



Universidad de Valladolid



**ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES**

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES

GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

Planta de producción de metanol a partir de CO₂ capturado

Autor:

Fernández del Álamo, Diego

Tutor(es):

**Mato Chaín, Rafael Bartolomé
Departamento de Ingeniería Química
y Tecnología del Medio Ambiente**

Valladolid, Junio de 2024.



ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES

RESUMEN

El metanol (MeOH) es un alcohol con un carbono y un grupo hidroxilo, utilizado como precursor químico y combustible. Actualmente, su producción a partir de gas natural y carbón es poco sostenible, por ello, se está investigando una nueva ruta de obtención mediante la hidrogenación catalítica de dióxido de carbono (CO₂) capturado con hidrógeno verde (H₂).

Utilizando el software ASPEN PLUS V12, se realiza el diseño preliminar de un proceso destinado a producir 17272 t/año de MeOH con una pureza del 99,85%, empleando un reactor catalítico y una sección de separación. El estudio técnico y económico demuestra que, con los precios actuales de materias primas (0,67 €/kg de CO₂ y 4,83 €/kg de H₂) y del producto (0,575 €/kg de MeOH), el proceso no es rentable, obteniendo un potencial económico de -40,28 €/kmol.

Para que este proceso sea económicamente viable, el precio del MeOH debería ser al menos 2150 €/t.

Palabras clave: Metanol (MeOH), Dióxido de carbono capturado (CO₂), Hidrogeno (H₂), ASPEN PLUS V12, reactor multitubular catalítico isotérmico.

ABSTRACT

Methanol (MeOH) is an alcohol with a carbon and a hydroxyl group, used as a chemical precursor and fuel. Currently, its production from natural gas and coal is not very sustainable, therefore, a new production route is being investigated through the catalytic hydrogenation of carbon dioxide (CO₂) captured with green hydrogen (H₂).

Using ASPEN PLUS V12 software, the preliminary design of a process aimed at producing 17272 t/year of MeOH with a purity of 99.85% is carried out, using a catalytic reactor and a separation section. The technical and economic study shows that, with the current prices of raw materials (0.67 €/kg CO₂ and 4.83 €/kg H₂) and product (0.575 €/kg MeOH), the process is not profitable, obtaining an economic potential of -40.28 €/kmol.

For this process to be economically viable, the price of MeOH should be at least 2150 €/t.

Keywords: Methanol (MeOH), Captured carbon dioxide (CO₂), Hydrogen (H₂), ASPEN PLUS V12, isothermal catalytic multitube reactor.



ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES

ÍNDICE

RESUMEN	3
ABSTRACT	3
1. OBJETIVOS.....	11
2. INTRODUCCIÓN	13
2.1. El Metanol.....	13
2.1.1. Propiedades Físicas	13
2.1.2. Propiedades Químicas	14
2.1.3. Sistemas de producción del metanol.....	15
2.1.4. Aplicaciones del metanol	19
2.2. Materias primas.....	20
2.2.1. El Dióxido de carbono	20
2.2.2. El Hidrógeno.....	21
3. DISEÑO DEL PROCESO.....	23
3.1. Diagrama de bloques	23
3.2. Análisis preliminar del proceso.....	23
3.2.1. Modelo termodinámico en ASPEN PLUS	23
3.2.2. Acondicionamiento de materias primas.....	26
3.2.3. Sección de Reacción.....	32
3.2.4. Sección de Separación	42
3.3. Diagrama de proceso: PFD y P&ID.....	49
3.3.1. Diagrama de flujo de proceso (PFD)	50
3.3.2. Diagrama de líneas e instrumentación (P&ID).....	51
3.4. Diseño de equipos	54
3.4.1. Diseño del Intercambiador de calor de carcasa y tubos E-103.....	54
3.4.2. Diseño de torre de destilación T-101.....	58
3.4.3. Diseño de reactor R-101	64
3.5. Integración energética.....	68
4. BALANCE ECONÓMICO	75
4.1. Potencial económico	75
4.2. Análisis económico del proyecto	76
5. SEGURIDAD	79
5.1. Peligros asociados a la naturaleza de los compuestos	79



5.2. Seguridad en el proceso	80
5.2.1. Problemas de Presión	80
5.2.2. Problemas de temperatura.....	80
5.2.3. Problemas de flujo y nivel.....	81
5.3. HAZOP	81
6. IMPACTO AMBIENTAL.....	83
6.1. Efectos sobre la atmósfera	83
6.2. Efectos sobre el agua.....	83
7. CONCLUSIÓN.....	87
8. BIBLIOGRAFÍA	89
ANEXO I. Diagramas del proceso	93
1.1. Diagrama de Bloques.....	94
1.2. PFD.....	96
1.3. P&ID	101
1.4. Integración energética.....	107
ANEXO II. Cálculos.....	109
2.1. Intercambiador de calor E-103	110
2.2. Torre de destilación T-101	119
2.3. Diseño mecánico de R-101	121
ANEXO III. Tablas de corrientes	122
ANEXO IV. Hojas de seguridad	130
ANEXO V. HAZOP	131

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Molécula de Metanol	13
Figura 2: Reacciones industriales importantes a partir del MeOH	15
Figura 3: Diagrama de bloques de una planta de metanol a partir de carbón(Zhen & Wang, 2015)	17
Figura 4:Diagrama de bloques de una planta de metanol a partir del gas natural (Zhen & Wang, 2015)	18
Figura 5: Diagrama de Sankey de la cadena de valor del metanol(Tabibian & Sharifzadeh, 2023)	20
Figura 6: Diagrama de proceso de absorción química (Chapter 3: Capture of CO 2, n.d.)	21
Figura 7: Tipos de hidrógeno según su procedencia (Guo et al., 2024).....	22
Figura 8: Momento dipolar del agua (Momento Dipolar: Cómo Se Calcula y Ejemplos, n.d.)	24
Figura 9: Momento dipolar del dióxido de carbono(Momento Dipolar: Cómo Se Calcula y Ejemplos, n.d.)	24
Figura 10: Primer diagrama de elección del modelo termodinámico	25
Figura 11: Parámetros de interacción entre metanol y dióxido de carbono	25
Figura 12: Segundo diagrama de elección del modelo termodinámico	26
Figura 13: Disposición de cuatro compresores con enfriamiento intermedio	28
Figura 14:Disposición de tres compresores con enfriamiento intermedio	29
Figura 15:Disposición de dos compresores con enfriamiento previo e intermedio.....	30
Figura 16:Disposición de dos compresores con enfriamiento intermedio	31
Figura 17: Modelo de LHHW de ASPEN PLUS V12	35
Figura 18: Esquema de concentración de distintos patrones de flujo.....	37
Figura 19: Análisis numérico de la selectividad en función de la ratio a distintas temperaturas	37
Figura 20: Análisis numérico de la selectividad en función de la temperatura a distintas presiones.....	40
Figura 21: Composición dentro del reactor	42
Figura 22: Propuesta de ruta de separación de los componentes después de la reacción	43
Figura 23: Modelo usado en ASPEN PLUS para el análisis de sensibilidad	44
Figura 24: Variación de la composición de salida de la corriente líquidas y de las necesidades energéticas del condensador	44
Figura 25: Variación de los flujos de salida del flash en función de la temperatura de condensación	45
Figura 26: Diagrama de la primera opción dos flash y torre de destilación	46
Figura 27: Diagrama de la segunda opción un flash y torre de destilación	47
Figura 28: Diagrama del proceso completo en ASPEN PLUS	49
Figura 29: Bloque DSTWU de ASPEN PLUS V12	59
Figura 30: Datos obtenidos por el modelo FUG.....	59
Figura 31: Bloque RadFrac de ASPEN PLUS V12.....	59



Figura 32: Primera configuración de torre de destilación	60
Figura 33: Etapa de alimentación y corrientes de producto.....	60
Figura 34: Primer grafico de composición por etapa de la torre de destilación T-101 ...	61
Figura 35: Grafico de composición con la etapa de alimentación correcta de la torre de destilación T-101	61
Figura 36: Resumen de especificación de operación.....	62
Figura 37: Selección de número de etapas de T-101	62
Figura 38: Secciones de la torre de destilación T-101	63
Figura 39: Diagrama del plato 27	64
Figura 40: Modelos de ASPEN de Reactor multitubular	65
Figura 41: Especificación de temperatura	65
Figura 42: Especificaciones de presión	66
Figura 43: Especificación del catalizador	66
Figura 44: Entrada de especificación de diseño.....	67
Figura 45: Pérdida de carga en función de diámetro y número de tubos	67
Figura 46: Curvas compuestas del proceso.....	70
Figura 47: Gran curva compuesta	71
Figura 48: Curvas compuesta con los servicios generales	72
Figura 49: Diagrama Presión-Entalpia.....	73
Figura 50: Cash Flow del proyecto	77
Figura 51: Nuevo Cash Flow del proyecto	78
Figura 52: Gráfica de factor de fricción en el interior de los tubos. ('Heat Transfer', 2018)	113
Figura 53: Holgura entre carcasa y bancada de tubos ('Heat Transfer', 2018)	114
Figura 54: Correlación gráfica para obtener el factor j_h ('Heat Transfer', 2018)	116
Figura 55: Factor de fricción por el lado de la carcasa ('Heat Transfer', 2018)	117
Figura 56: Selección del número de etapas de T-101	119

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Resumen de propiedades físicas del MeOH (Ott et al., 2012)	14
Tabla 2: Reacciones de gasificación del carbón(Arteaga Pérez et al., 2015)	15
Tabla 3: Condiciones de entrada de hidrógeno al proceso (Van-Dal & Bouallou, 2013a)	26
Tabla 4: Condiciones de entrada del dióxido de carbono al proceso(Van-Dal & Bouallou, 2013a)	27
Tabla 5: Resumen de opciones de compresión	31
Tabla 6: Resumen económico de cada disposición.....	32
Tabla 7: Valores de constantes de cinética de reacción(Van-Dal & Bouallou, 2013b)	34
Tabla 8: Valores reajustados de constantes de cinética de reacción (Van-Dal & Bouallou, 2013b)	35
Tabla 9 : Resumen condiciones de operación de la reacción	40
Tabla 10: Resumen de flujos de entrada y salida de la sección de reacción	42
Tabla 11: Análisis de la pérdida de producto en cada etapa de la primera opción.....	47
Tabla 12: Análisis de la pérdida de producto en cada etapa de la segunda opción	48
Tabla 13: Precio de los equipos y servicios generales de la primera opción	48
Tabla 14: Precio de los equipos y servicios generales de la segunda opción	48
Tabla 15: Rating presión de ASTM 105 (Ehtesham, 2017).....	52
Tabla 16: Resumen de corrientes del intercambiador E-103	55
Tabla 17: Área de transferencia de calor	56
Tabla 18: Resumen dimensiones del cambiador. Todas las dimensiones en metros.....	56
Tabla 19: Coeficientes individuales de transmisión de calor.....	57
Tabla 20: Resumen diseño E-103	58
Tabla 21: Resumen de la torre de destilación T-101	63
Tabla 22: Resumen de diseño mecánico de torre de destilación T-101	64
Tabla 23: Dimensiones del reactor	68
Tabla 24: Corrientes frías del proceso	69
Tabla 25: Corrientes calientes del proceso	69
Tabla 26: Ahorro de calefacción y refrigeración en el proceso	70
Tabla 27: Servicios generales	72
Tabla 28: Potencial económico	75
Tabla 29: Potencial económico sin el precio del CO ₂	75
Tabla 30: Evaluación económica de ASPEN	76
Tabla 31: DQO de corriente de aguas residuales.....	84
Tabla 32: Propiedades físicas de fluidos	111
Tabla 33: Resumen de diseño mecánico de los tubos	112
Tabla 34: Resumen de resultados del interior de los tubos	113
Tabla 35: Constantes empíricas de diámetro de bancada.....	114
Tabla 36: Resumen de diseño mecánico de la carcasa	115
Tabla 37: Resumen valores por la carcasa	117
Tabla 38: Resumen final del diseño del intercambiador	118
Tabla 39: Evaluación económica en ASPEN	119
Tabla 40: Recopilación de datos para la selección de número de etapas de T-101	120



ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES



1. OBJETIVOS

El objetivo del presente estudio consiste en diseñar una planta de producción de metanol (MeOH) a partir de la hidrogenación catalítica del dióxido de carbono capturado (CO₂) con hidrógeno verde (H₂) como alternativa sostenible a los métodos de producción no sostenibles actuales.

Para ello, se realiza un diseño completo que se optimizará desde el punto de vista ingenieril y económico, con el fin de determinar la viabilidad técnica y económica del proceso propuesto en las condiciones actuales o, en todo caso, determinar bajo que circunstancias el proceso podría resultar viable.



ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES

2. INTRODUCCIÓN

2.1. El Metanol

El metanol, también denominado alcohol metílico o carbinol, es el más sencillo de los alcoholes y este está construido por un grupo metilo unido al grupo funcional hidroxilo. Su fórmula empírica es CH_4O , pero habitualmente se denomina con su fórmula desarrollada, CH_3OH , en la que se hace hincapié en el grupo hidroxilo que define el grupo funcional de los alcoholes. Su estructura está formada de la siguiente manera:

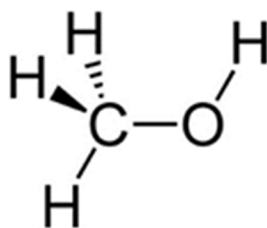


Figura 1: Molécula de Metanol

Es importante destacar además la elevada toxicidad que presenta esta molécula para el ser humano. El metanol es inicialmente transformado en formaldehído en el hígado y posteriormente, durante el metabolismo celular, se transforma en ácido fórmico. Este último, también denominado ácido metanoico (HCOOH), es el verdadero responsable de la toxicidad del metanol, ya que inhibe la acción del citocromo oxidasa, interfiriendo en el transporte de electrones de la cadena respiratoria. Además, inhibe la función mitocondrial de la retina y aumenta el estrés oxidativo. Como consecuencia, el metanol ingerido puede producir ceguera, sordera y problemas hepáticos graves como la cirrosis, y en los casos más extremos, la muerte. Inhalado produce inflamación de las vías respiratorias y en contacto con la piel puede generar dermatitis crónica. (Redacción de salud, 2021)

2.1.1. Propiedades Físicas

El metanol es un líquido ligero e incoloro a condiciones de presión y temperatura ambiente con una polaridad elevada, debido a eso se usa como disolvente orgánico ya que es capaz de disolver sustancias de polaridad media y alta. Es totalmente miscible en todas las fracciones en agua (formando puentes de hidrógeno), alcoholes, otros disolventes orgánicos e incluso con aceites y grasas. (Ott et al., 2012)

Otras propiedades físicas se muestran en la siguiente tabla:



Tabla 1: Resumen de propiedades físicas del MeOH (Ott et al., 2012)

Propiedad	Valor
Masa molecular [g/mol]	32,042
Densidad [kg/m ³]	786,68
T ebullición [°C]	64,65
T fusión [°C]	-97,88
T flash [°C]	15,6
T crítica [°C]	239,85
T ignición [°C]	470
Viscosidad [mPas]	0,5513
P crítica [Mpa]	8,1
C _p [J mol ⁻¹ K ⁻¹]	42,59
Conductividad térmica [mW m ⁻¹ K ⁻¹]	190,16
Límite de explosión [% vol]	6,72-36,50

2.1.2. Propiedades Químicas

El metanol es el alcohol alifático más simple. Como representante típico de esta clase de sustancias, su reactividad viene determinada por el grupo funcional hidroxilo. Las reacciones del metanol tienen lugar mediante la ruptura del enlace C-O ó O-H y se caracterizan por la sustitución del grupo -H y -OH. Sin embargo, a diferencia de los alcoholes alifáticos superiores, no puede producirse β -eliminación con formación de un enlace múltiple(Ott et al., 2012). Entre las reacciones industriales importantes del metanol se encuentran las siguientes:

- Deshidrogenación y deshidrogenación oxidativa
- Carbonilación
- Esterificación con ácidos orgánicos o inorgánicos y derivados de ácidos
- Eterificación
- Adición a enlaces insaturados
- Sustitución de grupos hidroxilo

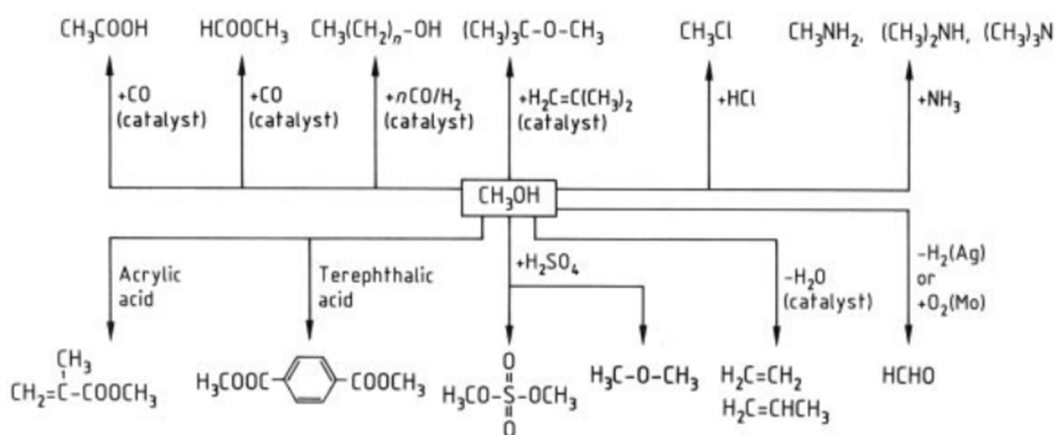


Figura 2: Reacciones industriales importantes a partir del MeOH

2.1.3. Sistemas de producción del metanol

Para la producción de metanol se han usado varios procesos en los que se necesita una fuente de carbono. Al principio se usaba como materia prima el carbón, pero debido al desarrollo de nuevos catalizadores y reactivos más eficientes, se dejó de usar. Estos nuevos catalizadores eran sensibles a los contaminantes presentes en las materias primas por lo que el carbón que tenía muchos contaminantes que envenenaban el catalizador, por ello se comenzó a usar el gas natural que era más fácil de purificar y esto tenía como consecuencia la mejora en el rendimiento del proceso.

El proceso basado en el carbón consiste en convertir el sólido mediante la gasificación en una mezcla rica en monóxido de carbono, CO, e hidrógeno, H₂ y algunos contaminantes como el sulfuro de hidrógeno, H₂S, que es el principal culpable del envenenamiento de los catalizadores. Para poder llevar a cabo este proceso de gasificación es necesario un agente oxidante que puede ser oxígeno puro, O₂, o vapor de agua. Las condiciones de operación varían en función del tipo de gasificador pero suelen estar por encima de 1300°C y 2MPa (Arteaga Pérez et al., 2015). Durante el proceso se generan muchos productos intermedios, muy reactivos, que hacen el proceso peligroso y poco predecible. Las reacciones que ocurren durante el proceso son las siguientes:

Tabla 2: Reacciones de gasificación del carbón (Arteaga Pérez et al., 2015)

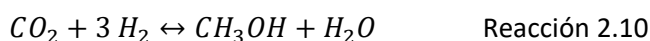
Reformado al vapor del carbón	$C + H_2O \leftrightarrow CO + H_2$	Reacción 2.1
Oxidación parcial del carbón	$C + \frac{1}{2} O_2 \leftrightarrow CO$	Reacción 2.2
Oxidación completa del carbón	$C + O_2 \leftrightarrow CO_2$	Reacción 2.3



Reacción de Boudouard	$C + CO_2 \leftrightarrow 2 CO$	Reacción 2.4
Metanización	$CO + 3 H_2 \leftrightarrow CH_4 + H_2O$	Reacción 2.5
Metanización del carbón	$C + H_2 \leftrightarrow CH_4$	Reacción 2.6
Reformado al vapor del metano	$CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3 H_2$	Reacción 2.7
Water- Gas shift	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	Reacción 2.8

El principal inconveniente de este proceso es el alto impacto medio ambiental y las políticas que desincentivan el uso del carbón. Durante este proceso se generan varias toneladas de CO₂ por cada tonelada de MeOH, además de que se necesitan entre (1,42 – 1,59) toneladas de carbón por cada tonelada producida de MeOH. Esto es debido a que el carbón al gasificarlo es muy poco efectivo ya que se crean también alquitranes, compuestos aromáticos que forman estructuras que hacen que los equipos se ensucien y pierdan efectividad.(Milne et al., 1998)

Una vez que se ha eliminado todos los contaminantes del gas de síntesis, que envenenan los catalizadores usados para la reacción del metanol, y que se obtiene una buena relación de CO/H₂ mediante la adición de más hidrógeno u otro método, se procede a producir el metanol mediante las siguientes reacciones



Siendo la Reacción 2.9 la hidrogenación del monóxido de carbono y la Reacción 2.10 la hidrogenación del dióxido de carbono cuyas entalpías de reacción son -128 kJ·mol⁻¹ y -87 kJ·mol⁻¹, respectivamente (Van-Dal & Bouallou, 2013a).

Esta etapa se ve limitada por el equilibrio de las Reacciones 2.9 y 2.10, por lo que se consiguen conversiones muy bajas. Los primeros procesos (procesos BASF) operaban a temperaturas de entre (320 – 450) °C y a presiones muy elevadas, próximas a los (250 – 300) bar, con catalizadores basado en ZnO/Cr₂O₃. Con el desarrollo de nuevos catalizadores, basado en Cu/ZnO/Al₂O₃ se consigue mejorar notablemente las condiciones de operación, especialmente las presiones de trabajo, que oscilan entre los (50 – 100) bar, y las temperaturas entre (200 – 300) °C. Este nuevo tipo de plantas industriales recibieron el nombre de procesos ICI, y son los más implementados (Dalena et al., 2018).

Entre las impurezas más comunes se encuentran la acetona, el ácido carboxílico y otros alcoholes como el etanol o el propanol que deben de ser eliminados mediante una fase de purificación del producto final. Además, se debe tener en cuenta que la etapa de síntesis tiene una conversión en torno al (50 – 60) %, por lo que también es necesario eliminar los reactivos que no han reaccionado y recircularlos a la etapa de síntesis. (Military Standard, 2016).

