0.61	Q 0.02
Columna de destilación	Condensador 0.5kW, rehervidor 1kW.	36.00	Q 45.75	Q 1.39
Compresor	Potencia 1/4 hP	4.48	Q 5.70	Q 0.17
Intercambiador de calor	Potencia: 3kW	72.00	Q 91.49	Q 2.78
Bomba centrífuga	motor: 1hP	17.93	Q 22.78	Q 0.69
				Q 5.07

* Costos basados en Q1.2707/kWh

2. Cálculo de costo de equipo. Para la determinación del costo de equipo se utilizaron dos metodologías, cotización directa o estimación mediante el método de escalamiento con índices de costos (Peters, 1991:169). A continuación se muestra un ejemplo de la utilización del método para el costo del compresor.

$$\text{Costo de Equipo A} = \text{Costo de Equipo B} \times \left(\frac{\text{Capacidad A}}{\text{Capacidad B}} \right)^\alpha$$

En donde α varía según el tipo de equipo.

$$\text{Costo de Equipo A} = \$128,887.00 \times \left(\frac{0.18695kW}{75kW} \right)^{0.79} = \$1130.34$$

De la misma manera, se determinó el costo del resto de equipo. Los costos se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 49. Costos de equipo para el proceso

DESCRIPCIÓN	CANTIDAD	VALOR DE COMPRA	COSTO + Flete + Aduana + Seguro + IVA + Arancel	COSTO TOTAL
Bomba peristáltica	2	Q 9,130.00	Q 12,234.20	Q 24,468.40
Evaporador Simple Efecto	1	Q 19,075.50	Q 25,561.17	Q 25,561.17
Reactor de Cama Empacada	1	Q 16,564.06	Q 22,195.84	Q 22,195.84
Compresor centrífugo	1	Q 9,381.77	Q 12,571.57	Q 12,571.57
Intercambiador de Calor Eléctrico	1	Q 6,692.02	Q 8,967.31	Q 8,967.31
Torre de Destilación	1	Q 191,641.10	Q 256,799.08	Q 256,799.08
Bomba 1HP	1	Q 2,496.06	Q 3,344.72	Q 3,344.72
Tanque de Glicerina	1	Q 607.76	Q 814.40	Q 814.40
Condensador de Concha y Tubo	1	Q 4,560.04	Q 6,110.45	Q 6,110.45
Válvula de bola (acero inoxidable) 1/2 "	3	Q 136.00	Q 182.24	Q 546.72
Válvula de bola (acero inoxidable) 1/4 "	1	Q 74.67	Q 100.05	Q 100.05
Válvula de compuerta	5	Q 57.43	Q 76.96	Q 384.81
Válvula de cheque (acero inoxidable)	1	Q 166.00	Q 222.44	Q 222.44
Válvula de Globo (hierro al carbón)	2	Q 91.90	Q 123.14	Q 246.28
Válvula de Globo (acero inoxidable)	2	Q 226.87	Q 304.00	Q 608.01
Válvula de Paso (acero inoxidable)	1	Q 95.34	Q 127.76	Q 127.76

El costo total del equipo para la planta piloto es Q 363,069.00

G. Figuras anexas

Figura 16. Dependencia de la constante de velocidad de la conversión de glicerina en acetol respecto a la temperatura