El proceso esta descrito en la siguiente imagen:

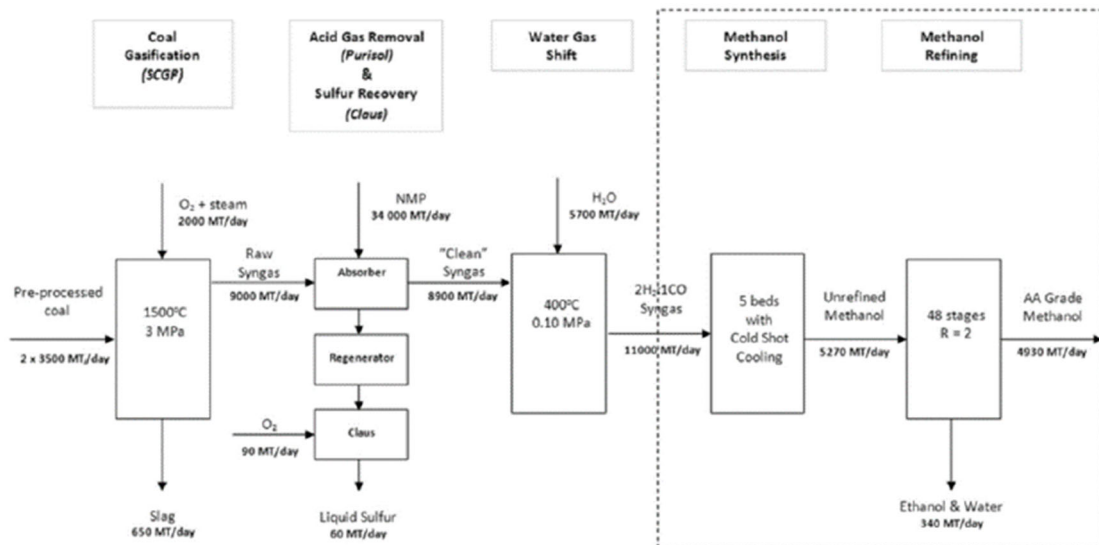
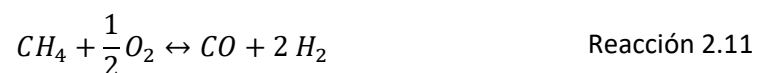
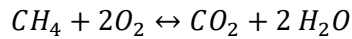


Figura 3: Diagrama de bloques de una planta de metanol a partir de carbón (Zhen & Wang, 2015)

El proceso basado en el gas natural como materia prima es el industrialmente más usado en la actualidad, siendo la responsable del 90% de la producción mundial de metanol (Zhen & Wang, 2015). El gas natural esta principalmente compuesto de hidrocarburos lineales de cadenas cortas de entre 1 a 7 carbonos de los cuales entorno del 55% al 85% del volumen es metano, CH_4 , esto depende del yacimiento del que se extraiga el gas (Saavedra. Y, 2011). Al igual que antes preocupa las impurezas que puedan intervenir en el proceso posteriormente, como el H_2S , así que se lleva a purificar hasta dejar una concentración del orden de ppmv. (M. del R. Rodero et al, 2020).

Tras este proceso de desulfuración del gas natural se procede a generar el gas de síntesis al igual que en el proceso anterior, siendo el gas de síntesis una mezcla principalmente de CO , H_2 y CO_2 . Las reacciones que se llevan a cabo en este proceso son las siguientes:





Reacción 2.12

La siguiente etapa es la síntesis del metanol. El proceso es igual que el usado en el proceso del carbón con las Reacciones 2.9 y 2.10.

El proceso está resumido en la siguiente imagen:

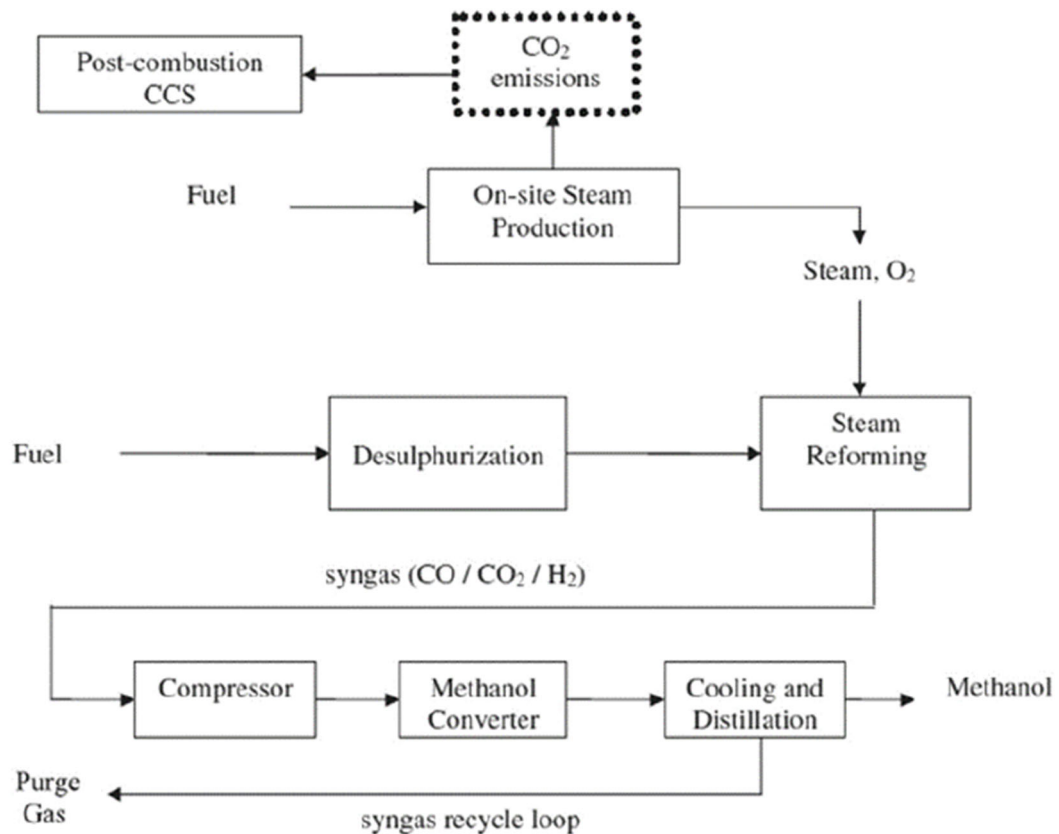


Figura 4: Diagrama de bloques de una planta de metanol a partir del gas natural (Zhen & Wang, 2015)

Finalmente existe otro proceso que es la producción del metanol por hidrogenación catalítica de CO_2 , que corresponde al proceso objeto de diseño y evaluación de este proyecto. Este es un proceso que se presenta para revalorizar el CO_2 capturado en la industria, (Pérez-Fortes et al., 2016). En este proceso se llevan a cabo dos reacciones: una de ellas es la Reacción 2.8, conocida como Water-Gas shift y la otra es la Reacción 2.10, en la que se forma el metanol a partir de las materias primas.

Utilizar el dióxido de carbono como reactivo lleva asociado un mayor consumo de energía en el proceso, debido a que es una molécula estable y tiene una elevada energía de activación, estos factores hacen que no reaccione fácilmente. Esta condición también propone ventajas ya que su manejo es sencillo ya que no es tóxico, no es inflamable ni corrosivo. Además de que es

un subproducto de otras operaciones industriales, es abundante y barato y muchas industrias ya tienen sistemas de captación de CO₂, por lo que la implantación no es muy costosa.

Un inconveniente es la necesidad de obtener una fuente de H₂. Actualmente la principal vía de obtención es mediante el reformado con vapor de hidrocarburos, principalmente de metano Reacción 2.7 lo que puede causar la duda de si el proceso es sostenible. Pero gracias a la creciente apuesta por las energías renovables y producción de hidrogeno verde a partir de la hidrolisis del agua, con fuentes de electricidad renovables como la eólica o fotovoltaica se podría volver un proceso totalmente sostenible y adaptado a las necesidades actuales.

Otro método de producción de H₂ es a partir de biomasa. El proceso sería similar al que se lleva a cabo en las plantas de metanol a partir de carbón. Inicialmente la biomasa se somete a gasificación y posteriormente, se lleva a la fase de purificación eliminando los contaminantes y el CO presentes para dejar la pureza de H₂ necesaria para el proceso. (Mondal. P et al,2011)

2.1.4. Aplicaciones del metanol

El metanol es uno de los alcoholes que más se producen actualmente, en torno a 98 millones de toneladas al año (Tabibian & Sharifzadeh, 2023), seguido del etanol que tiene una producción de 76 millones de toneladas al año (Li et al., 2022).

La aplicación más interesante de estos alcoholes reside en su uso como combustible en motores de combustión interna, por ejemplo, en mezclas de gasolina-metanol ya que se pueden usar en los motores actuales sin modificaciones. Esto se debe a que es un buen complemento de la gasolina por el elevado octanaje del metanol, que hace que se pueda aumentar la eficiencia de los motores de combustión interna y que sean más respetuoso con el medio ambiente que otros aditivos usados en la actualidad.

Otra de las aplicaciones del metanol más utilizada es como materia prima, para producir otros compuestos químicos de interés entre los cuales se encuentra el formaldehído o el ácido acético.

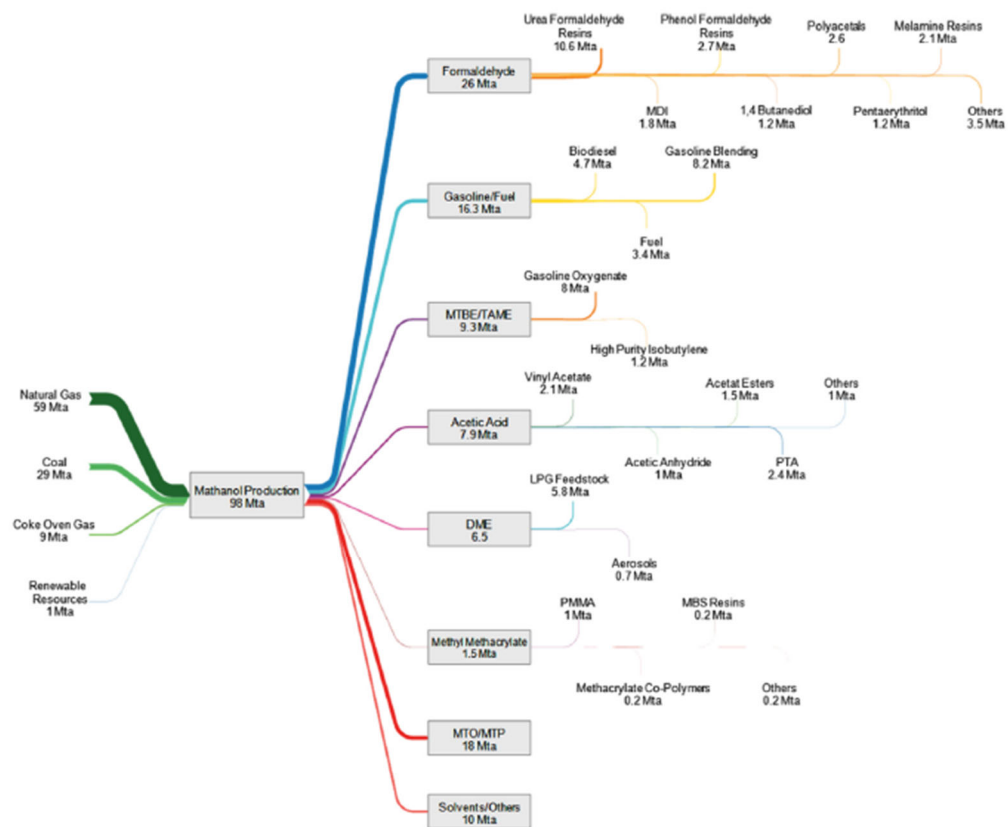


Figura 5: Diagrama de Sankey de la cadena de valor del metanol (Tabibian & Sharifzadeh, 2023)

2.2. Materias primas

Las materias primas que se van a usar en este caso son el dióxido de carbono y el hidrógeno.

2.2.1. El Dióxido de carbono

El dióxido de carbono, CO_2 , es uno de los gases de efecto invernadero más liberado a la atmósfera por las industrias mediante la combustión de hidrocarburos. Por ello en la actualidad se están buscando formas de capturarlo para luego almacenarlo bajo tierra o para la utilización como materia prima como es el caso.

Los principales métodos de captura de CO_2 presente en los gases de postcombustión, se basan en la absorción con solventes químicos altamente selectivos con el CO_2 como pueden ser las etanolaminas. Con este proceso se alcanzan niveles de pureza elevados, en entorno el 99,9% y una recuperación del gas de entorno el 99,9% con respecto al efluente de postcombustión.

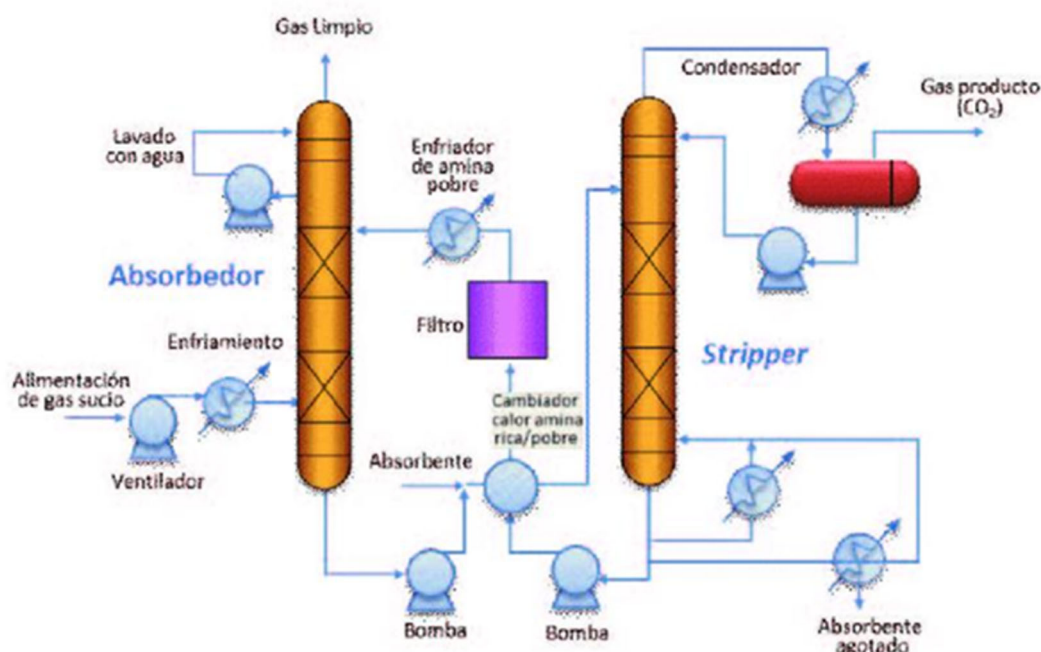


Figura 6: Diagrama de proceso de absorción química (Chapter 3: Capture of CO₂, n.d.)

Otro método de captura de CO₂ en los gases de precombustión, como en el gas de síntesis u otros efluentes ricos en este gas que debe ser eliminado antes de su posterior uso, es mediante membranas selectivas. Mediante este proceso no se obtiene unos valores de pureza ni de recuperación tan elevados como en el anterior, pero se consumen más o menos un 10% menos de energía. (Goto et al., 2013)

2.2.2. El Hidrógeno

Debido a la gran cantidad de energía que se demanda en la actualidad, la mayoría procedente de los combustibles fósiles, y la preocupación por el medio ambiente se están buscando fuentes de energía más sostenibles y menos contaminantes. Actualmente las investigaciones se centran entre otras fuente de energía en el hidrógeno.

El hidrógeno se clasifica en función de su procedencia, y estas son las siguientes:

El hidrógeno gris se produce por una reacción química usando como materias primas el carbón o el gas natural. Este proceso no es muy sostenible debido a la gran cantidad de gases de efecto invernadero que se producen.

Debido a esta condición del hidrógeno gris se propuso el concepto del hidrógeno azul que es el mismo proceso que el anterior, pero realizando una posterior captura y almacenamiento de los gases de efecto invernadero.

Finalmente, se propuso el hidrógeno verde como alternativa a las anteriores debido a que consiste en producir hidrógeno a partir de energías totalmente renovables y verdes, como la eólica o fotovoltaica. A continuación, con esta energía eléctrica se abastece unos electrolizadores que se ocupan de realizar la electrólisis del agua separando el oxígeno del hidrógeno. (Guo et al., 2024)



Figura 7: Tipos de hidrógeno según su procedencia (Guo et al., 2024)

3. DISEÑO DEL PROCESO

3.1. Diagrama de bloques

En primer lugar, se procede a realizar una idea preliminar del proceso de producción que se va a desarrollar durante el trabajo. El proyecto para realizar un mejor diseño se divide en tres fases:

La primera sección consiste en el acondicionamiento de las materias primas para que estén en las condiciones de operación adecuadas para el proceso. La segunda sección es la de reacción en la que se analiza cuáles son las mejores condiciones y equipos para maximizar la transformación de los reactivos en productos. La tercera sección se ocupa de la separación de los distintos compuestos, al igual que de la purificación del producto final para que cumpla los estándares de venta.

El diagrama de bloque está en el [ANEXO I: Diagramas del proceso.](#)

3.2. Análisis preliminar del proceso

A continuación, una vez delimitada las diferentes secciones que separan el proceso se procede a desarrollar cada una de ellas seleccionando condiciones de operación o seleccionando los equipos que maximicen la eficiencia.

Para realizar el análisis de las secciones se va a usar como herramienta el software comercial ASPEN PLUS V12. Es un programa que simula procesos químicos y realiza el diseño de equipos.

3.2.1. Modelo termodinámico en ASPEN PLUS

El programa de ASPEN PLUS requiere de un modelo termodinámico para calcular las propiedades termodinámicas de las distintas corrientes de proceso. La elección del modelo adecuado depende de los compuestos presentes en el proceso al igual que de la presión u otros parámetros necesarios. Para ello se va a utilizar el diagrama de elección de modelo que proporciona el programa.

En primer lugar, hay que ver si los compuestos que están en la simulación son polares o no polares. Esto se realiza comprobando el momento dipolar, que es la intensidad con la que dos o más átomos se atraen en función de la electronegatividad de cada átomo y la distribución de las cargas en los enlaces. En las siguientes imágenes se puede ver el momento dipolar de algunos compuestos de la simulación:

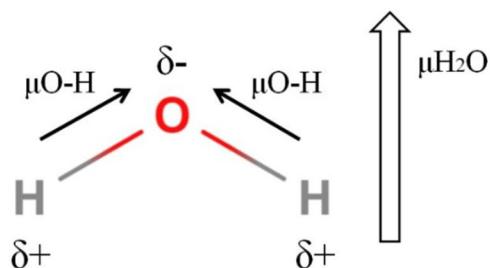


Figura 8: Momento dipolar del agua (Momento Dipolar: Cómo Se Calcula y Ejemplos, n.d.)

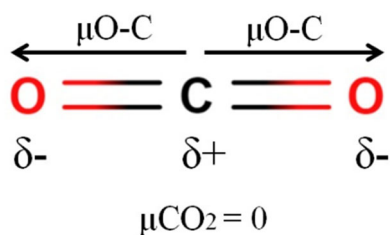


Figura 9: Momento dipolar del dióxido de carbono (Momento Dipolar: Cómo Se Calcula y Ejemplos, n.d.)

En el caso del dióxido de carbono y del hidrógeno son moléculas apolares, sin embargo, el agua, el monóxido de carbono y el metanol son moléculas polares. Por ello se escoge el camino de polares.

Una vez tomado este camino se comprueba si los compuestos se disocian formando mezclas iónicas, como por ejemplo la sal común. En este caso no hay ningún compuesto que este formado por enlaces iónicos por lo que no forman electrolitos.

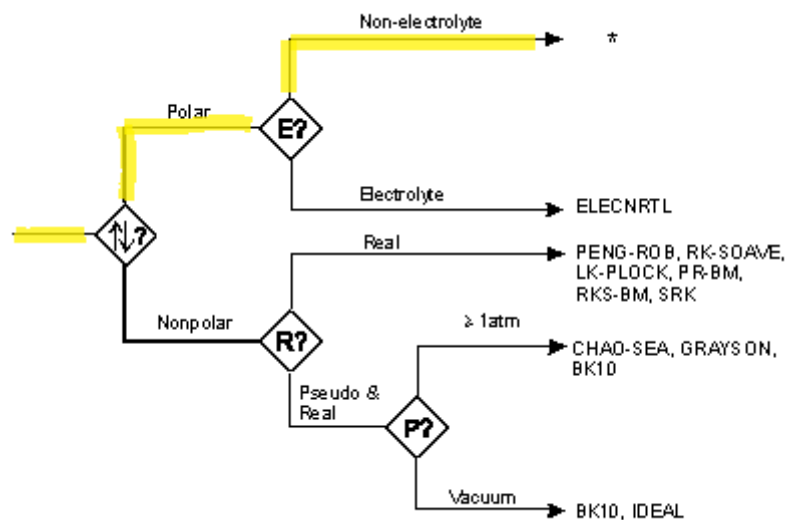


Figura 10: Primer diagrama de elección del modelo termodinámico

A continuación, se comprueba a qué presión se va a operar ya que si se opera a una presión alta el comportamiento de la fase gas puede alejarse del comportamiento de gas ideal. Analizando la presión de operación de otros procesos parecidos se llega a la conclusión que se va a operar a más de 10 bar. (Pérez-Fortes et al., 2016)

Finalmente, se tiene que comprobar si existen parámetros de interacción entre los distintos compuestos. Estos parámetros de interacción los proporcionan las librerías del programa si los compuestos usados son comunes como en este caso. Como se puede ver en la imagen, sí que existen parámetros de interacción.

Component i	Component j	Source	Temp. Units	AU	AJ	BU	BJ	CU
CO2	WATER	APV120 ENRTL-...	C	10,064	10,064	-3268,14	-3268,14	0,2
MEOH	WATER	APV120 VLE-RK	C	-2,626	4,8241	828,387	-1329,54	0,3

Figura 11: Parámetros de interacción entre metanol y dióxido de carbono

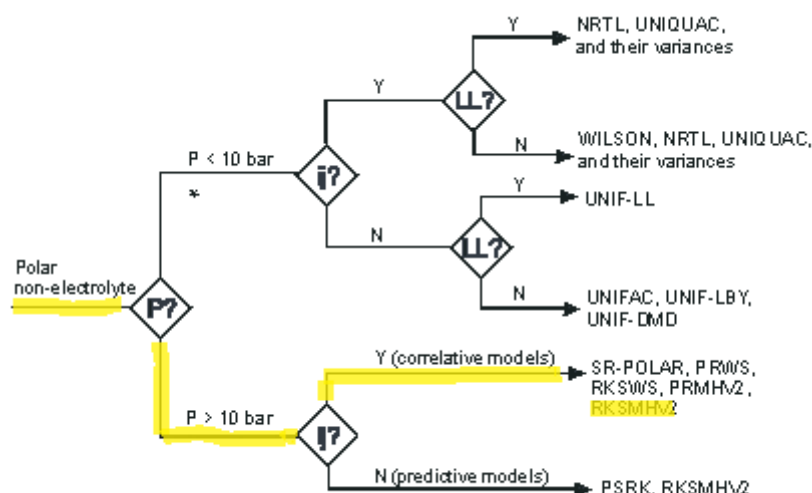


Figura 12: Segundo diagrama de elección del modelo termodinámico

Ahora se procede a elegir el modelo entre los recomendados por ASPEN, que son los que se ven en la imagen anterior. En este caso se elige el modelo de RedlicheKwongSoave con reglas de HuroneVidal modificadas (RKSMHV2) ya que es el más usado en la bibliografía (Van-Dal & Bouallou, 2013a).

3.2.2. Acondicionamiento de materias primas

La sección de acondicionamiento de las materias primas consiste en adaptar la presión y temperatura de las materias primas para que sean las requeridas a la entrada del reactor que se diseña en el apartado [3.2.3 Sección de Reacción](#).

El H₂ verde, de acuerdo con el objetivo del proceso, se obtendrá de la electrolisis del agua con electricidad generada por fuentes renovables como la energía eólica, solar o hidroeléctrica.

Las condiciones a las que distribuye son las siguientes:

Tabla 3: Condiciones de entrada de hidrógeno al proceso (Van-Dal & Bouallou, 2013a)

Pureza (% masa)	100
P (barg)	30
T (°C)	25

El CO₂ en este caso puede provenir de empresas que se dedican a la captura en industrias o de una unidad que se implante en la misma unidad del proceso, ya que para crear los servicios generales se producirá CO₂, aunque esta opción tendría que ser contemplada en fases posteriores del proyecto porque puede que no se produzca suficiente CO₂. La pureza del CO₂ varía en función del

proceso de captura, pero suponiendo que se ha capturado con etanolaminas que logran una pureza del 99,9% (Goto et al., 2013).

Las condiciones de distribución son las siguientes:

Tabla 4: Condiciones de entrada del dióxido de carbono al proceso (Van-Dal & Bouallou, 2013a)

Pureza (% masa)	99,9
P (barg)	1
T (°C)	25

Con el fin de simplificar la simulación se usará una pureza de 100% w/w de CO₂. Esto se puede suponer debido a que el CO₂ capturado con etanolaminas proviene de gases de postcombustión, y esto hace que las posibles trazas de otros compuestos no sean perjudiciales para este proceso de producción.

Para poder acondicionar las presiones de ambas corrientes de alimentación se va a recurrir a una o varias etapas de compresión. En las etapas de compresión, se utilizarán compresores con el fin de elevar la presión de las corrientes e intercambiadores de calor para enfriar las corrientes entre cada etapa ya que los gases se al ser comprimidos se calientan. Un exceso de temperatura podría encarecer la sección debido a que comprimir un fluido caliente requiere de más energía que uno frío.

También se recurre a el enfriamiento intermedio entre compresores debido a que los materiales necesarios para aguantar temperaturas altas son más caros. Además, los compresores tienen una temperatura máxima de operación que si se supera se comprometería la fiabilidad del equipo. En el caso de los compresores centrífugos el máximo es de 175°C (ENGINEERING DATA BOOK, 2004).

Esta sección es una de las más costosas ya que comprimir un gas es poco eficiente por una propiedad de los gases, por lo que parte de la energía aportada se transforma en calor en vez de en presión. Por todo esto se van a barajar distintas disposiciones de compresores e intercambiadores de calor.

Con el fin de reducir el gasto de mantenimiento y reparación de los compresores e intercambiadores de calor se acostumbra usar el mismo compresor en cada etapa. Partiendo de la premisa de que todos los compresores sean iguales se calcula una relación de compresión igual para todos.

Esta relación de compresión depende de la presión de la entrada al conjunto de compresión, a la presión de salida y al número de compresores totales. Esto se realiza con la siguiente ecuación:

$$R_c = \left(\frac{P_n}{P_0} \right)^{\frac{1}{n}}$$

Ecuación 1

Siendo R_c la relación de compresión global, P_0 la presión a la entrada en bara, P_n la presión de salida del compresor n en bara y n el número de compresores utilizados.

Para realizar el estudio de las distintas opciones se va a usar una base de cálculo usando los flujos de entrada de un artículo (Pérez-Fortes et al., 2016), estos no son los valores reales, pero dará una visión general de cuál es la mejor disposición. Para ello se va a usar el programa ASPEN PLUS V12.

Se comienza con la corriente de CO_2 que entra a una presión de 2 bara y se requiere que a la salida llegue a 81 bara por lo que se realizan las siguientes opciones:

- Cuatro compresores con enfriamiento intermedio

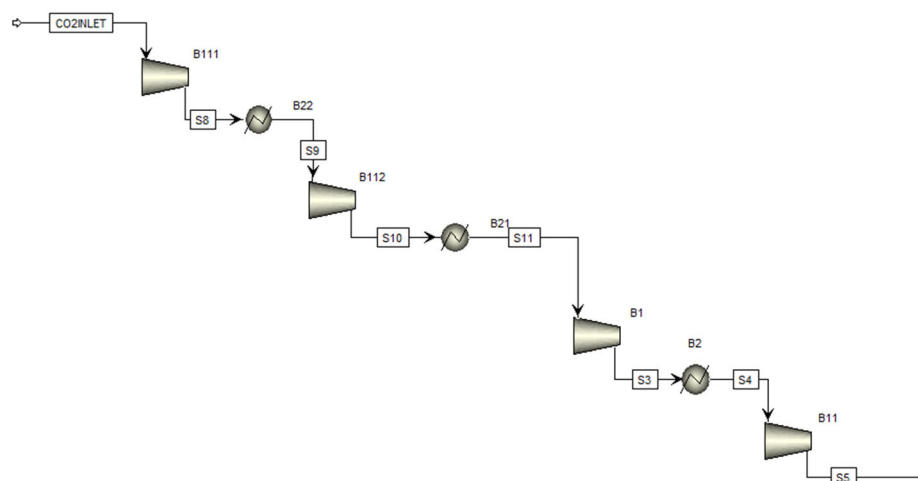


Figura 13: Disposición de cuatro compresores con enfriamiento intermedio

Utilizando la Ecuación 1, se calcula una relación de compresión de 2,5 para cada compresor. Para reducir el coste de los equipos y de operación, cada flujo de salida de cada compresor, se reduce la temperatura de salida de 150°C (inferior a la temperatura máxima de operación) hasta los 50°C siendo ésta una temperatura de refrigeración adecuada. Para reducir la temperatura se utiliza como refrigerante el agua. Alcanzar una temperatura inferior a los 50°C nos obligaría a utilizar otro refrigerante más caro.

➤ Tres compresores con enfriamiento intermedio

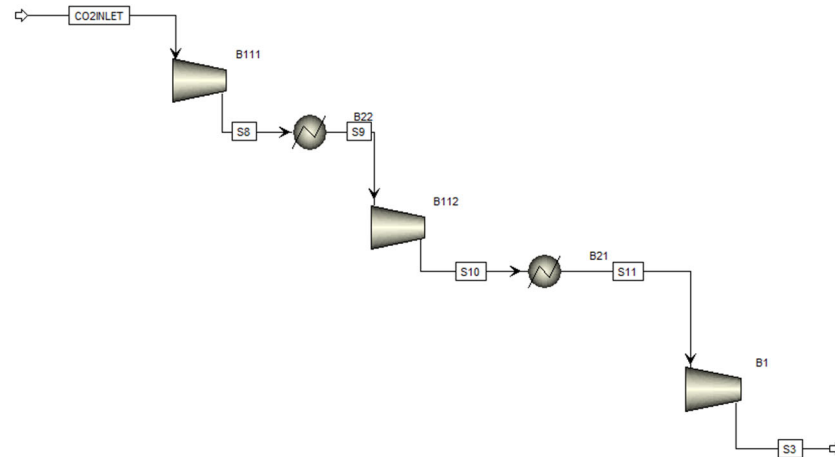


Figura 14: Disposición de tres compresores con enfriamiento intermedio

Utilizando la Ecuación 1 se calcula una relación de compresión de 3,43 para cada compresor. En este caso se vuelve a configurar la refrigeración intermedia de cada etapa a 50°C igual que en el anterior caso, pero debido a que la relación de compresión es mayor también la temperatura de salida de los compresores es mayor, en este caso es de 180°C que supera la temperatura máxima de operación.

Para bajar las temperaturas de operación de esta opción se requiere enfriar la salida de los compresores hasta una temperatura de 35°C que todavía es una opción económica. Una vez modificado las condiciones de enfriamiento intermedio la temperatura de salida de los compresores ahora llegará a 160°C que está en rango de temperatura de operación.

➤ Dos compresores con enfriamiento intermedio

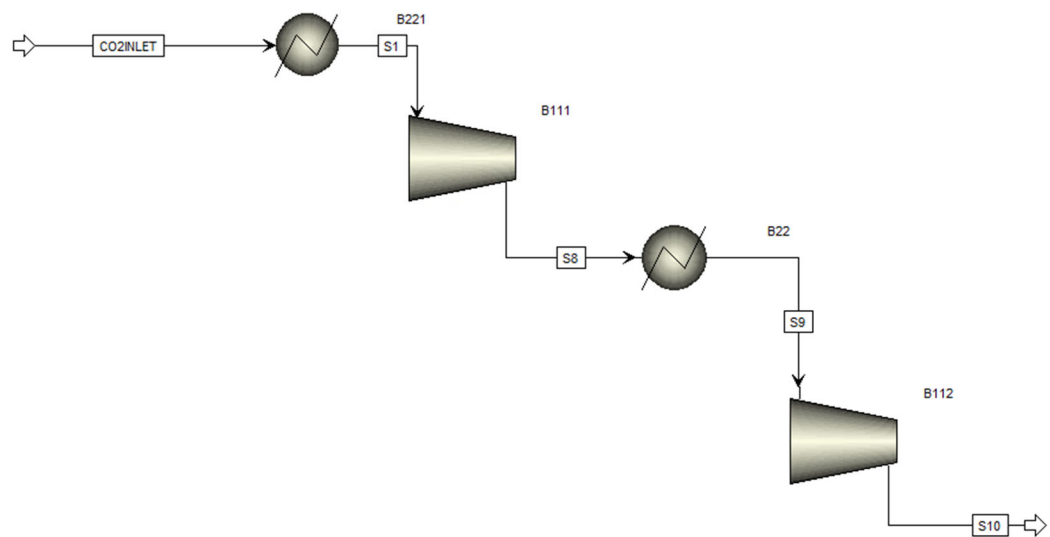


Figura 15: Disposición de dos compresores con enfriamiento previo e intermedio

Utilizando la Ecuación 1 se calcula una relación de compresión de 6,36 para cada compresor. El enfriamiento de cada etapa se configura a 35°C para que la temperatura de salida de cada compresor no se eleve demasiado, pero al igual que en el caso anterior con esta configuración las salidas de los compresores llegan hasta una temperatura de 215°C que es mayor que la temperatura máxima de operación.

Con esta configuración por mucho que se enfríe las corrientes intermedias sigue superando la temperatura máxima. Aunque esta opción se descarte ya que no se puede operar a estas temperaturas para continuar con el análisis se pone un enfriamiento previo e intermedio de 10°C que en una opción muy cara.

Para continuar, se analiza la corriente de H₂ que entra a una presión de 30 barg y se requiere una presión de salida de 80 barg igual que antes.

Ahora solo se va a dar una opción ya que el incremento de presión es mucho menos que en el caso anterior.

- Dos compresores con enfriamiento intermedio

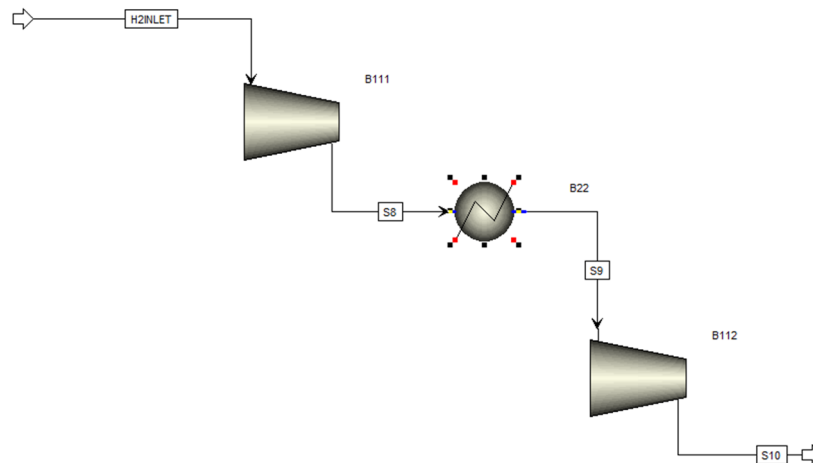


Figura 16: Disposición de dos compresores con enfriamiento intermedio

Utilizando la Ecuación 1 se calcula una relación de compresión de 1,61 para cada compresor. En este caso el enfriamiento se configura a 50°C para que la temperatura de salida de cada compresor no se eleve demasiado siendo en este caso 116°C.

No se van a dar más opciones ya que esta tiene una relación de compresión y la temperatura de salida es óptima y si se realiza en una única etapa de compresión la temperatura se elevaría demasiado y se puede comprometer la seguridad por que el H₂ es muy inflamable.

Como tabla de resumen de las condiciones de operación de las siguientes disposiciones, se presenta la siguiente:

Tabla 5: Resumen de opciones de compresión

Opciones	R _C	T _{Enfriamiento} (°C)	T _{Salida} (°C)
2 Etapas de CO ₂	6,36	10	215
3 Etapas de CO ₂	3,43	35	160
4 Etapas de CO ₂	2,50	50	150
2 Etapas de H ₂	1,61	50	116

Finalmente, se procede a elegir la opción más adecuada haciendo un balance económico de las distintas opciones. Para esto se pone 20 años de amortización que es lo común en este tipo de procesos. Para realizar el cálculo económico se usa la siguiente ecuación:

$$TOTAL = CAPEX + OPEX \cdot AÑOS$$

Ecuación 2

Siendo “TOTAL” la inversión total en MM€, “CAPEX” es el coste de capital en MM€, “OPEX” son los gastos de operación en MM€/año y “AÑOS” número de años de amortización.

Los precios de los servicios generales y de los equipos se obtienen de las librerías de precios de ASPEN PLUS V12. Con todo esto se obtiene la siguiente tabla:

Tabla 6: Resumen económico de cada disposición

Opciones	CAPEX (MM€)	OPEX (MM€/años)	OPEX (MM€)	Total (MM€)
2 Etapas de H2 2 Etapas de CO2	16,20	9,80	196,00	212,20
2 Etapas de H2 3 Etapas de CO2	17,21	9,60	192,00	209,21
2 Etapas de H2 4 Etapas de CO2	18,80	9,30	186,00	204,80

En conclusión, la mejor opción es la de 4 compresores para la línea de CO₂ y 2 compresores para el H₂ ya que al final de la vida útil del proyecto es la más barata que la opción de los tres compresores de CO₂ y que la opción de los dos compresores, aunque esta no era factible desde un principio por el exceso de temperatura a la salida del compresor.

La disposición elegida es la mejor porque, aunque el coste de capital es mayor, porque se necesitan más compresores e intercambiadores de calor que en el resto de opciones, los equipos son más pequeños por lo que la diferencia en los costes de capital es prácticamente inapreciable.

Sin embargo, la mayor diferencia viene de los gastos de operación porque cuantas menos etapas de compresión más había que bajar la temperatura en los enfriamientos intermedios para cumplir con la temperatura máxima de operación mecánica de los compresores. Incluso en la opción de dos compresores de CO₂ hay que realizar un enfriamiento previo y aun así no cumplía con la temperatura de salida del primer compresor.

Para finalizar esta sección ya una vez se ha comprimido las dos corrientes hasta los 80 barg se mezclan ambas corrientes y con un intercambiador de calor se adecua la temperatura la siguiente sección.

3.2.3. Sección de Reacción

En la sección de reacción se analizará cuáles son las mejores condiciones de operación y equipos para que la salida del reactor sea lo más productiva posible.

Elección de catalizador

Se comienza esta sección con la elección de un catalizador adecuado para las reacciones que se van a llevar a cabo. El catalizador industrialmente más usado para el proceso de obtención de metanol a partir del gas de síntesis es a base de Cu/ZnO/Al₂O₃ (Zhou & Gao, 2022).

También se ha usado para el proceso de obtención del metanol a partir de CO₂ e H₂ en unas condiciones levemente moderada de presión (entre 50 y 100 bar) y temperatura (entre 200 y 300°C), dando buenos resultado de selectividad del metanol y conversión del CO₂. Se han realizado estudios de otros catalizadores con la misma base de cobre, óxido de zinc, pero cambiando el óxido de aluminio por óxidos de circonio dando resultados muy parecidos. (Kobl et al., 2016).

Las reacciones de este proceso están controladas por las cinéticas que proporcionan estos catalizadores.

Cinéticas de reacción

Las reacciones que intervienen en este proceso son las siguientes:



La Reacción 3.1 es la reacción de hidrogenación del CO₂ que es la principal del proceso donde se forma el producto deseado que es el MeOH. La Reacción 3.2 es conocida como “Reverse Water Gas Shift” o “RWGS”. Es una reacción competitiva ya que a partir de las materias primas se obtiene CO, que es un producto no deseado.

El modelo cinético que se va a usar es el de (Vanden Bussche & Froment, 1996) el cual se modeló para el catalizador de Cu/ZnO/Al₂O₃, pero con el reajuste de los parámetros de (Mignard & Pritchard, 2006)(Van-Dal & Bouallou, 2013b).

Las expresiones de las cinéticas son las siguientes:

$$r_{MeOH} = k_1 P_{CO_2} P_{H_2} \frac{\left[1 - \frac{1}{k_{E1}} \left(\frac{P_{MeOH} P_{H_2O}}{P_{CO_2} P_{H_2}^3} \right) \right]}{\left[1 + k_2 \left(\frac{P_{H_2O}}{P_{H_2}} \right) + k_3 \sqrt{P_{H_2}} + k_4 P_{H_2O} \right]^3} \quad \text{Ecuación 3}$$



$$r_{RWGS} = k_5 P_{CO_2} \frac{\left[1 - k_{E2} \left(\frac{P_{CO} P_{H_2O}}{P_{CO_2} P_{H_2}} \right) \right]}{\left[1 + k_2 \left(\frac{P_{H_2O}}{P_{H_2}} \right) + k_3 \sqrt{P_{H_2}} + k_4 P_{H_2O} \right]} \quad \text{Ecuación 4}$$

Donde r_m es la cinética de la reacción en mol/kg_{cat} s, P_n son las presiones parciales de los compuestos n en bar y k_i son las diversas constantes cinéticas y están en mol/kg_{cat} s bar².

Las constantes se obtienen de las siguientes expresiones (Graaf et al., 1988):

$$k_i = A_i \exp\left(\frac{B_i}{RT}\right) \quad \text{Ecuación 5}$$

$$\log_{10}(k_{E1}) = \left(\frac{3066}{T}\right) - 10,592 \quad \text{Ecuación 6}$$

$$\log_{10}(k_{E2}) = -\left(\frac{2073}{T}\right) + 2,029 \quad \text{Ecuación 7}$$

Donde A_i es la constante de Arrhenius de cada constante, B_i son las constantes de las cinéticas en J/mol y T es la temperatura de reacción en K.

Tabla 7: Valores de constantes de cinética de reacción (Van-Dal & Bouallou, 2013b)

k_1	A_1	1.07
	B_1	40,000
k_2	A_2	3453.38
	B_2	—
k_3	A_3	0.499
	B_3	17,197
k_4	A_4	$6.62 \cdot 10^{-11}$
	B_4	124,119
k_5	A_5	$1.22 \cdot 10^{10}$
	B_5	-98,084

Para luego modelarlo en ASPEN PLUS V12 hay que hacer una modificación en las ecuaciones y en las constantes ya que ASPEN solo admite algunos tipos de modelos de cinéticos. Las expresiones se adaptan para el modelo LHHW de ASPEN PLUS V12. Las ecuaciones cinéticas una vez reorganizadas quedan de la siguiente forma (Van-Dal & Bouallou, 2013a):

$$r_{MeOH} = \frac{k_1 P_{CO_2} P_{H_2} - k_6 P_{H_2O} P_{MeOH} P_{H_2}^{-2}}{\left[1 + k_2 P_{H_2O} P_{H_2}^{-1} + k_3 P_{H_2}^{0.5} + k_4 P_{H_2O} \right]^3} \quad \text{Ecuación 8}$$

$$r_{RWGS} = \frac{k_5 P_{CO_2} - k_7 P_{H_2O} P_{CO} P_{H_2}^{-1}}{[1 + k_2 P_{H_2O} P_{H_2}^{-1} + k_3 P_{H_2}^{0,5} + k_4 P_{H_2O}]} \quad \text{Ecuación 9}$$

$$\ln(k_i) = A_i + \frac{B_i}{T} \quad \text{Ecuación 10}$$

Ahora la tabla de constantes es la siguiente:

Tabla 8: Valores reajustados de constantes de cinética de reacción (Van-Dal & Bouallou, 2013b)

k_1	A_1	-29.87
	B_1	4811.2
k_2	A_2	8.147
	B_2	0
k_3	A_3	-6.452
	B_3	2068.4
k_4	A_4	-34.95
	B_4	14,928.9
k_5	A_5	4.804
	B_5	-11,797.5
k_6	A_6	17.55
	B_6	-2249.8
k_7	A_7	0.1310
	B_7	-7023.5

Figura 17: Modelo de LHHW de ASPEN PLUS V12

Finalmente, se comprueba la validez del modelo de ASPEN PLUS V12 simulando el reactor en las mismas condiciones de operación de varios artículos bibliográficos. El resultado de esta comprobación es la verificación del modelo usado.

Análisis de condiciones de operación y equipos de reacción

El principal objetivo de este análisis es maximizar la selectividad hacia el metanol a partir de la elección de un reactor y unas condiciones de operación optimas en las que se llega a un equilibrio entre la selectividad y un diseño eficiente del reactor.

Para maximizar la selectividad, se tiene en cuenta las cinéticas de las reacciones (Ecuación 3 y 4), que en este caso son dos reacciones paralelas, en las que el producto deseado es el metanol.

La selectividad, S , se define como el producto deseado entre el producto no deseado obtenido después de la reacción. Para calcular la selectividad se usa esta expresión:

$$S = \frac{r_{MeOH}}{r_{RWGS}} \quad \text{Ecuación 11}$$

En primer lugar, se va a elegir un patrón de flujo adecuado para alcanzar el objetivo que es maximizar la selectividad teniendo en cuenta las cinéticas. Debido a la complejidad de las cinéticas se realiza un análisis numérico en Excel donde como producto de la división de ambas cinéticas se comprueba que la concentración de H_2 juega una especial importancia en la selectividad por lo que es importante mantener en el reactor una elevada concentración del mismo.

La concentración del CO_2 no juega un papel tan determinante en la selectividad como el H_2 , como se puede comprobar en el análisis numérico. Aunque no modifique la selectividad se debe mantener alta la concentración de CO_2 ya que acelera las cinéticas y esto hace que el tiempo de residencia en el reactor disminuya por lo que el volumen del reactor también disminuye. Con la finalidad de mantener la concentración de los reactivos elevadas no es necesario el uso de inertes que hacen disminuir dichas concentraciones.

En la siguiente imagen se representan la evolución de la concentración según avanza el tiempo de residencia dentro del reactor. El patrón de flujo representado en la primera figura corresponde con el Flujo de Pistón (Plug Flow) en el que se ve que la concentración de la alimentación (F) disminuye gradualmente según avanza en el reactor, sin embargo, en la segunda imagen que corresponde con el modelo de Mezcla perfecta (CSTR), la concentración de productos (P) y alimentación, según entran en el reactor ya llegan a la concentración final.

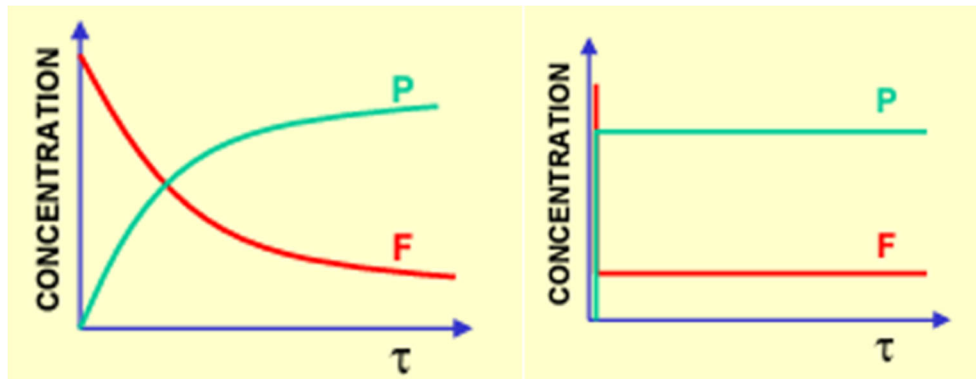


Figura 18: Esquema de concentración de distintos patrones de flujo

Con relación a lo expuesto anteriormente el patrón de flujo más adecuado es el Flujo de Pistón debido a que mantiene las concentraciones de los reactivos más altas durante el reactor comparado con el patrón de Mezcla perfecta.

Otro factor a la entrada del reactor es la ratio con el que van a entrar los reactivos. A propósito de la importancia de la concentración de cada una de las materias primas y a la estequiometría de la Reacción 3.1, se entiende que el flujo de H_2 debe ser mayor que el flujo de CO_2 .