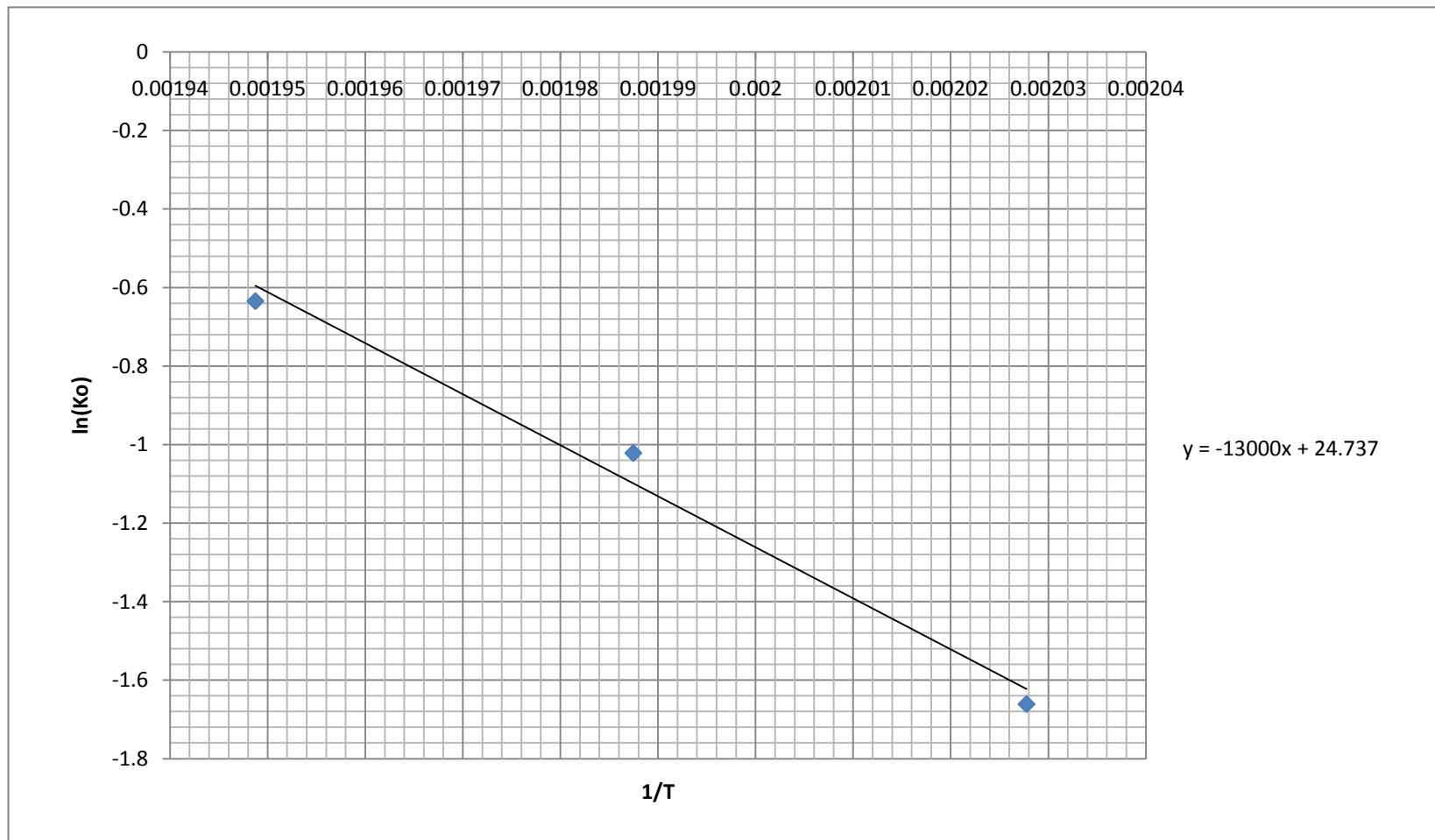


Figura 17. Dependencia de la selectividad de la conversión de glicerina en acetol respecto a la temperatura