Realizando un análisis numérico en el que se estudia la variación de la selectividad en función de la ratio a la entrada del reactor se obtiene la siguiente figura:

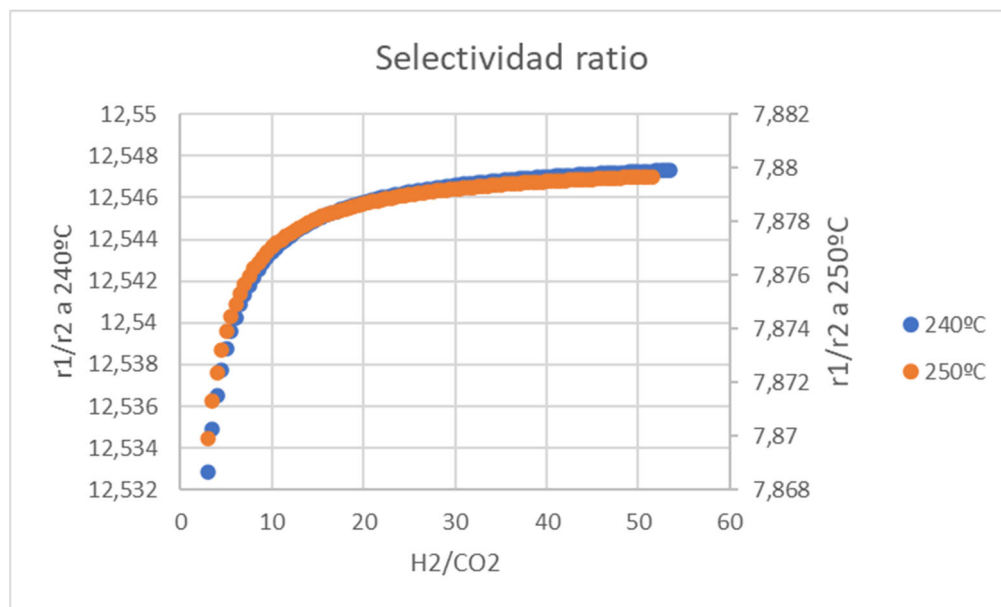


Figura 19: Análisis numérico de la selectividad en función de la ratio a distintas temperaturas

Por lo que se llega a la conclusión de que se trabajará con una relación estequiométrica en la que se introducirá 3 moles de H_2 por cada 1 mol de CO_2 ya que la selectividad no varía demasiado con las distintas ratios. Esta decisión

se toma porque el estequiométrico es la ratio mínima y también porque trabajar con exceso de H_2 es poco económico debido a el actual precio del H_2 y no aporta nada.

El último factor a tener en cuenta es la conversión de reactivos a productos que se va a tener en el reactor. Con todo lo que se ha analizado se llega a la conclusión de que en el reactor debe de haber una conversión baja, porque así no reacciona mucho CO_2 ni H_2 y así se consigue que la concentración de las materias primas se mantenga alta en el reactor favoreciendo así la selectividad. Esta decisión hace que la corriente de salida del reactor contenga materias primas que no han reaccionado, y con el fin de aprovecharlas se recircularán a la entrada del reactor.

Por ello se llega a un balance entre la conversión en el reactor y la recirculación ya que a una conversión demasiado baja el flujo de reciclo aumentará mucho haciendo que el volumen del equipo aumente también excesivamente.

También, con motivo de maximizar la selectividad y que no aumente en exceso el flujo de recirculación se recirculara solo los reactivos y el CO presentes a la salida del reactor consiguiendo que la segunda reacción de equilibrio se incline hacia la formación de reactivos ya que introducimos productos de esta reacción en la alimentación.

Con esto se consigue aumentar la conversión general del proceso reutilizando los reactivos y un subproducto para mejorar la selectividad y la eficiencia del proceso.

Una vez elegido el patrón de flujo se procede a la elección de las condiciones de operación entre las que se encuentra la presión y temperatura.

La presión en este caso es una condición importante a tomar en cuenta debido a que las reacciones se van a llevar a cabo en fase gas por lo que las presiones parciales de cada compuesto dependen de la presión de operación como se puede comprobar en la ecuación de Dalton:

$$P_a = P_T \cdot y_a \quad \text{Ecuación 12}$$

Siendo P_a la presión parcial del compuesto a, P_T la presión de operación e y_a la composición de a en una corriente.

Aunque no sea determinante para la selectividad, es importante operar a una presión alta para poder aumentar así las presiones parciales y favorecer las cinéticas. Pero las presiones deben llegar a un compromiso entre la cinética, el espesor y material necesario para el diseño del equipo, porque cuanto más

presión, mayor deberá de ser el espesor de las paredes del reactor al igual que se demandará un material capaz de resistir las presiones de operación.

Se trabajará con una presión de 80 barg que mantiene un buen compromiso entre la velocidad de reacción y el coste de construcción del equipo. Dicho valor se obtiene de la bibliografía, dando opción para optimizar esta condición de operación en una posible revisión del proyecto.

La otra condición de operación es la temperatura, también es otro factor importante ya que interviene en la velocidad de reacción directamente en el cálculo de las constantes cinéticas de ambas reacciones.

En el caso de la reacción del MeOH (Reacción 3.1) es exotérmica, ya que su entalpia de reacción es negativa ($\Delta H_{\text{MeOH}} = -87 \text{ kJ/mol}$), esto hace que al reaccionar libera energía, sin embargo, la segunda reacción (Reacción 3.2) es endotérmica ya que su entalpia de reacción es positiva ($\Delta H_{\text{RWGS}} = 41 \text{ kJ/mol}$), y esto hace que necesite energía para poder reaccionar.

Para ver la temperatura de operación que favorece la selectividad se analiza cada reacción por separado:

La reacción de MeOH es una reacción de equilibrio y exotérmica y esto hace que si se aporta demasiada energía el equilibrio se incline a la formación de reactivos en vez de la formación de productos. La segunda reacción también es de equilibrio, pero endotérmica por lo que cuanto menos energía se aporte menos reaccionará y menos subproducto se formará, aumentando así la selectividad.

Este análisis de las reacciones indica que para alcanzar el objetivo de maximizar la selectividad se debe operar a temperaturas bajas ya que favorece a ambas reacciones.

Como antes con la presión también hay que llegar a un compromiso entre la selectividad y el tiempo de residencia en el reactor, porque cuanto más temperatura mayor será la velocidad de reacción haciendo que el tiempo de residencia del reactor sea menor por lo que el volumen del reactor será menor y disminuirá el precio del equipo, pero esto haría que la selectividad disminuyera mucho haciendo así la reacción menos eficiente.

Para ver la sensibilidad de la selectividad frente a la temperatura se realiza igual que antes un análisis numérico con las condiciones de operación anteriormente determinadas obteniendo esta figura:

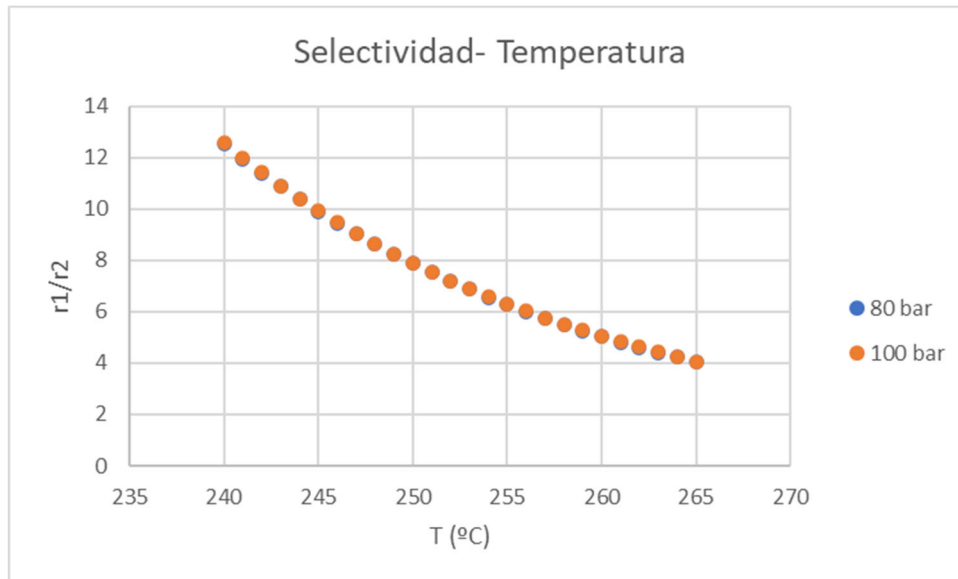


Figura 20: Análisis numérico de la selectividad en función de la temperatura a distintas presiones

Como se puede ver en la figura la selectividad es muy sensible a los cambios en la temperatura y que según aumenta la temperatura la selectividad disminuye. Para salvaguardar una alta selectividad, dado que la reacción principal es exotérmica y provocará un aumento de temperatura, se va a mantener la misma temperatura en todo el reactor haciendo que la operación sea isoterma mediante el uso de un sistema de refrigeración.

Por todo lo anteriormente expuesto, la temperatura de operación será constante de 240°C ya que es la mínima necesaria para mantener la fase gas dentro del reactor, también para no comprometer demasiado la velocidad de reacción y obtener un diseño del equipo eficiente.

A continuación, se inserta una tabla resumen de cómo actúa cada condición de operación en la selectividad, cinética y diseño de equipo, y las condiciones de operación elegidas finalmente:

Tabla 9 : Resumen condiciones de operación de la reacción

Condiciones de operación		Selectividad	Cinética	Coste del Equipo	Elección final
Patron de flujo	Concentración Alta	↑	↑	↑	PF
	Concentración Baja	↓	↓	↓	
Ratio		-	-	-	3:1
Presion	Alta	-	↑	↑	80 barg
	Baja	-	↓	↓	
Temperatura	Alta	↓	↑	↑	240°C
	Baja	↑	↓	↓	

Finalmente, se procede a la elección del equipo que reúna todas estas condiciones expuestas en el análisis de las condiciones de operación.

Las reacciones son en fase gas con el uso de catalizador, para esta condición y el patrón de flujo elegido (Plug Flow) hay varias opciones que consiste en un reactor multi tubular isotérmico, para mantener la temperatura de reacción constante usando un refrigerante, o la otra opción que corresponde con el patrón de flujo es una serie de reactores continuos encamisados para refrigerar el mismo y una cesta giratoria para que mezcle el contenido y que contenga el catalizador.

Pero teniendo en cuenta la presión y temperatura a las que se van a operar es mejor opción la del reactor catalítico multi tubular. Esto es así porque a una elevada presión, como es 80 barg, es más económico hacer los tubos con más espesor que realizar una serie de tanques que aguanten dichas presiones. También es mejor opción ya que a la hora de refrigerar los gases de reacción en un reactor multi tubular el área de intercambio de calor necesario para retirar el calor es más compacta que en una serie de reactores donde para cada reactor tiene que tener un encamisado distinto con una red de refrigeración distinta.

Además un factor importante es la transferencia de materia de los reactivos a los centros activos del catalizador y para que este paso sea eficiente y no se convierta en limitante se necesita una gran turbulencia que es más fácil y económico de obtener en el reactor multi tubular debido a que en el reactor continuo de cesta hay que agitar el contenido y esto se realiza con motores eléctricos.

El diseño mecánico del reactor se detallará en el apartado [3.4. Diseño de equipos](#).

Una vez ya se ha diseñado y simulado la reacción en este reactor se obtiene un perfil de concentraciones dentro del reactor como el siguiente:

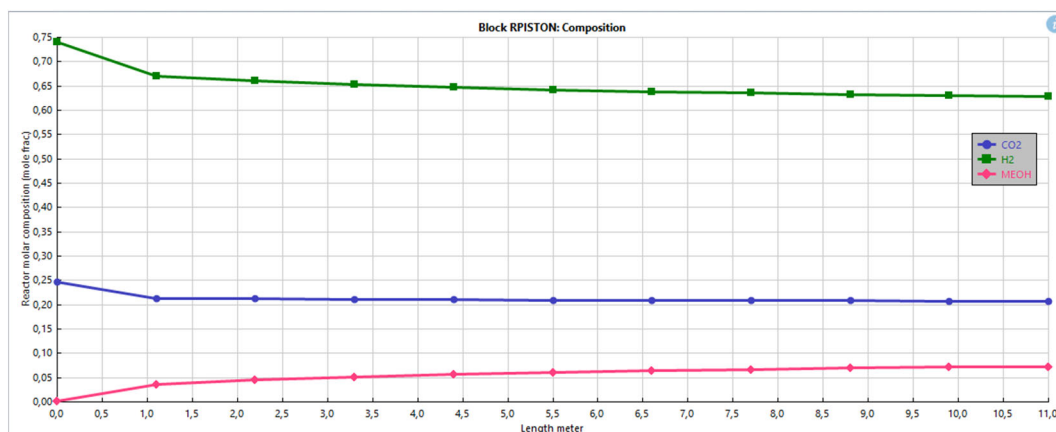


Figura 21: Composición dentro del reactor

En la tabla 10 se muestra la entrada y salida del reactor una vez recirculado las materias primas y CO que se separan en una fase inicial obteniendo una conversión en el reactor del 30%:

Tabla 10: Resumen de flujos de entrada y salida de la sección de reacción

	Entrada (Kmol/h)	Salida (Kmol/h)	Entrada (Kg/h)	Salida (Kg/h)
CO ₂	250,6	183,1	11029	8058
H ₂	751,8	549,5	1515	1107
MeOH	1,47	69	47,18	2206
CO	15,23	15,35	426	430
H ₂ O	0,26	67,77	4,7	1120

3.2.4. Sección de Separación

En la sección de separación se analizará cuáles son los equipos y sus condiciones de operación más óptimas para alcanzar una alta recuperación de los productos y la pureza necesaria para la posterior venta de los mismos, que es de 99,98% en masa (Ott et al., 2012).

Para ello se van a seguir las reglas del pulgar que consisten en unas normas para aumentar la eficiencia en la separación. Estas son las siguientes:

- Hacer la separación más difícil al final.
- Favorecer la secuencia directa de separación
- Las fracciones más grandes separarlas al principio
- Favorecer las secuencias equimolares

Se propone la siguiente ruta de separación que cumple más reglas del pulgar:

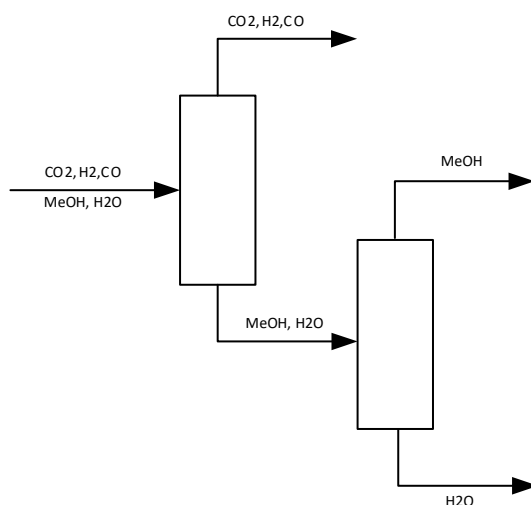


Figura 22: Propuesta de ruta de separación de los componentes después de la reacción

Separando en primer lugar los compuestos más ligeros e incondensables, que hacen que la temperatura de condensación de las torres disminuya mucho haciendo mayor el coste de operación, en este caso son: CO_2 , H_2 y CO . Además son los que mayor fracción ocupan en la corriente de salida del reactor, por lo que ya se cumplen dos normas. A continuación, no seguimos separando la fracción más ligera porque no es necesario en este proceso, ya que se recirculan los tres aumentando así la eficiencia del proceso.

Como solo quedan dos compuestos que, en este caso salen equimolarmente del reactor (tienen los mismos coeficientes estequiométricos,) y además son los más difíciles de separar, aunque no se formen azeótropos, cumplimos otra de las reglas del pulgar saliendo el MeOH por la parte superior ya que su temperatura de ebullición es menor que la del agua.

Ahora se valorará cuáles son los equipos más adecuados para realizar esta separación:

En primer lugar, como se ve en la ruta de separación se procede a separar la fracción más ligera a la vez de más voluminosa de la corriente de salida del reactor, eso se realiza condensando la corriente de salida que está en fase gas.

Una vez ya condensados parte de los gases se forman dos fases, una gaseosa y otra líquida, y para separar estas fases se usa un equipo llamado "Flash" que consiste en un depósito que separa este tipo de corrientes bifásicas en dos corrientes distintas con una sola fase. En la corriente de gases se irán los compuestos más volátiles y en los líquidos los compuestos más pesados.

Como los procesos no son ideales las composiciones de las salidas no son perfectas, por lo que algunos ligeros se van en la corriente de líquidos y viceversa. Para llegar a un compromiso entre la temperatura de condensación de la salida y la cantidad de producto en moles que se va por la corriente de gases se realiza un análisis de sensibilidad en ASPEN PLUS V12.

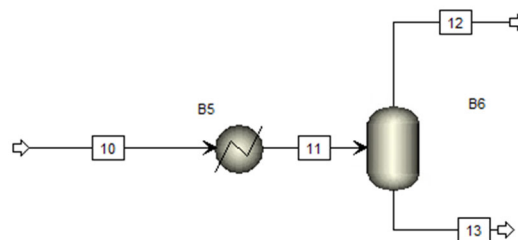


Figura 23: Modelo usado en ASPEN PLUS para el análisis de sensibilidad

Una vez configurado la corriente que llega del reactor (10) con la temperatura, presión y composición, se realiza el análisis de sensibilidad obteniendo las gráficas siguientes:

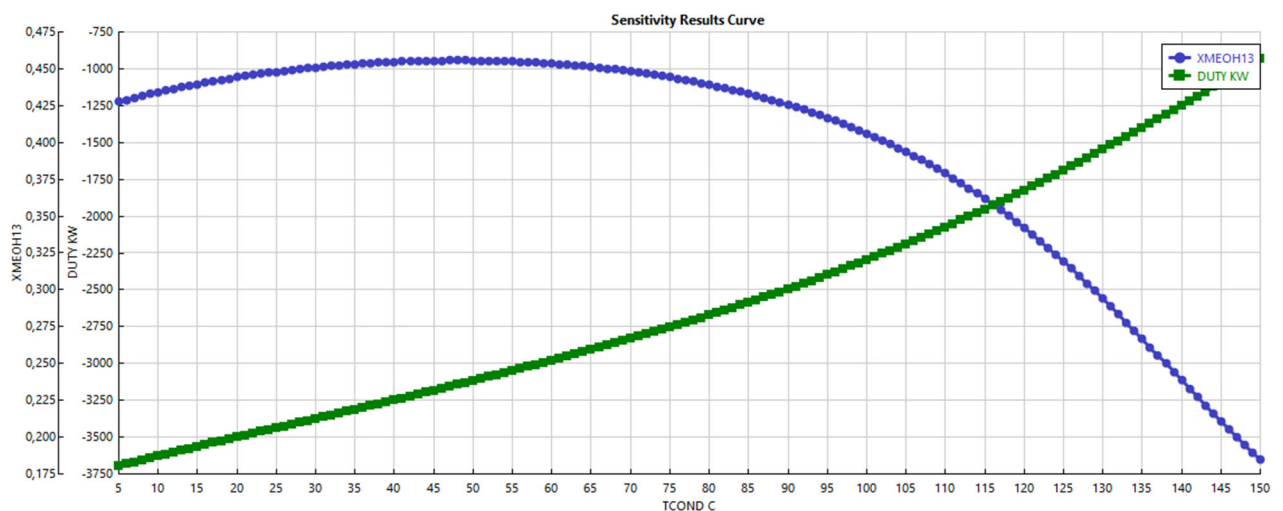


Figura 24: Variación de la composición de salida de la corriente líquidas y de las necesidades energéticas del condensador

En la figura 24 se puede ver un máximo en la composición de MeOH en la salida de abajo del flash (13). También se puede observar que las necesidades energéticas para condensar la salida del reactor aumentan, en valor absoluto, cuanto menor sea la temperatura de condensación. Esto indica que el proceso será más caro.

A veces una pureza del producto alta puede ser debido a que se está sacrificando la recuperación, y por eso se realiza otro análisis igual, pero en vez de la composición ahora se comprueba los flujos máxicos de salida del flash.

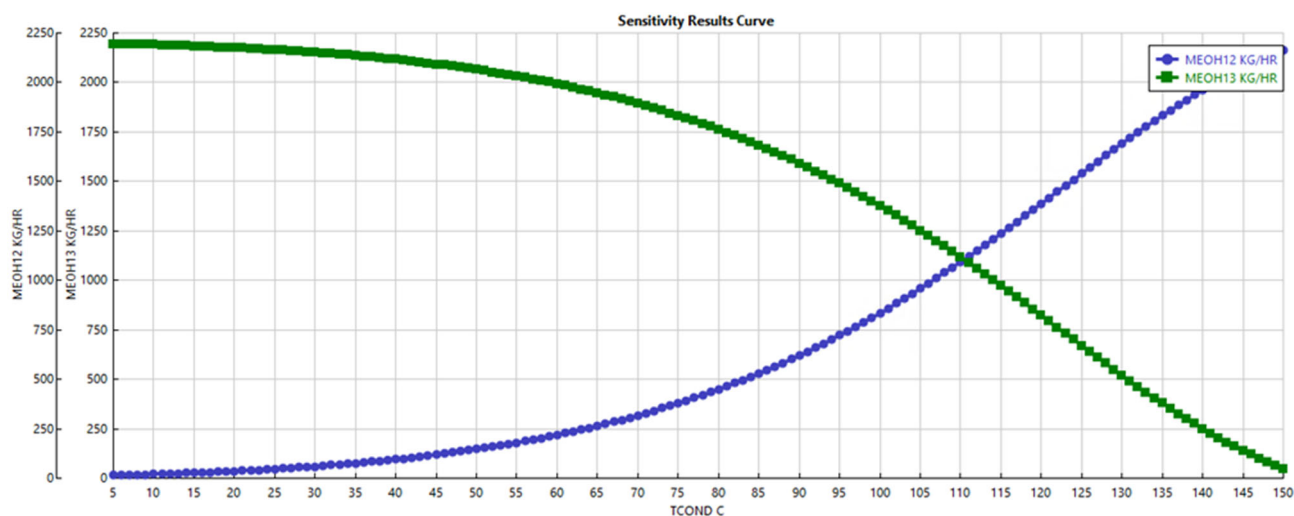


Figura 25: Variación de los flujos de salida del flash en función de la temperatura de condensación

En la figura 25 se comprueba que donde antes había una máximo en la pureza a 50°C más o menos ahora a esa temperatura se ve que por la corriente de gases (12) se escapan unos 200 kg/h de MeOH que es el producto. En esta fase de la separación no interesa tanto la pureza sino la mayor recuperación de producto en el líquido, ya que se va a someter a otro proceso de separación.

Finalmente, tras este primer análisis, se puede concluir que es más óptimo condensar a una temperatura de 25°C. Dicha conclusión puede justificarse en primer lugar, porque a esta temperatura se pierde poco producto que con posterioridad se recirculará de nuevo en el reactor, en segundo lugar, es una temperatura cómoda para condensar por los servicios generales y por último, las necesidades entre una temperatura un poco más elevada y menos no tienen mucha diferencia.

A continuación, hay varias posibles opciones para continuar el proceso de separación y purificación del MeOH ya que a la salida líquida del primer flash hay todavía una gran cantidad de CO₂ y CO que hay que quitar.

Las opciones son las siguientes, la primera consiste en usar otro flash, pero disminuyendo la presión para que la corriente se vuelva a dividir en dos fases y así eliminar la mayoría de los compuestos volátiles que queden en el líquido y después poner una torre de destilación con un condensador parcial para eliminar prácticamente del todo los volátiles y la otra opción es bajar la presión, igual que en la primera opción, y poner luego una torre de destilación con condensador parcial para ahorrar el segundo flash.

Las diferencias entre las dos opciones son las siguientes, en la primera opción hay más gasto porque el número de equipos será mayor. En cambio la torre de la primera opción será más barata que la de la segunda, ya que al haber menos tránsito de flujos, eliminados previamente en el segundo flash, las dimensiones de la torre serán mucho menores, ahorrando en material y en servicios generales debido a que la cantidad a condensar y evaporar serán menores.

Para ver cuál es la mejor opción se realiza un estudio económico y de coste de oportunidad de producto perdido en cada etapa de separación. Para hacer este análisis se usa el programa de simulación ASPEN PLUS V12 del que se obtiene el balance de materia y las dimensiones y precios de cada equipo y servicio general necesario para cada opción:

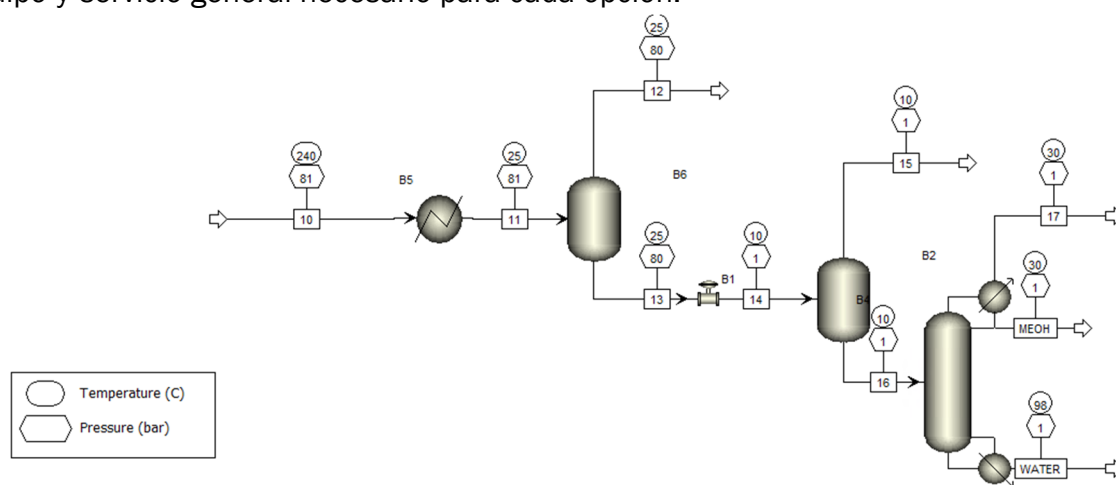


Figura 26: Diagrama de la primera opción dos flash y torre de destilación

En esta opción se disminuye la presión hasta la de ambiente, con la finalidad de que las fracciones más ligeras que restan en la corriente líquida de salida del primer flash se escinda en dos fases, y con el fin de que la torre de destilación siguiente opere a presión ambiente y reducir costes. En esta etapa se pierde una parte de MeOH ya que no es un proceso ideal.

A continuación, la torre se ha diseñado para obtener una recuperación de producto lo mayor posible a una pureza del 99,85%, para ello se ha usado un método “shortcut” validado con un modelo de simulación riguroso. Se detallará en el apartado de [3.4 Diseño de equipos](#).

Uno de los problemas que se ha encontrado es la temperatura de condensación a dicha presión de operación, ya que todavía quedaban trazas de CO₂, por lo que se ha optado en usar un condensador parcial a una temperatura elevada para no aumentar el coste en servicios generales ya que a 30°C se podrá usar agua de refrigeración.

Tabla 11: Análisis de la pérdida de producto en cada etapa de la primera opción

Perdidas de metanol por etapa	Flujo Kg/h	%	€/kg de MeOH
1 Flash	47,19	2,13	0,0128
2 Flash	19,51	0,88	0,0053
Torre destilación	16,43	0,74	0,0044
Producto Final	2127,75	96,24	0,5750
Salida del Reactor	2210,91	100,00	0,5975
Perdidas			0,0225

En la Tabla 11 se muestra que se recupera un 96,24% del producto que sale del reactor al igual que el coste por cada kilogramo del producto final, siendo el precio del MeOH 0,575 €/kg (*Methanol Prices, Monitor, News, Market Analysis & Demand*, n.d.). Por lo que podemos concluir que en esta opción hay pérdidas de 0,0225 €/kg de MeOH producido.

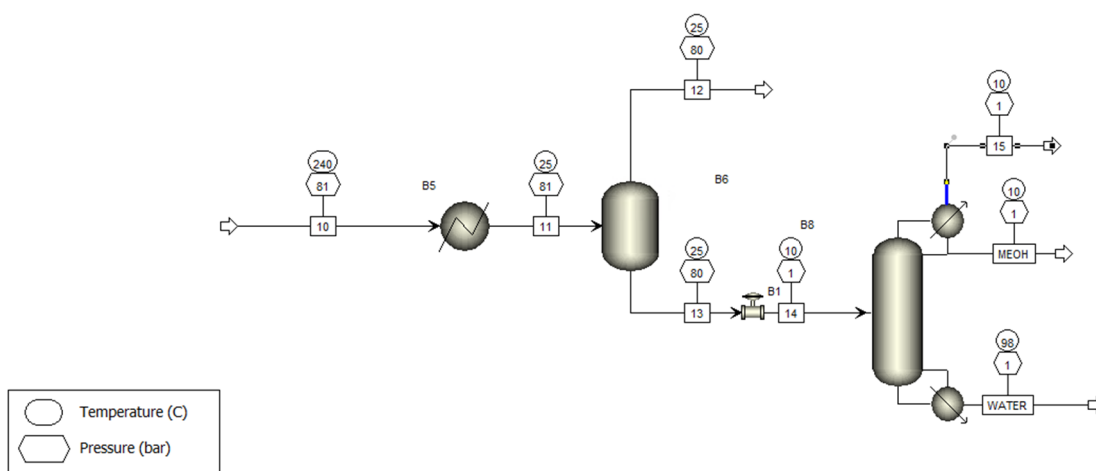


Figura 27: Diagrama de la segunda opción un flash y torre de destilación

En la figura 27 se comienza igual que en la anterior con una válvula que disminuye la presión hasta la de ambiente pero a diferencia de la anterior se introduce directamente en una torre de destilación. El cálculo de la torre se realiza del mismo modo que la anterior, pero ahora se observa un problema a la hora de llegar a la pureza demandada.

Debido a la presencia de más volátiles en el condensador, la temperatura de condensación disminuye provocando que a la misma temperatura que en la anterior opción, se pierde gran cantidad de metanol. Para mantener un grado de recuperación competente se disminuye la temperatura en el condensador hasta los 10°C. Con esta disposición obtenemos estos valores de pérdidas:

Tabla 12: Análisis de la pérdida de producto en cada etapa de la segunda opción

Perdidas de metanol por etapa	Flujo Kg/h	%	€/kg de MeOH
1 Flash	47,19	2,13	0,0128
Torre destilación	50,32	2,28	0,0137
Producto Final	2113,00	95,57	0,5750
Salida del Reactor	2210,91	100,00	0,6016
Perdidas			0,0266

En este caso se comprueba que la pérdida de producto es superior que en la anterior opción obteniendo una recuperación de producto del 95,57%. La causa de que no se produzca tanta recuperación de producto puede deberse al aumento del flujo de entrada en la torre de destilación disminuyendo su eficiencia. Otro problema que puede producirse es que al aumentar el CO₂, el equilibrio entre el agua y el metanol varía, e imposibilita su eliminación en la corriente de salida.

En esta opción hay una pérdida de 0,0266 €/kg de MeOH que es mayor que la anterior pero no determinante, por ello ahora se va a comprobar el precio de cada opción para ver cuál es más rentable:

Tabla 13: Precio de los equipos y servicios generales de la primera opción

Opción 1	Precio (€)	Precio (€/h)	€/kg de MeOH
Servicios generales	-	66	0,03102
1 Flash	178.700	1,12	0,00052
2 Flash	34.000	0,21	0,00010
Torre destilación	982.100	6,14	0,00288
Total			0,03453

Tabla 14: Precio de los equipos y servicios generales de la segunda opción

Opción 2	Precio (€)	Precio (€/h)	€/kg de MeOH
Servicios generales	-	209,87	0,09863
1 Flash	178.700	1,12	0,00052
Torre destilación	1.338.000	8,36	0,00393
Total			0,10309

Para realizar el análisis de las tablas 13 y 14 se ha supuesto que la planta opera 20 años unas 8000 h/año. Se calcula el precio de los equipos por hora obteniendo cuánto es el coste por kilo de metanol producido en cada opción.

Como ya se había predicho tenemos que el precio de los servicios generales de la primera opción es mucho más barato que los de la segunda opción. La razón es que en la primera opción la mayoría de los ligeros se eliminan en el segundo flash, por ello, la energía necesaria para evaporar y condensar en la torre es menor.

También son más baratos porque la temperatura de condensación en la torre de la primera opción es 30°C que permite utilizar el agua, siendo más económico que condensar a 10°C como en el caso de la segunda opción y que nos obligará a utilizar otro servicio general.

En las tablas 13 y 14, también se puede observar que hay una diferencia enorme entre el precio de las dos torres. La mayor corriente de entrada de la segunda opción exige un equipo más grande y por tanto más caro.

En conclusión, se elige la primera opción, por dos razones. En primer lugar, es mucho más económica en cuanto a los servicios generales y al precio de los equipos y en segundo lugar, porque se recupera más producto con una pureza superior a diferencia de la segunda opción que no llega a la misma pureza.

3.3. Diagrama de proceso: PFD y P&ID

Una vez ya se conocen todos los equipos y las condiciones de operación de cada sección del proceso se realizan unos diagramas, a diferencia del diagrama de bloques, muestran de manera más detallada todo el proceso.

Estos diagramas estarán en el [ANEXO I: Diagramas del proceso](#)

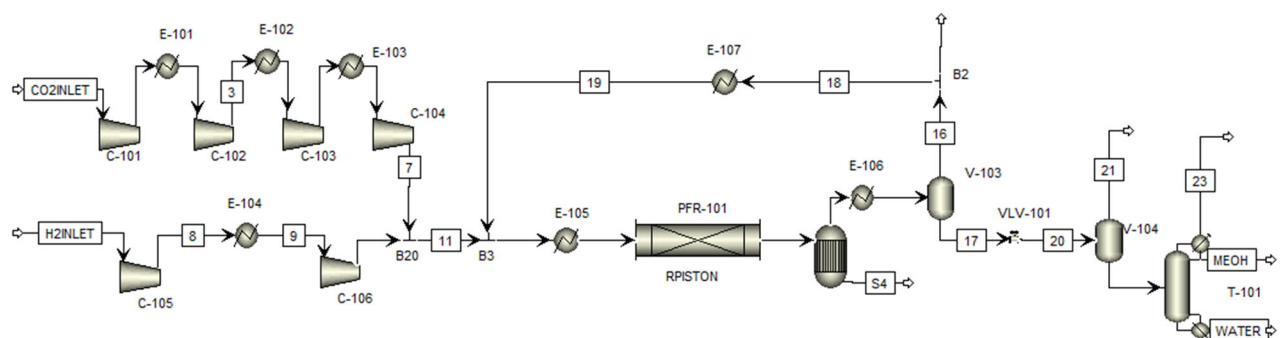


Figura 28: Diagrama del proceso completo en ASPEN PLUS

3.3.1. Diagrama de flujo de proceso (PFD)

El diagrama de flujo de proceso (Process Flow Diagram) es una representación un poco más detallada del proceso que el diagrama de bloques. En este se representan los equipos y sistemas principales para llevar a cabo dicho proceso, al igual que información básica de las corrientes de proceso que luego se detallarán más tarde en el [ANEXO III: Tablas de corrientes](#).

Estos diagramas estarán en el [ANEXO I: Diagramas del proceso](#)

El diagrama está dividido en cuatro páginas. La primera corresponde con el resumen de la simbología y nomenclatura que posteriormente se usará en las siguientes páginas. En la parte superior se incluyen los símbolos de los equipos que van a estar presentes en el proceso: cambiadores de calor, reactor, columna...

La parte inferior contiene dos tablas. La primera indica cómo se van a nombrar cada uno de los equipos. En concreto, para nombrar cada equipo, como la planta no tiene suficiente envergadura se define únicamente una unidad, la unidad 100, por lo que finalmente se usará la letra correspondiente a la tabla y seguidamente el número de la unidad y la posición. Por ejemplo, E-103 corresponde a un intercambiador de calor de la unidad 100 y es el tercer cambiador.

En la segunda tabla se muestra los servicios generales que sirven para aportar o eliminar energía del proceso. En este caso son corrientes de agua en estado líquido o vapor. Estas corrientes no se mezclan con las corrientes de proceso. Esta tabla también refleja la nomenclatura de los dispositivos de control más genéricos para que el proceso funcione correctamente.

En la segunda página, se encuentra el principio del proceso, en el que se ve la línea de alimentación de CO₂ seguido de un depósito (V-101) que tiene el fin de homogeneizar, limpiar de imperfecciones y amortiguar posibles variaciones en el suministro. A continuación, se da paso a la primera etapa de compresión con enfriamiento intermedio (CS-101) en el que intervienen los siguientes equipos C-101, C-102, C-103, C-104 y E-101, E-102, E-103. En esta etapa de compresión se lleva la presión de 1 barg a 80 barg como ya se explicó en el apartado [3.2.2 Acondicionamiento de materia primas](#). Esto se repite, pero para el suministro de H₂ en el que el depósito es V-102 y la etapa de compresión con enfriamiento intermedio (CS-102) intervienen C-105, C-106 y E-104. Finalmente, las dos corrientes de alimentación se juntan en una sola.

En la tercera página, se encuentra en primer lugar un intercambiador (E-105) que adecua la temperatura de la corriente para después entrar en el reactor catalítico multi tubular (PFR-101) que esta refrigerado por una camisa térmica

con el fin de mantener la temperatura constante durante la reacción. Como se explicó en el apartado [3.2.3 Sección de reacción](#). A continuación, la corriente de salida se enfría para condensar todo lo posible en el cambiador (E-106) y se envía al primer flash (V-103) para separar las fracciones más ligeras de las más pesadas. De aquí salen una corriente por arriba correspondiente al vapor, que se vuelve a calentar en el cambiador (E-107) y se recicla juntándolo con la corriente de alimentación, y por abajo la corriente líquida que se envía a la siguiente página.

En la cuarta página, se coge la corriente líquida que viene de la anterior página y se pasa por una válvula que reduce la presión hasta la de ambiente y esto crea que la corriente se escinda en dos fases de nuevo y se llega al segundo flash (V-104) en el que vuelve a salir dos corrientes, la de vapor que se purga para mantener el balance de masa y la líquida que se envía a la torre de destilación (T-101) en la que se separa finalmente el agua del metanol usando en la cabeza de la torre un condensador (E-108) con un depósito para separar los incondensables del líquido (V-106) y una bomba (P-101) para recircular a la torre parte de las cabezas y en la cola un ebullición tipo kettle (E-109) del que salen las colas de la torre. Todas las condiciones de operación de esta sección se explican en el apartado anterior [3.2.4 Sección de separación](#)

3.3.2. Diagrama de líneas e instrumentación (P&ID)

El diagrama de líneas e instrumentación (Pipe and Instrumentation diagram) es el último diagrama en el que se describe detalladamente todos los equipos, válvulas, lazos de control, etc.

Estos diagramas estarán en el [ANEXO I: Diagramas del proceso](#)

Dimensionamiento de líneas

Debido a que en este diagrama hay que definir el diámetro y espesor de cada línea de proceso se comienza dimensionando el diámetro y caída de presión de cada línea.

Para el cálculo del diámetro se usan de referencia unos valores típicos de velocidad y caída de presión. La velocidad en las líneas se calcula dividiendo el flujo volumétrico que las atraviesa entre la sección:

$$u_L = \frac{4 \cdot Q \cdot f_Q}{\pi \cdot D_L^2} \quad \text{Ecuación 13}$$

Donde u_L es la velocidad del fluido por la línea en m/s, Q es el flujo volumétrico en m^3/s , f_Q es un factor de seguridad de diseño es igual a 1,1 y D_L es el diámetro de la línea (m).

Los valores de la velocidad usados para el cálculo de los diámetros son para líquidos de 3 m/s y de 60 m/s para gases. A partir de la velocidad y el diámetro de la línea obtenemos el número de Reynolds (Re) y con la rugosidad de la tubería (ϵ), se usa típicamente $\epsilon=0,0018$ m, se calculará la caída de presión en dicha línea que tiene que ser como máximo de 5 bar/km. La expresión para el cálculo de la caída de presión es la siguiente:

$$\frac{(-\Delta P)}{L} = f_{\Delta P} \cdot \left(2 \cdot f \cdot \frac{\rho \cdot u_t^2}{D_L} \right) \quad \text{Ecuación 14}$$

En la que $(-\Delta P)/L$ es la caída de presión por unidad de longitud en bar/km, $f_{\Delta P}$ en un factor de seguridad de diseño con valor de 1,2, ρ es la densidad del fluido kg/m^3 y f es el factor de fricción que se obtiene entrando en el diagrama de Moody con el Re y ϵ/D_L . (Crespo Martínez, n.d.)

En la nomenclatura de las líneas además del diámetro también se especifica el fluido conducido en ellas, la numeración y la clasificación de las tuberías. El material en el que se van a fabricar las tuberías corresponde a acero al carbono ASTM 105, referido con la letra B en la nomenclatura. Para este material, la ratio de presión se cuantificó utilizando la tabla siguiente:

Tabla 15: Rating presión de ASTM 105 (Ehtesham, 2017)

Temperature and Pressure Ratings for ASTM 105 Carbon Steel Flange							
Pressure Class	150	300	400	600	900	1500	2500
PN Number	20	50	68	100	150	250	420
Service Temperature (F)	Maximum Non-Shock Pressure (Psig)						
100	285	740	990	1480	2200	3705	6170
200	260	675	900	1350	2025	3375	5625
300	230	655	875	1315	1970	3280	5470
400	200	635	845	1270	1900	3170	5280
500	170	600	800	1200	1795	2995	4990
600	140	550	730	1095	1640	2735	4560
650	125	535	715	1075	1610	2685	4475
700	110	535	710	1065	1600	2665	4440
750	95	505	670	1010	1510	2520	4200
800	NOT RECOMMENDED ABOVE 800						

Se añade 4 mm de sobre espesor al diseño de las tuberías para que estén preparadas para la corrosión como se marca en las normas ANSI, en la sección B31.3- Tuberías para plantas químicas y refinerías petroleras.

Finalmente se incluye en el nombre de cada tubería el aislamiento térmico si lo hubiese. Dependiendo, si fuese necesario para el proceso que la

temperatura sea muy elevada o demasiado baja, de modo que, se mantenga para conservar calor (-HC) o para protección de los operarios (-PP).

Por ejemplo, tenemos esta tubería 1"-P-115-150B4-PP quiere decir que su diámetro es de 1 pulgada, que contiene un fluido de proceso, P, tiene un rating de 150 siendo el material B y un sobre espesor de 4 mm y que contiene un aislamiento térmico tipo protección personal, PP.

Control del proceso

En el P&ID se incluye un control más detallado y complejo que en el PFD. En este se incluyen principalmente indicadores, transmisores y controladores tanto de presión, temperatura, flujo y otros aspectos y propiedades de las corrientes que intervienen en el proceso. Estos instrumentos se integran de diferentes formas ya que se pueden colocar en campo, los cuales para ver la información que aparece hay que ir al propio instrumento, o con unos transmisores enviar una señal eléctrica de la información a la sala de control.

Dichos transmisores envían la señal eléctrica a unos controladores que interpretando y comparando con un valor de consigna impuesto efectúa una acción en los instrumentos, como en las válvulas de control, para que estos valores se igualen.

También se incluye en este control las alarmas en los controladores que se encargan de avisar si el valor leído por los transmisores es muy superior o inferior al estimado y por consecuencia que el operario a cargo pueda actuar de la forma más rápida y eficiente para solventar el problema.

Valvulería, mantenimiento y seguridad

Finalmente, en el diagrama se insertó toda la instrumentación necesaria directamente en las líneas como válvulas antirretorno, válvulas en mariposa y otros elementos presentes en el diagrama.

Las válvulas de control, son críticas para la operatividad efectiva de la planta, por ello deben funcionar siempre en condiciones de máximo rendimiento, por lo que se cambien muy a menudo y por ello se coloca un bypass, con una válvula de globo que asegura la estanquidad, para que no sea necesario parar la planta cada vez que hay que realizar operaciones de mantenimiento.

Para el mantenimiento y seguridad de la planta en las etapas de compresión se pone en paralelo un compresor igual para que cuando el compresor principal se averíe o se haga una pausa de mantenimiento la planta pueda seguir operando sin problemas.

También para el mantenimiento de líneas y equipos de proceso se instalan drenajes y venteos que permitan retirar fluido. En el caso de que dichos fluidos puedan ser contaminantes o peligrosos se desechan a un drenaje químico (CD) o en su defecto los fluidos que salen de las válvulas de seguridad (PSV) son enviados a una antorcha (FL) asegurando así que lo único que se vierte a la atmósfera es CO₂ y vapor de agua proveniente de la combustión de dichos fluidos.

3.4. Diseño de equipos

En el siguiente apartado se procederá a diseñar algunos de los equipos principales que intervienen en el proceso como un cambiador de calor, el reactor catalítico o la torre de destilación.

El procedimiento por el que se calcula y diseña cada uno de los equipos, por ejemplo, para los intercambiadores de calor, otro para el reactor y otro para la torre de destilación, es el mismo para todas las unidades del mismo tipo.

3.4.1. Diseño del Intercambiador de calor de carcasa y tubos E-103

El intercambiador de calor E-103 es un enfriador intermedio entre el compresor C-103 y el compresor C-104 en la línea de compresión del CO₂ cuya finalidad es enfriar la corriente a la salida del C-103 para que la salida del C-104 no exceda la temperatura límite de diseño mecánico de dicho compresor.

Para realizar esta operación de retirada de calor de la corriente de alimentación se requiere de un fluido refrigerante a un nivel térmico inferior y teniendo en cuenta los servicios generales que tenemos a disposición, se usará agua de refrigeración (Cooling Water, CW).

Dicho servicio general se estima que entra a una temperatura de 25°C y que salga a unos 35°C para que sea posible volver a enfriar en torres de refrigeración de agua a través del fenómeno de enfriamiento evaporativo.

En primer lugar, se calcula la necesidad de CW necesaria para extraer el calor de la corriente de CO₂, para ello se obtiene el duty o necesidades térmicas del intercambiador E-103 en el simulador y se igualan a las del CW en esta expresión:

$$q = \dot{m} \cdot c_p \cdot \Delta T \quad \text{Ecuación 15}$$

Siendo q el duty en kW, m el flujo masico en kg/s, cp la potencia calorífica del fluido, en J/kgK y ΔT es la diferencia de temperatura. Así obtenemos la siguiente tabla:

Tabla 16: Resumen de corrientes del intercambiador E-103

	CO ₂	CW
T entrada (°C)	145	25
T salida (°C)	60	35
Duty (kW)	-87,21	87,21
Flujo másico (kg/s)	0,98	2,09

Para el dimensionado del cambiador de calor, se van a seguir las indicaciones marcadas por el *“Coulson and Richardson’s chemical engineering: volumen 1B: heat and mass transfer: fundamentals and applications”* (‘Heat Transfer’, 2018), complementado por estándares del código TEMA (Tubular Exchangers Manufacturer’s Association).