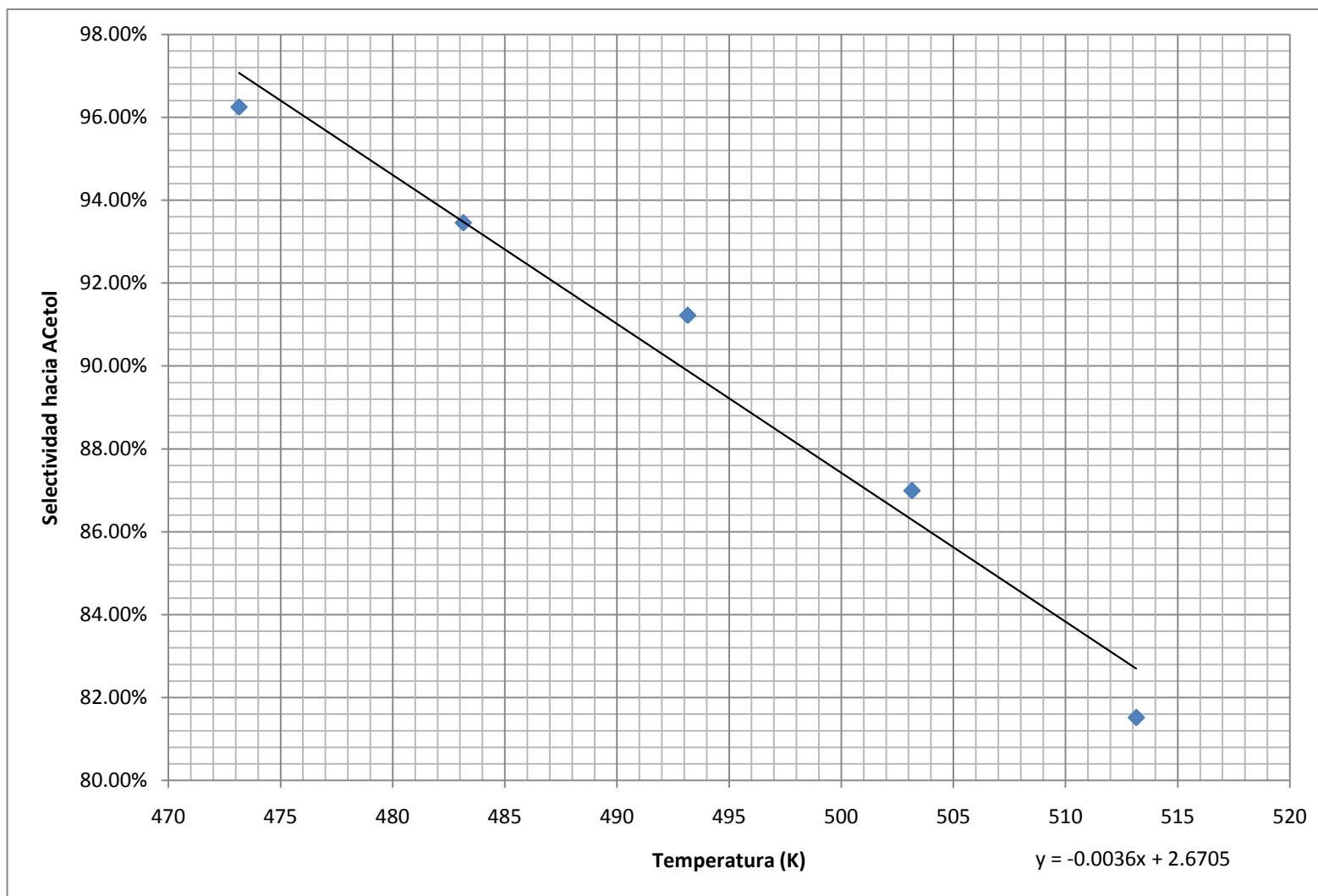


Figura 18. Efecto de la temperatura en la constante de equilibrio K_p (acetol – hidrógeno - propilen glicol)