Para realizar el cálculo del área necesaria para el intercambio de calor y así dimensionar el propio cambiador se usará la siguiente ecuación:

$$q = U \cdot A \cdot F \cdot \Delta T_{ln} \quad \text{Ecuación 16}$$

Siendo q el duty en kW, U el coeficiente global de transferencia de calor en W/m²°C, F es el factor de correlación para cambiadores de varios pasos y ΔT_{ln} es la media logarítmica de temperaturas en °C.

La temperatura media logarítmica se calcula de la siguiente forma

$$\Delta T_{ln} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} \quad \text{Ecuación 17}$$

Siendo dichos incrementos de temperatura los correspondientes a cada uno de los lados del intercambiador de calor.

Como en este caso de intercambiador de calor solo se usa con un único paso del fluido por los tubos no es necesario el factor de correlación F y el valor de este es 1.

Para el coeficiente global de transferencia de calor, U, se supone siguiendo unas tablas que aparecen en el Coulson en las que en función de los fluidos presentes en cambiador se estima un valor de U distinto. En este caso los fluidos que intervienen son un gas, CO₂, y agua que el valor de U para este caso oscila entre 20-300 W/m²°C, para la primera estimación suponemos 300 W/m²°C así se consigue minimizar el área de intercambio y a su vez minimizar el coste del propio cambiador.

Tabla 17: Área de transferencia de calor

U (W/m ² °C)	300
ΔTm (°C)	104
A (m ²)	2,8

A partir de este valor del área comenzamos el proceso de diseño del cambiador por dimensionar la longitud y diámetro de los tubos usando unos valores estándar presentes también en el Coulson.

Para el dimensionado se dispone que el flujo de CO₂ vaya por los tubos y el agua de refrigeración por la carcasa ya que los gases están a una mayor presión muy elevada y esto hace que haya que poner un espesor mayor a los tubos que es más económico que poner un mayor espesor a la carcasa.

Para elegir bien el tamaño de los tubos hay que tener en cuenta la velocidad del fluido por los tubos, la caída de presión que se ocasiona y la cantidad de tubos requerido.

Una vez elegido las dimensiones de los tubos ahora se dimensiona la carcasa teniendo en cuenta la distancia entre los deflectores internos del cambiador, la velocidad del fluido por la carcasa y la disposición de los tubos en la bancada.

Tabla 18: Resumen dimensiones del cambiador. Todas las dimensiones en metros

Tubos		Carcasa	
Longitud	1,83	Diametro de bancada	0,141
Diametro externo	0,016	Diametro de carcasa	0,176
Diametro interno	0,012	Espacio entre placas	0,070
Espesor	0,002	Corte de placas	25%
Número de tubos	30		

La utilización de todas estas dimensiones se justifica en el ANEXO II. Cálculos.

Seguidamente, se toman los valores de las propiedades físicas de ambos fluidos en las condiciones a la entrada y a la salida del cambiador y se calcula un promedio de ellas, para obtener el coeficiente de transmisión de calor individual en los tubos y en la carcasa a partir de las correlaciones presentes en el Coulson.

Para el interior de los tubos la correlación empleada es la siguiente:

$$Nu = \frac{h_i \cdot d_i}{k_l} = 0,021 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^{0,3} \quad \text{Ecuación 18}$$

Donde Un es el número de Nusselt, Re es el número de Reynolds y Pr el número de Prandtl, que son tres números adimensionales, h_i es el coeficiente de

transmisión de calor en el interior de los tubos en $W/m^2\text{°C}$, d_i es el diámetro interno de los tubos en m y k_l es la conductividad térmica de la corriente en $W/m\text{°C}$.

Para el exterior de los tubos, es decir, por la carcasa se usa el método Kern que usa la siguiente correlación:

$$Nu = \frac{h_o \cdot d_e}{k_l} = j_h \cdot Re \cdot Pr^{0,33} \quad \text{Ecuación 19}$$

Donde j_h es un factor de transmisión de calor dependiente del número de Reynolds y del corte de las placas deflectoras, que se obtiene a partir de una gráfica, h_o es el coeficiente de transmisión de calor por el exterior de los tubos en $W/m^2\text{°C}$, d_e es el diámetro hidráulico equivalente de la zona de la carcasa.

Tabla 19: Coeficientes individuales de transmisión de calor

	Tubos	Carcasa
Reynolds	195253	10737
Prandtl	0,84	6,14
Nusselt	341	197
Coefficientes individuales ($W/m^2\text{°C}$)	608	10494

Finalmente, una vez calculados los coeficientes individuales se procede a obtener el coeficiente global del cambiador de calor con la siguiente fórmula:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_i} + \frac{d_o \cdot \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2 \cdot k_w} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_{id}} \quad \text{Ecuación 20}$$

Siendo d_o el diámetro externo de los tubos en m, k_w la conductividad térmica del acero al carbono que es de $50 W/m\text{°C}$, h_{od} que es el coeficiente de ensuciamiento por el exterior de los tubos en $W/m^2\text{°C}$ y h_{id} que es el coeficiente de ensuciamiento de los tubos por el exterior en $W/m^2\text{°C}$.

El valor del coeficiente obtenido es de $371 W/m^2\text{°C}$, que es superior al estimado inicialmente que era $300 W/m^2\text{°C}$, por lo que de momento se puede dar por válido el diseño del intercambiador de calor, pero ahora hay que ver si cumple las especificaciones de pérdida de carga. El valor típico para estos cambiadores es de 35 kPa para líquidos y de $0,1 \cdot P_{relativa} = 200 \text{ kPa}$ del sistema para gases de alta presión.

Para ver si cumplen dentro de los tubos se calcula de la siguiente forma:



$$(-\Delta P) = N_p \left[8 \cdot j_f \cdot \frac{L}{d_i} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{-0,14} + 2,5 \right] \cdot \frac{\rho \cdot u_t^2}{2} \quad \text{Ecuación 21}$$

Siendo $(-\Delta P)$ la pérdida de carga en Pa, N_p es el número de pases del fluido por los tubos, j_f es el factor de fricción, L es la longitud de los tubos en m, μ es la viscosidad del fluido que va por los tubos en Pa·s, μ_w es la viscosidad del agua en Pa·s, ρ es la densidad del fluido en kg/m³ y u_t es la velocidad del fluido en los tubos en m/s.

Por el lado de la carcasa la ecuación usada es la siguiente:

$$(-\Delta P) = 8 \cdot j_f \cdot \left(\frac{d_s}{d_e} \right) \cdot \frac{L}{l_b} \cdot \frac{\rho \cdot u_c^2}{2} \quad \text{Ecuación 22}$$

Siendo d_s el diámetro de la carcasa en m, l_b el espacio entre placas deflectoras en m y u_c la velocidad del fluido por la carcasa en m/s.

Como ambas pérdidas de carga son menores que las máximas de 35kPa para líquidos y 200 kPa para gases de alta presión se puede dar por válido el diseño.

Todos los cálculos y tablas usados estarán en el [ANEXO II. Cálculos](#).

Finalmente, los valores de caída de presión y el coeficiente global de transferencia de calor calculados del cambiador se muestran en la siguiente tabla resumen:

Tabla 20: Resumen diseño E-103

Pérdida de carga tubos (Pa)	6388,2
Pérdida de carga carcasa (Pa)	4611,4
Coeficiente global (W/m ² °C)	371

3.4.2. Diseño de torre de destilación T-101

Para el diseño de las especificaciones de la columna de destilación T-101 se utilizó las herramientas de diseño del programa de simulación ASPEN PLUS V12.

En primer lugar, se utilizó el bloque DSTWU modela la torre de destilación con el método “shortcut” que consisten en un diseño preliminar de la torre.

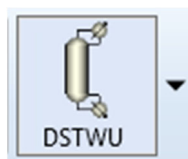


Figura 29: Bloque DSTWU de ASPEN PLUS V12

Este modelo calcula los parámetros necesarios para el diseño de la torre como por ejemplo la relación de reflujo mínimo, el número mínimo de platos, el plato de alimentación, las temperaturas del condensador y ebullición, etc...

▶	Minimum reflux ratio	0,558319	
▶	Actual reflux ratio	0,669983	
▶	Minimum number of stages	10,3032	
▶	Number of actual stages	25,4328	
▶	Feed stage	17,3913	
▶	Number of actual stages above feed	16,3913	
▶	Reboiler heating required	478807	cal/sec
▶	Condenser cooling required	251847	cal/sec
▶	Distillate temperature	58,9766	C
▶	Bottom temperature	99,3593	C
▶	Distillate to feed fraction	0,552579	
▶	HETP		

Figura 30: Datos obtenidos por el modelo FUG

Una vez ya obtenidos los datos preliminares se utilizará el bloque de RadFrac que utiliza un modelo riguroso de cálculo en el que inicialmente se implementarán los datos del modelo anterior.



Figura 31: Bloque RadFrac de ASPEN PLUS V12

Configuration	Streams	Pressure	Condenser	Reboiler	3-Phase	Comments
Setup options						
Calculation type	Equilibrium					
Number of stages	25					Stage Wizard
Condenser	Partial-Vapor-Liquid					
Reboiler	Kettle					
Valid phases	Vapor-Liquid					
Convergence	Standard					
Operating specifications						
Reflux ratio	Mole	0,67				
Distillate to feed ratio	Mole	0,5				

Figura 32: Primera configuración de torre de destilación

En esta pestaña que se muestra en la Figura 37 se eligen opciones como el número de platos, el tipo de condensador que es parcial con salida de vapor (la razón de su uso se explicó en el apartado de [3.2.4 Sección de Separación](#)), o el tipo de ebullidor, al igual que las fases que van a intervenir en la torre, que en este caso son líquido y vapor, y algunos datos como la relación de reflujo y la relación de destilado alimentación obtenidas del método “shortcut”.

En la siguiente pestaña se define la etapa de alimentación y las etapas de salida de las corrientes de productos y subproductos:

Feed streams			
Name	Stage	Convention	
▶ 16	17	Above-Stage	

Product streams				
Name	Stage	Phase	Basis	
▶ 17	1	Vapor	Mole	
▶ MEOH	1	Liquid	Mole	
▶ WATER	25	Liquid	Mole	

Figura 33: Etapa de alimentación y corrientes de producto

Para elegir bien la etapa de alimentación de la torre se recurre al gráfico de composiciones dentro de la torre en la que se muestra la composición en cada plato y con la composición de la alimentación se elige el plato en el que es mejor alimentar. Esto se puede ver en la siguiente figura:

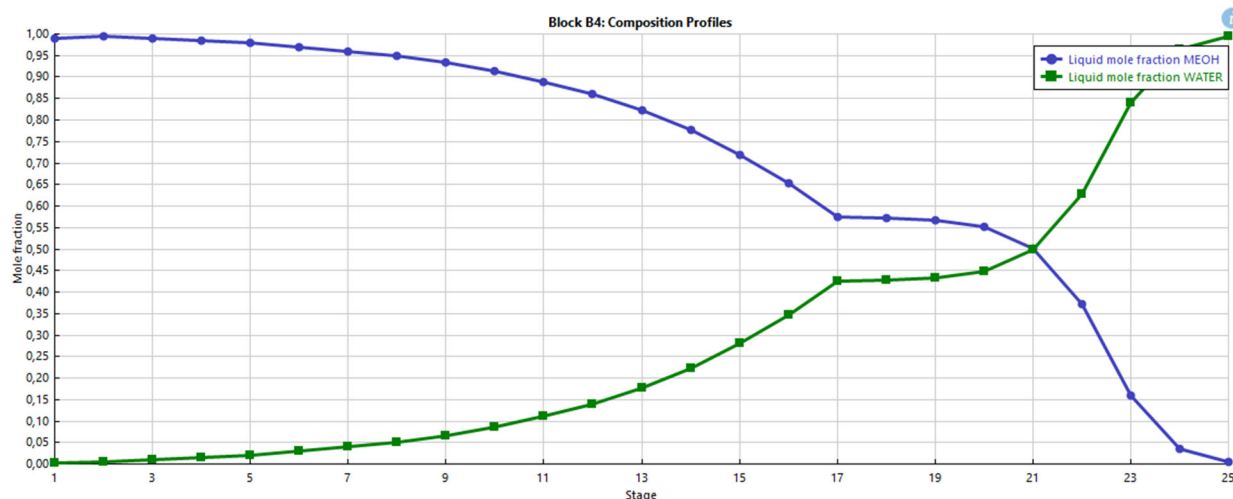


Figura 34: Primer gráfico de composición por etapa de la torre de destilación T-101

Una vez vista la composición de la alimentación y cambiado el plato en el que se alimenta se obtiene que, la etapa más conveniente es la número 21. En el nuevo gráfico (figura 35) se muestra la mejor eficiencia de la torre ya que en cada plato hay un cambio mayor de la concentración.

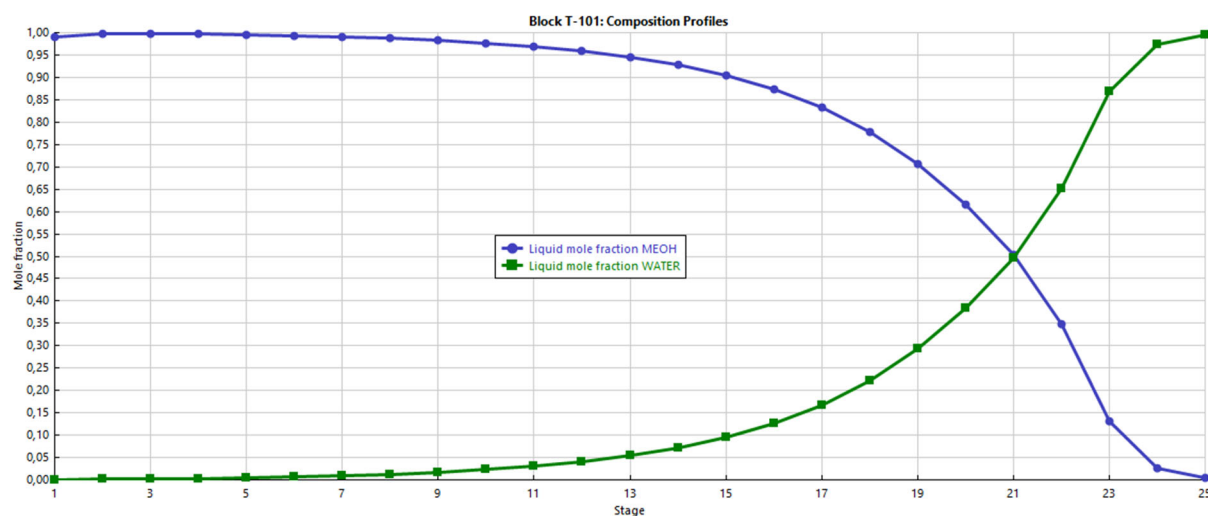


Figura 35: Gráfico de composición con la etapa de alimentación correcta de la torre de destilación T-101

Y en las siguientes pestañas se define la presión de operación de la torre y la temperatura a la que opera el condensador parcial de la torre que como antes están explicadas en el apartado [3.2.4 Sección de Separación](#).

Aún con estas modificaciones en el modelo riguroso de la torre la composición de MeOH a la salida de la torre no llega a ser la deseada, que es del 99%, y por eso en ASPEN implementa la inclusión de especificaciones de diseño en las que variando algún parámetro se puede llegar a obtener la especificación deseada. Por ello se incluye una condición en el diseño que la pureza del MeOH

sea del 99% variando la relación de reflujo en la torre que aumentará un poco el coste.

Primary specifications

Reflux ratio: Mole, 0,67 [Feed Basis]

Distillate to feed ratio: Mole, 0,5

Free water reflux ratio: 0

Additional specifications

ID	Active	Description	Type	Units	Target Value	Calculated Value	Error	Status
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Purity	Mole purity		0,99	0,99	-1,48321e-08	

Adjusted variables

ID	Active	Description	Type	Units	Lower Bound	Upper Bound	Calculated Value	Status
1	<input checked="" type="checkbox"/>	RR	Molar Reflux Ratio		0,5	5	1,26038	

Figura 36: Resumen de especificación de operación

Para el estudio del número de etapas más adecuado para el proceso se realizará a partir de un estudio económico basándose en que a mayor número de etapas la separación es más fácil pero la torre será más grande y tendrá un coste de capital más elevado, sin embargo, el reflujo necesario será menor por lo que se necesitará menos energía en el ebullición para evaporarlo y con ello el valor del coste de operación se reducirá. Para realizar dicho estudio se utilizará el ASPEN PLUS V12 ya que tiene una librería de precios.

Para encontrar el punto óptimo entre número de etapas y coste del equipo se realiza una evaluación del coste del equipo a los 20 años de funcionamiento, sumando el coste de capital (CAPEX) y el coste de operación (OPEX) en los 20 años de funcionamiento, todo en función del número de etapas. Todos los datos están en el [ANEXO II. Cálculos](#). El resultado es el siguiente:

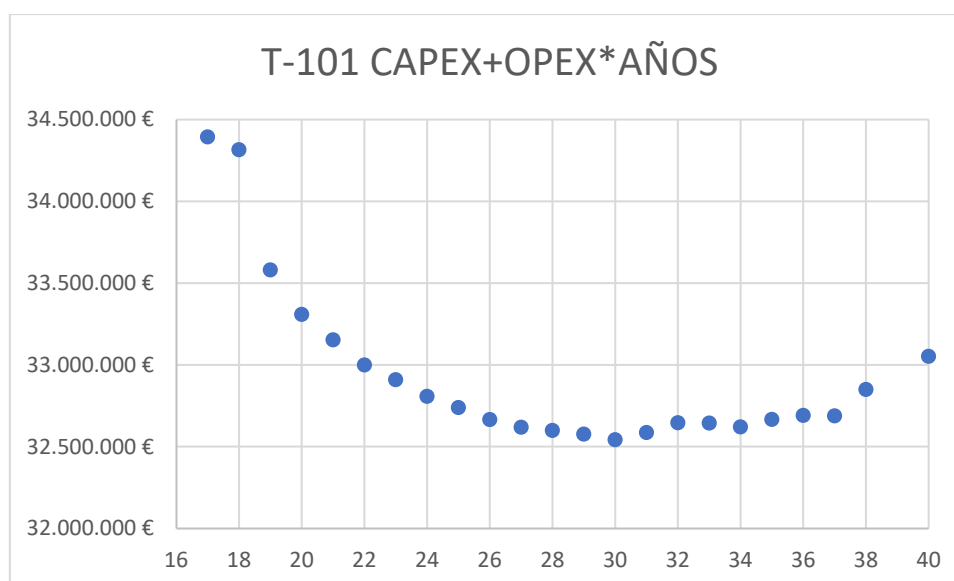


Figura 37: Selección de número de etapas de T-101

Como se puede ver en la figura 37, la gráfica tiene un mínimo por lo que el número de etapas más rentable a lo largo de los años, es de 30 etapas en la torre.

Tabla 21: Resumen de la torre de destilación T-101

	T-101
RR	0,843
Etapas de alimentación	25
Número de etapas	30
Coste de la instalación (€)	2.766.940
Coste de operación (€/año)	1.488.750
Coste a 20 años (€)	32.541.940

Una vez que el número de platos en la columna ya está definido se continúa con el diseño mecánico del interior de la torre y esto también se va a realizar con el ASPEN PLUS V12 ya que tiene una opción llamada “Column Internals” en la que calcula el diseño mecánico de la torre en función de la carga en los platos o si se produce otros fenómenos.

En primer lugar, se generan los datos hidráulicos de la torre y a continuación se divide la torre en dos secciones, la primera se llama de enriquecimiento, por encima de la alimentación, es decir del plato 2 al 24 y la segunda, la sección de agotamiento, del plato 25 al 39.

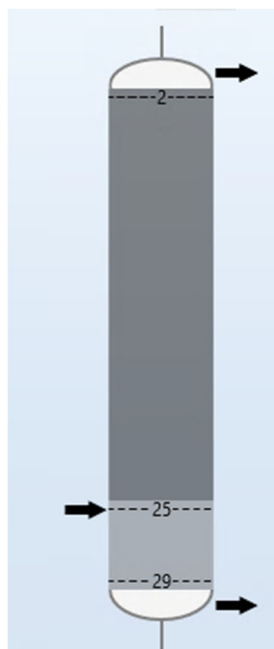


Figura 38: Secciones de la torre de destilación T-101

Los platos elegidos para la torre son platos agujereados tipo SIVE. Para estos platos la configuración calculada por el programa es la siguiente:

Tabla 22: Resumen de diseño mecánico de torre de destilación T-101

	Enriquecimiento	Agotamiento
Diámetro de columna (m)	0,861	0,861
Espacio entre platos (m)	1	0,5
Número de agujeros por plato	424	368
Diámetro de agujeros (mm)	12,7	12,7
Anchura de downcomer (mm)	70	134,8
Anchura de presa (mm)	470	625
Altura de presa (mm)	250	50
Distancia entre downcomer y plato (mm)	237,3	38,1

Para comprobar que los platos no sufren ningún problema se comprueba en la sección que proporciona ASPEN llamada “Hydraulic plot” en la que a través de unos diagramas de cada plato muestra los flujos de líquido y vapor que atraviesan cada plato al igual que el punto de operación. Para que el plato no esté en problemas el punto de operación debe de estar dentro de un área encerrada entre unas líneas que muestran cada problema que puede haber en dicho plato desde inundación, jet flood y otros problemas. Este diagrama es como el que se encuentra en la figura de abajo:

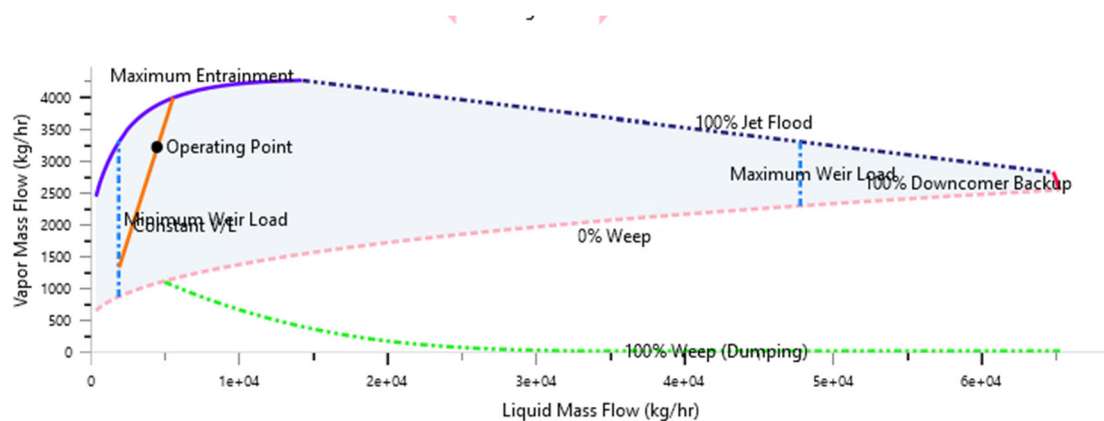


Figura 39: Diagrama del plato 27

3.4.3. Diseño de reactor R-101

En el apartado [3.2.3 Sección de Reacción](#) se realizó un análisis en el que se decidió que el R-101 sería un reactor catalítico de flujo de pistón, multitubular y de lecho fijo poroso. En este diseño con la ayuda del programa ASPEN PLUS V12 se calculará: las dimensiones de los tubos, el número de tubos, la pérdida de carga y la transmisión de calor.

En primer lugar, se añade el bloque de ASPEN de RPiston que concuerda con el modelo del reactor multi tubular:

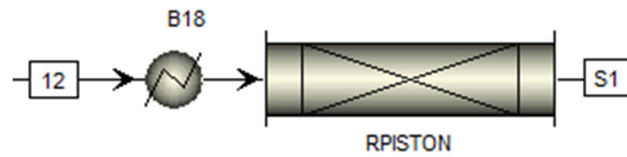
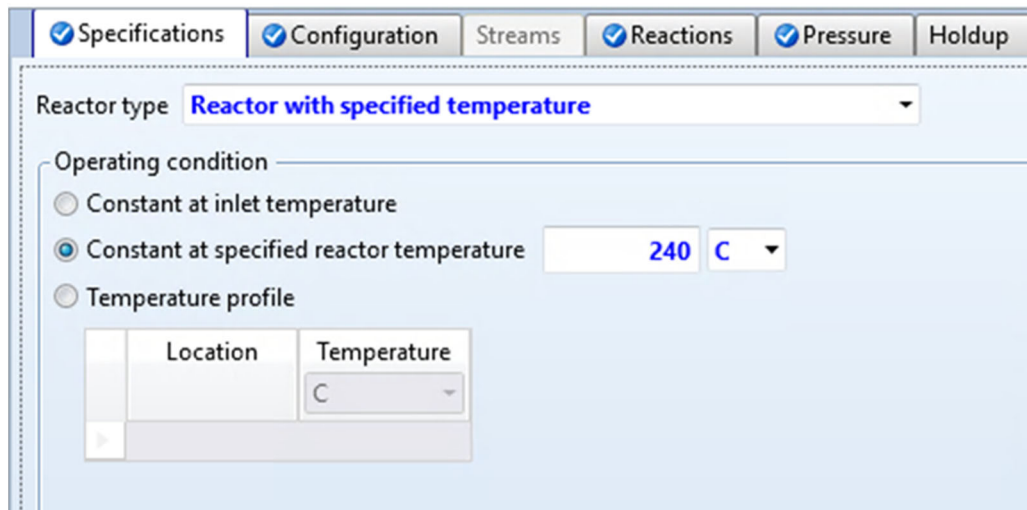


Figura 40: Modelos de ASPEN de Reactor multitubular

Posteriormente, se introducen las condiciones de operación del reactor, comenzando por elegir que el reactor opera isotérmicamente a 240°C para realizar el diseño mecánico y a continuación, calcular el coeficiente de transferencia de calor.



Reactor type: **Reactor with specified temperature**

Operating condition:

- Constant at inlet temperature
- Constant at specified reactor temperature **240 C**
- Temperature profile

Location	Temperature
	C

Figura 41: Especificación de temperatura

Seguidamente, introducimos los valores de la presión de operación y para la caída de presión en el equipo se elige la expresión de Ergun que ofrece ASPEN.

Figura 42: Especificaciones de presión

Finalmente se especifica la densidad de partícula y la porosidad del lecho en el reactor. (Van-Dal & Bouallou, 2013a)

Figura 43: Especificación del catalizador

Para comenzar el diseño mecánico del reactor se comienza añadiendo una “Desing spec” o especificación de diseño en la que varía la longitud de los tubos del reactor para conseguir un tiempo de residencia constante. Dicho tiempo de residencia en el reactor se calcula previamente con el programa para llegar a una conversión de las materias primas del 30%.

Design specification expressions	
Spec	TR
Target	0,5761
Tolerance	0,01

Manipulated variable		Type	
Type	Block-Var	Type	Block-Var
Block:	RPISTON	Block:	RPISTON
Variable:	LENGTH	Variable:	RES-TIME
Sentence:	PARAM	Sentence:	PARAM
Units:	meter	Units:	min

Figura 44: Entrada de especificación de diseño

Haciendo que el tiempo de residencia permanezca constante se consigue que el volumen total del reactor permanezca constante y gracias a esto, aunque se varíe el número de tubos o el diámetro de los tubos el programa calculará la longitud necesaria para que el volumen total del reactor continúe siendo el mismo.

Para el cálculo de las siguientes variables, se introducirán unos valores de diámetros de tubos estandarizados, a continuación, se realiza un análisis de sensibilidad en el que variando el número de tubos en el reactor calcule la caída de presión del sistema. Todos los valores están en el ANEXO II. Cálculos

Una vez se realizan todos estos cálculos se obtiene la siguiente figura:

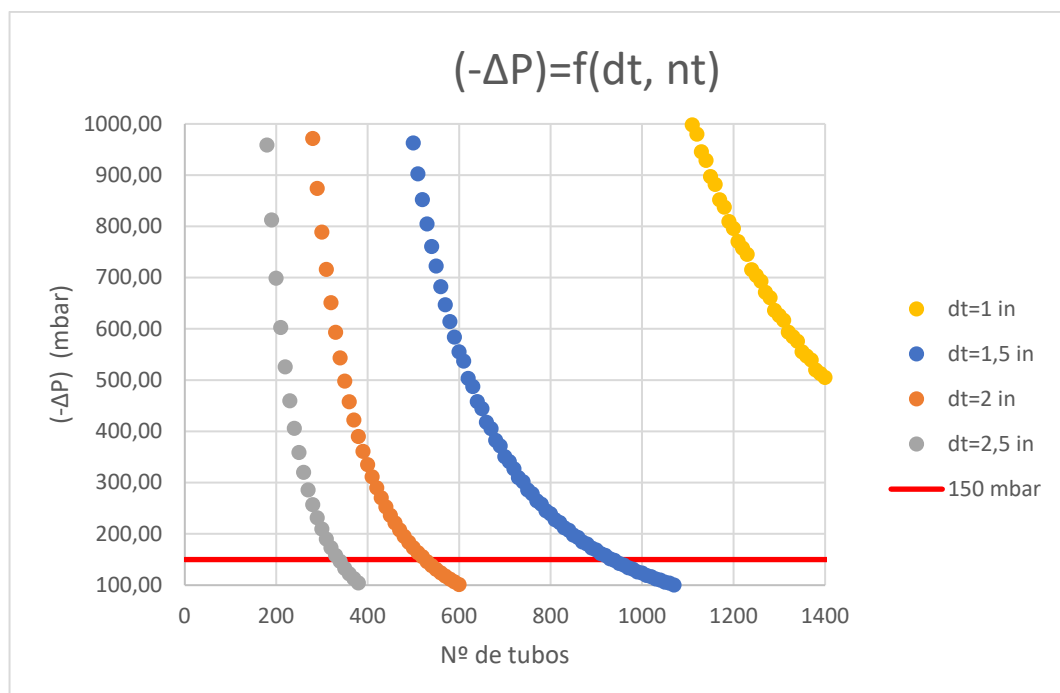


Figura 45: Pérdida de carga en función de diámetro y número de tubos

Para elegir el número de tubos y diámetro finales se fijan 150 mbar de pérdida de carga y se obtienen las siguientes posibilidades:

Tabla 23: Dimensiones del reactor

dt (in)	Nº tubos	(-ΔP) (mbar)	L (m)
1	-	-	-
1,5	940	148,00	11,05
2	530	145,49	10,90
2,5	340	146,33	11,02

Una vez calculado las dimensiones del reactor se procede a calcular el coeficiente de transferencia de calor de estas posibles dimensiones del reactor.

En el análisis preliminar se propone que el reactor opere de forma isotérmica, lo que quiere decir que la temperatura permanece constante, pero la reacción principal es exotérmica, por lo que libera energía al reaccionar, por todo esto se necesita un sistema de refrigeración en el reactor.

Debido a que se libera una gran cantidad de energía se puede aprovechar para generar vapor de agua para su uso en otras operaciones de calefacción. También es buena opción ya que cuando un líquido se está evaporando su temperatura permanece constante y esto hace que la operación en el reactor permanezca isotérmica. Para refrigerar se usará agua líquida a 230°C y 28 bara.

3.5. Integración energética

Hasta el momento, el diseño del proceso desde la simulación en ASPENPLUS V12 como los diagramas del proceso se han usando los servicios generales que se utilizan por defecto. Siendo éstos los más comunes en la industria química.

Sin embargo, el ahorro energético es algo primordial en los procesos químicos tanto por la reducción de la contaminación como por el importante ahorro monetario ya que el precio de la energía es muy elevado.

Por todo ello, se va a realizar un estudio que proponga una red de intercambio de calor que consuma la mínima energía de refrigeración y la mínima energía de calefacción, usando herramientas como la metodología Pinch y las redes MER.

En primer lugar, usando el diagrama de flujo y los valores de los consumos de energía en los diferentes cambiadores, que usan servicios generales como el

agua de refrigeración o vapor para calentar, se van a recopilar en una tabla para conocer cuál es la posibilidad de ahorro energético.

Tabla 24: Corrientes frías del proceso

Corriente Frías	Te (°C)	Ts (°C)	Duty (kW)	mcp (kW/°C)
E-105	152	240	856,47	9,73264418
E-107	25	152	885,03	6,96877636
E-109	103	103	1897,36	INF

Tabla 25: Corrientes calientes del proceso

Corrientes Calientes	Te (°C)	Ts (°C)	Duty (kW)	mcp (kW/°C)
E-101	114	50	-58,053	0,90707813
E-102	144	50	-88,72	0,94342517
E-103	145	50	-87,22	0,91731071
E-104	87	80	-10,97	1,67184726
E-106	240	25	-3439,97	15,9998663
E-108	30	30	-1687,00	INF

A partir de estas tablas, se introducen los datos en una aplicación web de la escuela de ingeniería industriales, (*Heat Integration*, n.d.), que elabora los cálculos necesarios para llegar a las gráficas conocidas como “Curvas compuestas”. Dichas curvas se representan con una línea que se corresponde con las corrientes frías (línea azul) y otra con las calientes (línea roja) donde se representa la temperatura en función de las necesidades térmicas, o “Duty”. Estas curvas son muy útiles ya que nos acercan ambas corrientes hasta una diferencia de temperatura mínima que se pueden intercambiar en un cambiador, en este caso 10°C, este punto se conoce como “Pinch”.

Gracias a estas curvas se llega a las necesidades térmicas mínimas que necesita el proceso para poder operar.

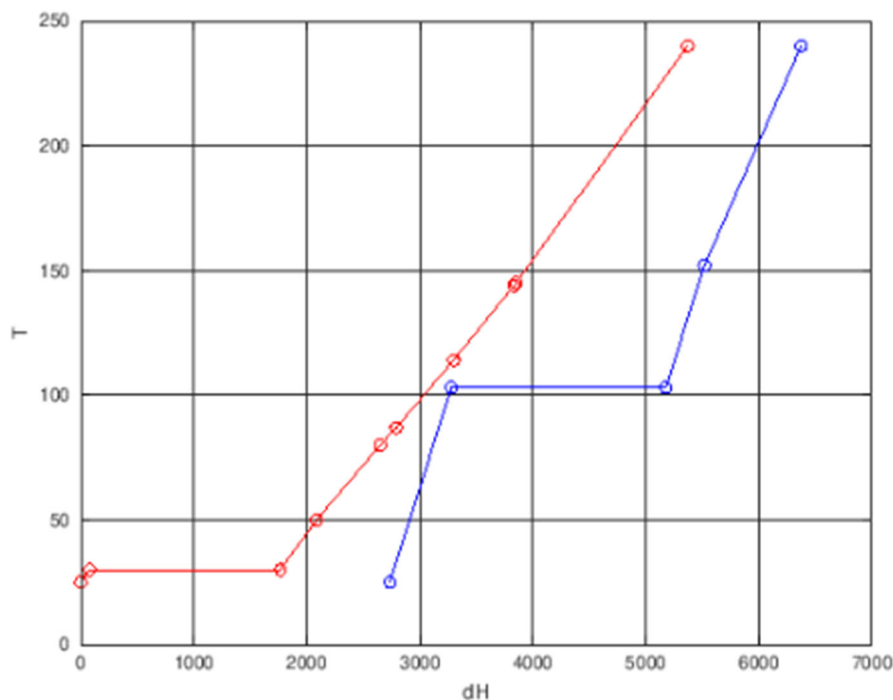


Figura 46: Curvas compuestas del proceso

Conociendo los valores de calefacción y refrigeración mínimos se puede conocer cuánto será el ahorro energético una vez implementada la integración energética.

Tabla 26: Ahorro de calefacción y refrigeración en el proceso

	Calefacción	Refrigeración
Energía utilizada (kW)	3638,9	5371,9
Energía mínima (kW)	1003,8	2736,8
Exceso (kW)	2635,1	2635,1
Ahorro (%)	72	49

Los valores de refrigeración y calefacción utilizados se obtienen de la suma de los valores de las tablas 23 y 24.

La capacidad de ahorro energético en el proceso es muy elevada, por lo que se llevará a cabo una red de intercambiadores de calor enfrentando en los mismos, las diferentes corrientes de proceso y terminando de enfriar o calentar con distintos servicios generales, o utilities.

Para la elección de los servicios generales más adecuado para el proceso, hay que tener en cuenta el nivel térmico de las corrientes a calentar o enfriar. Para ello se va a realizar con la misma aplicación web que representa otro gráfico llamado “Gran curva compuesta” que se muestra posteriormente.

La línea de color rojo representa las corrientes de proceso, y el punto con entalpia 0 representa el Pinch y la línea azul representa los servicios generales, que se colocan en el diagrama, en la parte superior la calefacción, completando el hueco con el duty necesario para tapan la línea roja siempre por encima de la misma y de la misma forma se realiza para la refrigeración, pero en este caso por debajo de la línea roja. Como se muestra en la siguiente figura:

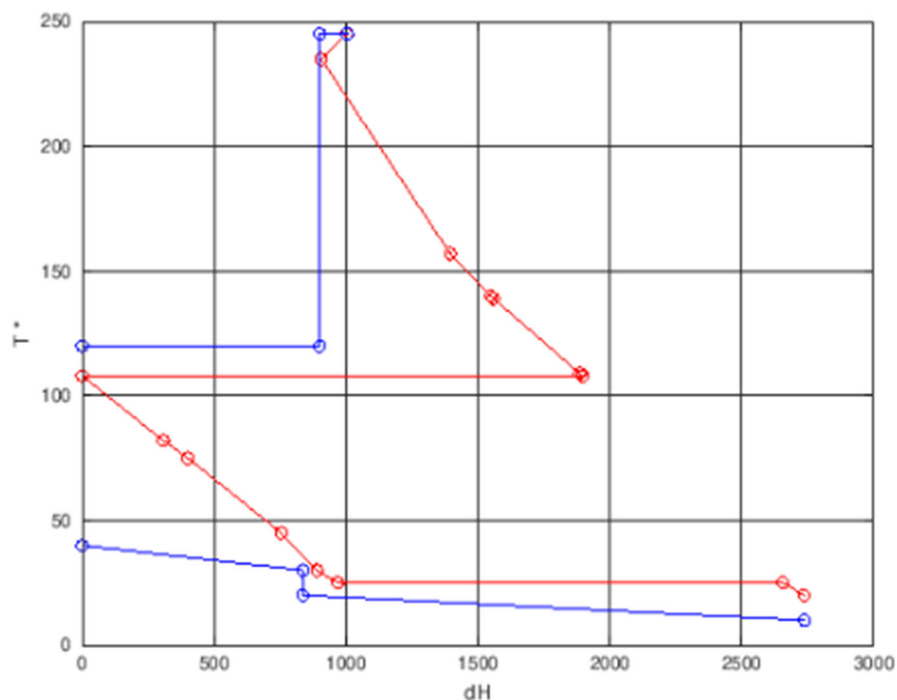


Figura 47: Gran curva compuesta

También para ver los niveles térmicos se pueden usar las curvas compuestas añadiendo a las corrientes de proceso los servicios generales de esta forma:

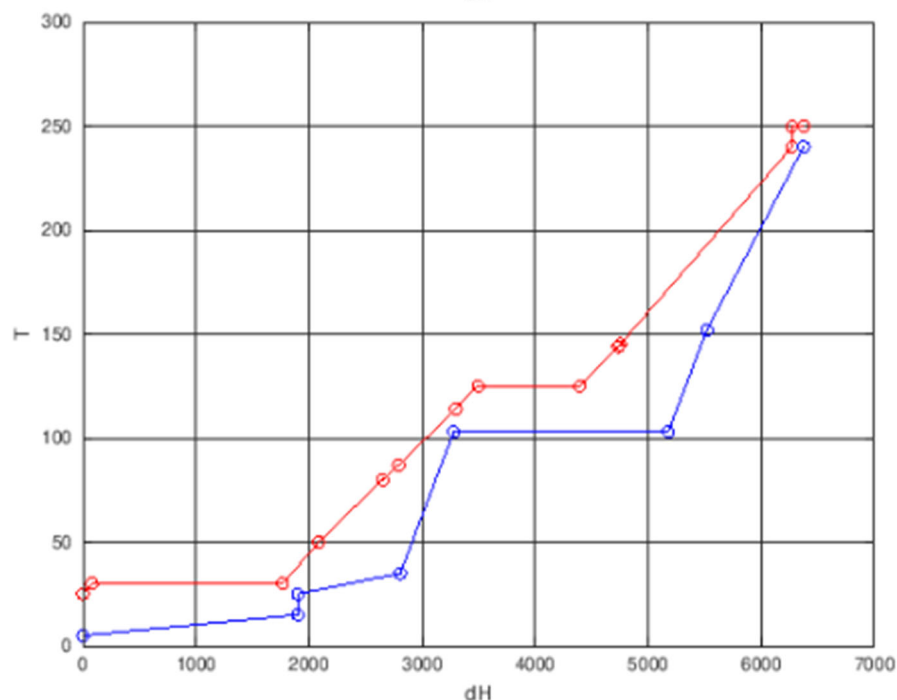


Figura 48: Curvas compuesta con los servicios generales

Los servicios generales que se van a utilizar son los siguientes:

Tabla 27: Servicios generales

Utilities	Te (°C)	Ts (°C)	Duty (kW)	mcp (kW/°C)
HPS	250	250	-103,8	INF
LPS	125	125	-900,7	INF
CW	25	35	836,8	83,68
CCW	5	15	1900	190

Como se puede comprobar si se suma las necesidades térmicas de la refrigeración como de la calefacción resulta ser las mismas que las necesidades mínimas antes definidas. La elección de estos servicios generales se hace desde el punto de vista técnico. Sin tener en cuenta los costes de los mismos.

Se comienza con la calefacción que comprende los vapores de alta presión y baja presión, HPS y LPS respectivamente. Para la calefacción se ha elegido el uso de vapores saturados ya que con el mismo flujo másico la energía que liberan al condensarse es mucho mayor que la energía común liberada en un fluido cambiando de temperatura. El vapor saturado de mayor nivel térmico tiene un coste más elevado y es energéticamente menos denso, en comparación al vapor saturado de menor nivel térmico, y por ello

se precisa un mayor flujo, como se indica en las curvas de presión entalpia de un fluido:

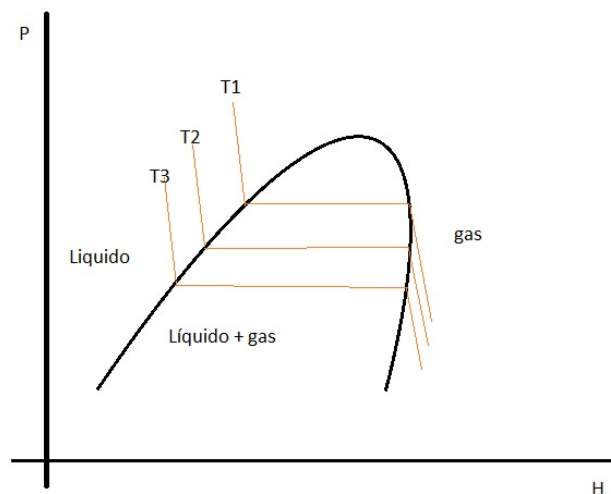


Figura 49: Diagrama Presión-Entalpia

(Diagrama Presión Entalpia | EFICIENCIA ENERGÉTICA Y UTOPÍA, n.d.)

Por todo lo anterior, al vapor de mayor nivel térmico, HPS, se le pone el menor duty posible y para el resto se utiliza un vapor de baja presión.

Con respecto a la refrigeración se va a usar agua de refrigeración y agua subenfriada, CW y CCW respectivamente, donde el agua de refrigeración consiste en agua que se calienta para enfriar otra corriente, pero debido a que el método de volverla a enfriar se lleva a cabo mediante el principio de enfriamiento evaporativo la diferencia de temperatura no puede ser mayor a unos 10°C dependiendo de las condiciones atmosféricas.

El agua subenfriada es necesaria ya que el nivel térmico más bajo en el proceso es de 25°C, por esto el agua de refrigeración no es suficiente ya que mediante el principio de enfriamiento evaporativo que se usa para enfriar dicho servicio general no es posible bajar de la temperatura ambiente por lo que será necesario añadir un circuito de enfriamiento usando un refrigerante como el R-124 (freón) para poder bajar a una temperatura de unos 5°C.

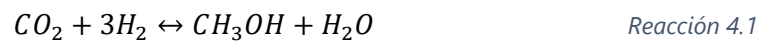
Para la red de intercambiadores de calor se realizó el diagrama en el que se muestra las corrientes de proceso y los servicios generales y los cambiadores, con su duty, necesarios para llevar a cabo la integración energética. Dicho diagrama está en [ANEXO I. Diagramas del proceso](#)



4. BALANCE ECONÓMICO

4.1. Potencial económico

Para plantear si un proceso es viable se realiza un estudio preliminar en el que se valora el potencial económico de una reacción que en este caso es la de hidrogenación catalítica del CO₂:



Como se puede observar la relación estequiométrica de las materias primas es de 1:3 (CO₂:H₂) por lo que se necesitan tres moles de hidrógeno por cada uno de dióxido de carbono para producir un mol de producto, MeOH.

Los precios de mercado de materias primas como de producto se obtuvieron de la página web “ChemAnalyst”(Chemical Price Analysis, Chemical Latest Prices | ChemAnalyst, n.d.), tomando los precios de Estados Unidos en el último cuarto del año 2023, los precios pueden haber variado desde el día de consulta de la web.

Tabla 28: Potencial económico

	Reactivos		Producto
	CO2	H2	MeOH
Estequiometria	1	3	1
Peso molecular (kg/kmol)	44,01	2,016	32,04
Precio unitario (€/kg)	0,67	4,83	0,575
Coste (€)	29,4867	29,21184	18,423
Beneficio por kmol introducido (€/kmol)			-40,28

En la tabla anterior se puede comprobar que en un principio el proyecto no sería rentable ya que el beneficio es de -40,28€, pero hay que tener en cuenta que el precio del CO₂ se puede desestimar ya que se utilizará CO₂ capturado por lo que la tabla quedará de la siguiente forma:

Tabla 29: Potencial económico sin el precio del CO₂

	Reactivos		Producto
	CO2	H2	MeOH
Estequiometria	1	3	1
Peso molecular (kg/kmol)	44,01	2,016	32,04
Precio unitario (€/kg)	0	4,83	0,575
Coste (€)	0	29,21	18,42
Beneficio por kmol introducido (€/kmol)			-10,79

Aun quitando el coste asociado al CO₂ el proyecto no será rentable por lo que se hará un estudio económico para conocer cual ha de ser el precio del H₂ o del MeOH para que el proyecto sea rentable.

4.2. Análisis económico del proyecto

El potencial económico calculado antes no es el real, ya que no se tienen en cuenta los costes asociados a la inversión en equipos, CAPEX, ni los costes de operación de la planta, OPEX. Por lo que a continuación se realiza el análisis teniendo en cuenta dichos costes y se calcula el precio que debe tener el H₂ o el MeOH para que el proyecto sea rentable. En este análisis económico no se tiene en cuenta la posible integración energética ya que se deja para fases posteriores del proyecto.