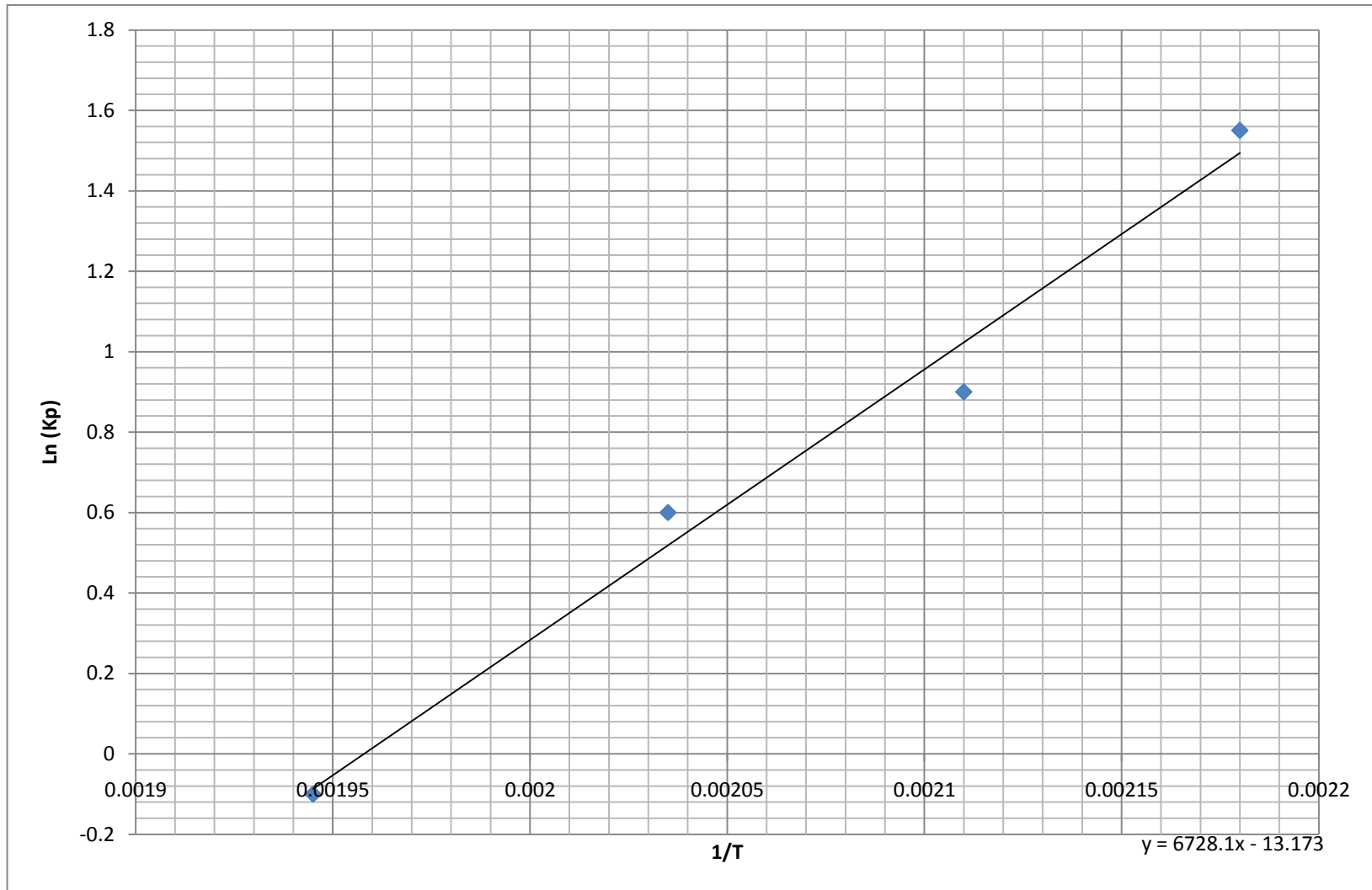
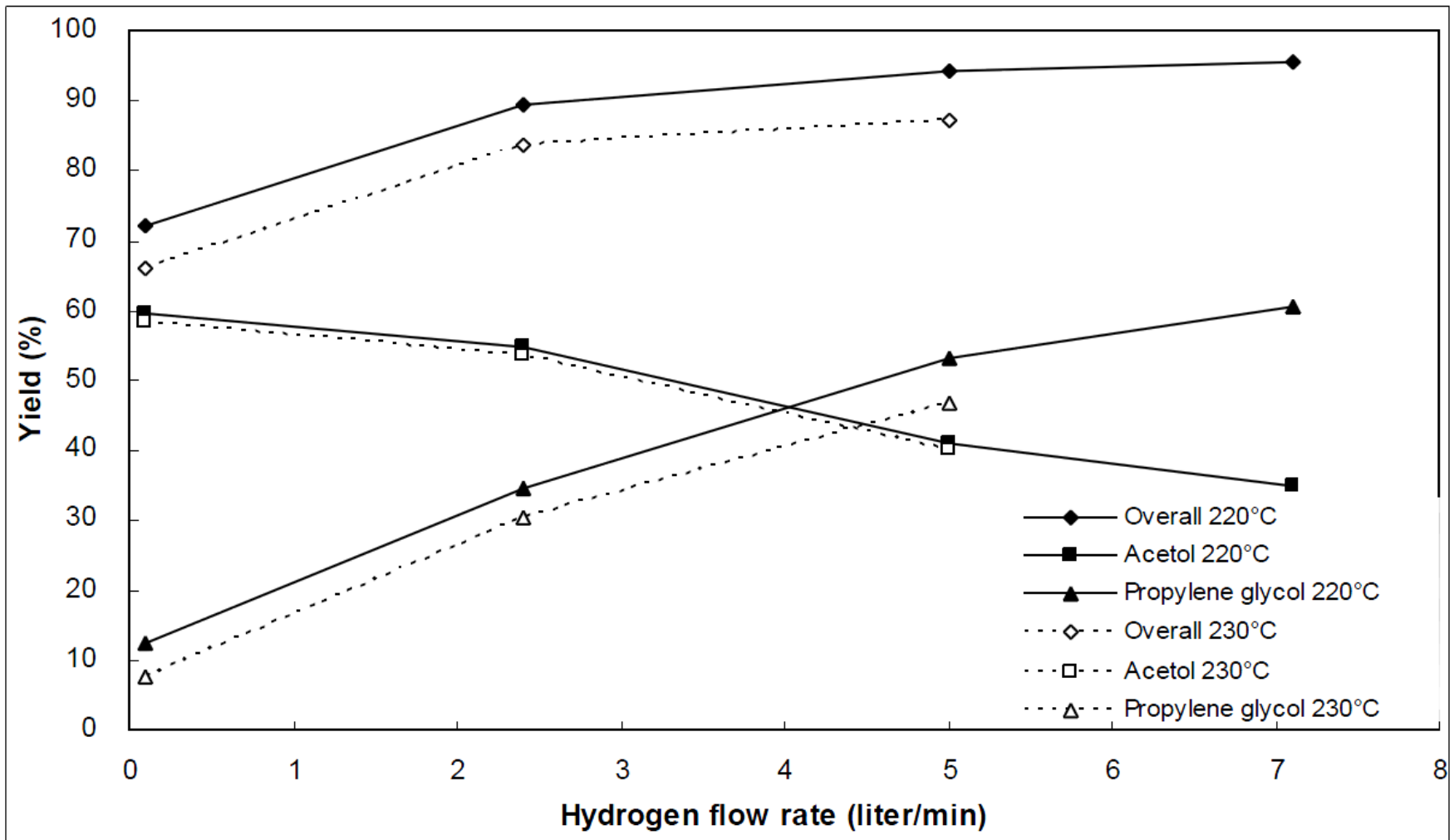


Figura 19. Rendimiento según alimentación de hidrógeno, para una alimentación de 100g/h de glicerina y 1160g de catalítico en reactor.



(Chuang-WeiChiu, 2006:75)

Figura 20. Equilibrio líquido vapor de acetol-propilen glicol a 0.6 Bares, en una mezcla multicomponente a 20% molar en contenido de agua