Para realizar este estudio se usa la herramienta de evaluación económica del programa ASPEN PLUS V12 utilizando los precios de las materias primas expuestos anteriormente en la Tabla 28. Para ello se requiere hacer un mapeado de los equipos que intervienen en el proceso y la definición del tipo de equipo que son, en siguiente lugar el programa hará un cálculo de las dimensiones de los mismos y finalmente evaluará el coste de los equipos, los costes de instalación y de los costes de operación.

Tabla 30: Evaluación económica de ASPEN

Total Capital Cost [USD]	14.313.800
Total Operating Cost [USD/Year]	22.993.600
Total Raw Materials Cost [USD/Year]	17.543.100
Total Product Sales [USD/Year]	10.880.100
Total Utilities Cost [USD/Year]	1.355.820
Desired Rate of Return [Percent/Year]	20
P.O. Period [Year]	0
Equipment Cost [USD]	206.000
Total Installed Cost [USD]	439.600

Al igual que en el potencial económico se puede observar que el gasto en las materias primas más el coste de operación supera enormemente a los beneficios de venta del producto en un año haciendo así que el beneficio sea negativo.

Para que se vea la evolución de la rentabilidad del proyecto a lo largo de los 20 años que va a estar la planta operando, se representará el flujo de caja junto al valor actual neto, VAN, que es un indicador económico que valora si un proyecto es rentable o no.

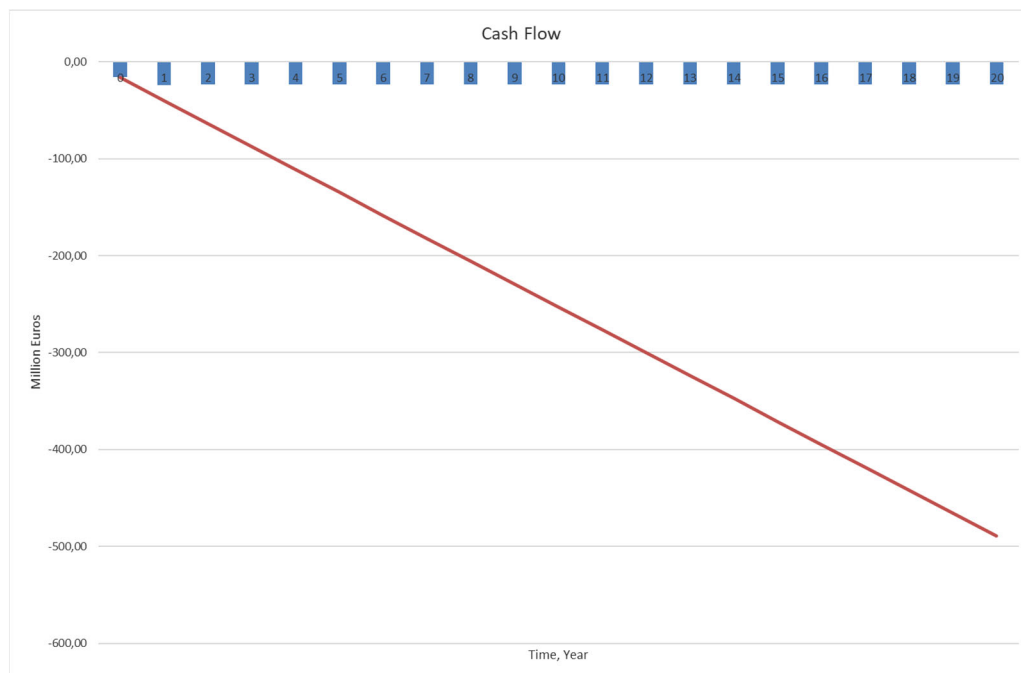


Figura 50: Cash Flow del proyecto

Como se puede ver en la imagen anterior el VAN es de -395MM€, que es negativo, y esto indica que no es una buena inversión ya que para que la inversión sea buena el VAN debe tener un valor positivo.

A continuación, se va a calcular cual debería de ser el precio de las materias primas, en este caso del H₂, o de los productos para que el VAN sea igual o mayor a 0.

Una vez calculado el precio que debería de tener el MeOH para que el VAN se igual a 0 obtenemos esta nueva gráfica:

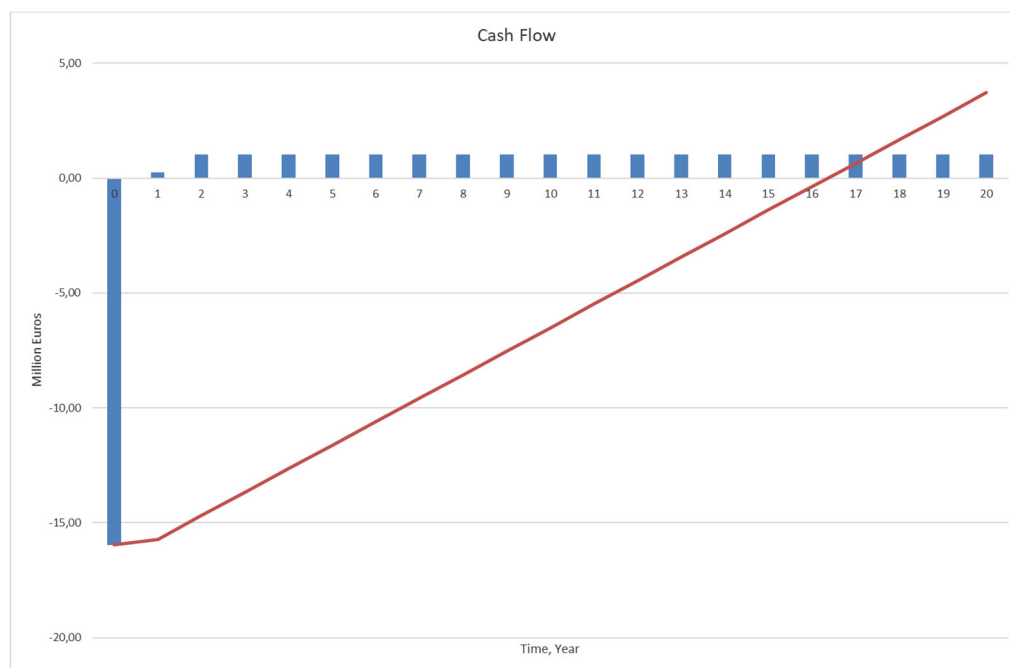


Figura 51: Nuevo Cash Flow del proyecto

En esta nueva gráfica se comprueba que sin variar el precio de las materias primas y cambiado el precio de venta del MeOH de 575 €/t, que es el precio actual, a 2150 €/t se obtiene beneficio en el decimosexto año del comienzo del proyecto y con un VAN igual a cero por lo que lo ideal sería que el precio de venta del MeOH estuviera por encima de este valor.

Otra opción que se debe explorar es la producción del hidrógeno verde a partir de electrolisis obteniendo la energía de una fuente renovable como la solar o eólica, ya que es un factor limitante el elevado precio de compra del H₂ y así disminuiría en gran medida. Esta opción sigue sin ser viable a un precio de venta del MeOH de 575 €/t, pero el precio de venta del MeOH no tendría que llegar hasta 2150 €/t que es muy elevado.

5. SEGURIDAD

En todo proyecto es necesario realizar una evaluación de peligros potenciales asociados a la naturaleza de los compuestos químicos que circulan por la planta o también debidos a problemas que puedan surgir durante la operación, como escapes, derrames o aumentos de presión, etc.

5.1. Peligros asociados a la naturaleza de los compuestos

Para analizar y ver cuáles son los posibles peligros potenciales de los compuestos químicos que intervienen en el proceso hay disponibles herramientas como las que aporta la ICSC o el FISQ, que es la versión española de las anteriores, que son fichas de seguridad que redactan expertos de la Organización Mundial de la Salud, OMS.

Dichas fichas de seguridad se adjuntan en el [ANEXO IV. Hojas de seguridad](#).

Como se puede ver en las fichas los compuestos H₂ y MeOH son altamente inflamables, y la mezcla con aire resulta explosiva, para evitar estos peligros se recomienda eliminar cualquier tipo de fuente de ignición, desde chispas hasta llamas, y almacenarlos en recipientes a prueba de incendios y separados de otros compuestos oxidantes. Para prevenir dichos peligros se recurre a las normas ATEX, de trabajo en atmosferas explosivas, directivas 94/9/CE (ATEX-100) y 99/92/CE (ATEX-137) de la Comisión Europea (*Normativa Nacional de Seguridad En El Trabajo: Trabajo Con Riesgo de Explosión - ATEX*, n.d.).

En caso de que ocurriera algún accidente se debe de disponer de sistemas antiincendios adecuados, como sistemas de agua pulverizada, CO₂ o espumas resistentes a alcoholes. La planta debe contar con un plan de evacuación de emergencia.

Para asegurar la protección de los trabajadores se debe tener en cuenta que los compuestos que intervienen en el proceso son tóxicos y pueden provocar problemas para la salud, por ejemplo, el CO₂ puede provocar vértigo, dolor de cabeza, elevada presión sanguínea entre otros riesgos, el H₂ puede provocar también vértigo o dolor de cabeza, apatía y finalmente el MeOH es muy toxico ya que puede provocar alteraciones de la vista, somnolencia, convulsiones entre otros efectos adversos.

Para prevenir estos riesgos para los trabajadores deberán existir una buena ventilación y unos sistemas de extracción para evitar una larga exposición. Se promoverá el uso de guantes y trajes de protección y se prohibirá comer, fumar o beber durante el trabajo. Los valores límites de exposición se encuentran en las fichas de seguridad.

5.2. Seguridad en el proceso

Como en todo proceso químico se debe llevar a cabo un diseño de seguridad activa como pasiva para evitar accidentes asociados a fallos de las instalaciones o humanos, y estar capacitada para que no tenga consecuencias, ni en el proceso ni en la salud de los trabajadores.

Para que la seguridad este presente, se instalan sistemas de alarmas, colocadas en los equipos más críticos, que se encargan de enviar una señal de alerta al panel de control, para los casos en los que alguna variable del proceso sea anormalmente alta o baja. De modo que, sea posible una actuación de los operarios para solucionar el problema lo antes posible y que comiencen las acciones de la seguridad activa.

En caso de que los valores no se pudieran controlar, la planta dispone de un sistema de control distribuido que además de controlar la operación de la planta, será capaz de realizar una parada, antes de llegar a una catástrofe, mediante “Switches” o la distintas posiciones en caso de fallo de las válvulas de control. Todos los equipos de seguridad están reflejados en los P&ID del proceso presentes en [ANEXO I. Diagramas de proceso.](#)

5.2.1. Problemas de Presión

Ya que en este proceso se trabaja con presiones elevadas pueden existir casos de sobre presión, como por ejemplo en los tanques de homogeneización de las materias primas, en el reactor, o en los sistemas de calefacción a partir de vapores de alta presión, o en los flashes o en la torre de destilación. Si hubiera algún fallo en la valvulería las presiones se pueden transmitir al siguiente equipo o se pueden generar en el propio equipo si no se libera.

Para salvaguardar la seguridad se usan medidas de seguridad pasivas como la implementación de válvulas de seguridad o PSV's. Estas válvulas llevan unos muelles tarados para que salten a una presión determinada y así aliviar posibles sobrepresiones liberando los gases sobrantes a la atmosfera o a una antorcha o “Flare”.

5.2.2. Problemas de temperatura

La temperatura es una variable muy crítica, aunque en este sistema el nivel térmico no es muy elevado, pero aun así hay que velar por la seguridad de los trabajadores y de los equipos. Los principales problemas son las posibles quemaduras de los operarios provocadas por contacto de puntos de elevadas temperaturas o de temperaturas muy bajas, para ello se incluyen en las líneas y equipos que operen a una temperatura muy elevada o demasiado bajas unos aislamientos térmicos (fibra de vidrio, cerámica o similar).

Para salvaguardar la seguridad también se elegirá el material del que estén conformados los equipos para que aguanten temperaturas y presiones mayores a la de operación.

5.2.3. Problemas de flujo y nivel

El nivel en los depósitos, torres, condensadores y ebulliciones es una variable importante para la seguridad del proceso ya que el desbordamiento de los mismos afectará negativamente en la salud de los trabajadores, esto se evitará colocando los controles oportunos para evitar reboses o niveles demasiado bajos, que creará una posible cavitación en las bombas, también se pondrá alrededor de los equipos pertinentes un cubeto que es un muro de hormigón alrededor que cree una barrera protectora y no se derrame los líquidos por el proceso y también se incluirán drenajes que permitirán reducir el nivel y así operar correctamente.

El un aumento o disminución excesivo de flujo puede generar problemas en la operación y eficiencia de todos los equipos, pero en especial de la torre de destilación, en la entrada de alimentación, del reflujo, o del vapor del calderín, pues un exceso puede producir inundaciones o goteos que estropeen el funcionamiento de los platos de la torre o que los propios platos se rompan.

5.3. HAZOP

El análisis de riesgos HAZOP consiste en identificar los posibles peligros potenciales y los problemas operativos en las industrias, y se exige en el Real Decreto (RD 1254/1999 + 948/2005) sobre control de riesgos inherentes a los accidentes graves en los que intervengan sustancias peligrosas.

El método es sistemático y cualitativo que se conforma en identificar las posibles desviaciones de las variables, tras esta identificación evaluar las causas, las consecuencias y las posibles acciones necesarias para eliminar las consecuencias y reducir con esto el riesgo. Este análisis se tiene que llevar a cabo en todos los nodos del proceso, que suelen ser cada uno de los equipos del proceso, aunque a veces se juntan varios equipos por la posible reacción en cadena.

En el [ANEXO V. HAZOP](#) se realizará un ejemplo de HAZOP de un punto crítico del sistema como es la torre de destilación de producto. Ya que asegura la pureza y salida del producto. En revisiones posteriores del proyecto se deberá de realizar el resto de análisis HAZOP.



6. IMPACTO AMBIENTAL

Dentro del proceso hay corrientes que le abandonan que son potencialmente contaminantes para el medio ambiente y hay que analizar cual ha de ser la gestión de dichas corrientes. Otro aspecto a tomar en cuenta es el posible daño al medio ambiente causado por algún accidente o vertido.

También hay que tener en cuenta los posibles efectos en el medio ambiente causados por la construcción de la planta, al igual que las emisiones ligadas a la operación de la misma planta como, por ejemplo, las emisiones de CO₂ producidas en la generación de vapor para calefacción.

6.1. Efectos sobre la atmósfera

Los efectos sobre la atmosfera vienen dados principalmente por los vertidos realizados en las purgas del proceso, en los venteos, descargas de las válvulas de seguridad o PSV y mayoritariamente en la generación de energía.

Los compuestos que intervienen en este proceso a excepción del MeOH no generarían un impacto medioambiental excesivo ya que el H₂ y CO₂ son gases presentes en la propia atmosfera, pero con el fin de eliminar las emisiones de CO₂ a la atmósfera y siendo uno de los objetivos de este proyecto aprovechar el CO₂ emitido como materia prima.

Para aprovechar el CO₂ que se libera en las corrientes 21 y 23, que son purgas del sistema, existen varias opciones ya que dichas corrientes están compuestas por CO₂, CO, H₂ y MeOH se puede utilizar como combustible para las calderas de formación de vapor y posteriormente capturar el CO₂ mediante procesos de absorción con etanolaminas (Goto et al., 2013). Otra opción es separar primero el H₂ del resto de la corriente con membranas y así poder reutilizarlo en el proceso (Cordis, n.d.) y el resto de la corriente capturar el CO₂ como en el proceso anterior.

En el caso de las descargas de válvulas de seguridad y venteos se procederá a quemarlas en una antorcha o “Flare” ya que aparte de ser un método de seguridad también impide liberar a la atmosfera posibles contaminantes como el MeOH, transformándolos principalmente en CO₂ y agua.

6.2. Efectos sobre el agua

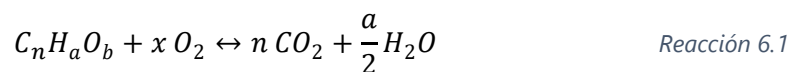
Al igual que con los venteos, se implantaron en el proceso unos drenajes para retirar fluidos en la planta y para realizar operaciones de limpieza y mantenimientos. Dichos drenajes pueden contener pueden contener

contaminantes para el agua como el CO₂ y el MeOH por lo que será necesario tratar para darle otro uso o verterlo de forma segura.

A parte de los drenajes en el proceso se genera una corriente de agua residual que sale de la columna C-101 que también debe ser tratada. Estas aguas una vez tratadas eliminando la materia orgánica y haciendo un tratamiento de desaireación pueden ser empleadas como agua caliente sanitaria (ACS), o para el propio proceso como servicios generales, ya sea para el sistema de vapor como HPS y LPS o para el sistema de refrigeración como CW.

Para tratar dichas aguas residuales, en primer lugar, hay que cuantificar cuanta materia orgánica tienen, en este caso la corriente está compuesta del 0,008% en masa o una concentración de 5878,8 mg/l, que es una concentración bastante elevada. (Methanol institute, 2013)

Para cuantificar dicha carga orgánica se utiliza un parámetro conocido como DQO (demanda química de oxígeno, en mg O₂/l) que indica la cantidad de oxígeno necesario para oxidar toda la materia orgánica presente en la corriente de agua residual. Esta DQO se calcula de la siguiente manera:



Donde x es el número de moles de O₂ necesarios para oxidar un mol de un compuesto orgánico, n el número de carbonos de dicho compuesto orgánico, a número de hidrógenos que tiene dicho compuesto orgánico y b número oxígenos que tiene el compuesto orgánico.

Conociendo los moles de oxígeno ajustando la reacción y el balance de materia de la corriente de "WATER" se obtiene el valor de DQO de la corriente de aguas residuales.

Tabla 31: DQO de corriente de aguas residuales

	MeOH
n	1
a	4
b	1
x (mol O ₂ /mol)	1,5
Flujo molar (mol/h)	291,584
DQO (mg O ₂ /l)	8059,546

El valor de la DQO presente en esta corriente es muy elevada ya que los valores que deben tener una corriente a nivel industrial son de entre 50 y 2000 mg O₂/l llegando en algunos casos hasta 5000 mg O₂/l (Ibañez, 2017).



Para reducir este valor de DQO se conocen diferentes tratamientos como el uso de carbón activo o membranas, pero con el elevado caudal a tratar y una gran concentración de materia orgánica los mejores tratamientos son los biológicos, como los sistemas aerobios usando microorganismos metilotróficos son capaces de reducir un 95% la concentración de metanol y en caso de no reducir suficiente la cantidad de DQO se podría acudir a sistemas anaerobios reduciendo aún más la concentración de metanol.(Lasso et al., 2017).



7. CONCLUSIÓN

En conclusión, la producción de MeOH a partir de CO₂ capturado es un proceso factible obteniendo una conversión global del CO₂ del 85%, por lo que se puede comprobar que el CO₂ capturado se puede usar como materia prima.

Para este proceso se ha decidido que la ruta posible es mediante la hidrogenación catalítica del CO₂, que es una reacción que se lleva a cabo en fase gas, y haciendo un análisis de las cinéticas, usando un catalizador a base de Cu/ZnO/Al₂O₃, con el fin de maximizar la selectividad hacia el producto, se llega a que el reactor más adecuado es un reactor multitubular catalítico isotérmico y que sus condiciones de operación han de ser 140°C y 80 barg.

En la separación se realizan dos flashes que eliminan la mayoría de las materias primas y subproductos, CO₂, H₂ y CO, que se recirculan al inicio del proceso para mejorar el aprovechamiento de las materias primas ya que la conversión dentro del reactor es del 30% que no es muy elevada. Posteriormente, dado que el agua con el MeOH no forma azeótropo se lleva a una torre de destilación en la que se obtiene un MeOH del 99,85% de pureza en masa y una corriente de agua residual que se lleva a un posterior tratamiento para reducir la carga orgánica.

El diseño preliminar realizado se podría optimizar mediante la integración energética que podría llegar a ahorrar en energía hasta un 70% en calefacción y un 40% en refrigeración, es decir 2650 kW en cada caso.

El análisis económico hace ver que el proceso con los precios actuales tanto de las materias primas, como del producto y del coste de operación de la planta no es rentable, obteniendo unas pérdidas en torno a -30 MM€ por año. Haciendo un estudio sobre, cuál debería ser el precio del MeOH con el mismo coste de materias primas y de operación, se concluye que con un precio mínimo de 2150 €/t se obtendría un beneficio de 2,9 MM€ por año, obteniendo así un VAN de 0 y un TIR del 2% siendo rentable la planta a partir del decimosexto año.

Este proceso es muy esperanzador ya que, tomando el CO₂ que es uno de los compuestos que más se emiten a la atmósfera en la actualidad, pueda convertirse en un producto de valor como es el MeOH que puede ayudar con la transición de las energías no renovables a renovables y que el proceso de obtención sea más sostenible. Sin embargo, con los precios que tienen las materias primas y el producto en la actualidad este proceso no es rentable desde el punto de vista económico.



8. BIBLIOGRAFÍA

- Arteaga Pérez, L. E., Casas Ledón, Y., Cabrera Hernández, J., & Lizet Rodríguez, M. (2015). Gasificación de biomasa para la producción sostenible de energía. Revisión de las tecnologías y barreras para su aplicación. *Afinidad. Journal of Chemical Engineering Theoretical and Applied Chemistry*, 72(570).
<https://raco.cat/index.php/afinidad/article/view/297249>.
- Chapter 3: Capture of CO 2*. (n.d.). Retrieved 31 January 2024, from chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/https://www.ipcc.ch/site/assets/uploads/2018/03/srccs_chapter3-1.pdf
- Chemical Price Analysis, Chemical Latest Prices | ChemAnalyst*. (n.d.). Retrieved 11 March 2024, from <https://www.chemanalyst.com/Pricing/Pricingoverview>
- Cordis. (n.d.). *Hybrid hydrogen - carbon dioxide separation systems*. Retrieved 21 March 2024, from <https://cordis.europa.eu/article/id/87194-gas-separation-and-storage-for-less-global-warming/es>
- Crespo Martínez, A. (n.d.). *Mecánica de Fluidos*.
- Dalena, F., Senatore, A., Marino, A., Gordano, A., Basile, M., & Basile, A. (2018). Methanol Production and Applications: An Overview. In *Methanol: Science and Engineering* (pp. 3–28). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63903-5.00001-7>
- Diagrama presión entalpía | EFICIENCIA ENERGÉTICA Y UTOPIÍA*. (n.d.). Retrieved 7 March 2024, from <https://juanfrancisco207.wordpress.com/tag/diagrama-presion-entalpia/>
- Ehtesham. (2017). *What is the difference between Class 150, 300 & 600 flange*.
<https://www.trupply.com/blogs/news/109162438-what-is-the-difference-between-class-150-300-600-flange>
- “Especialista advierte sobre bebidas con metanol, ingesta letal.” From <http://www.redacciondesalud.com/textodiario/mostrar/2881558/especialista-advierte-sobre-bebidas-metanolingesta-letal> (accessed May 14, 2024).
- ENGINEERING DATA BOOK*. (2004). www.gasprocessors.com
- Goto, K., Kazama, S., Furukawa, A., Serizawa, M., Aramaki, S., & Shoji, K. (2013). Effect of CO₂ purity on energy requirement of CO₂ capture processes. *Energy Procedia*, 37, 806–812. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.05.171>

- Graaf, G. H., Stamhuis, E. J., & Beenackers, A. A. C. M. (1988). Kinetics of low-pressure methanol synthesis. *Chemical Engineering Science*, 43(12), 3185–3195.
[https://doi.org/10.1016/0009-2509\(88\)85127-3](https://doi.org/10.1016/0009-2509(88)85127-3)
- Guo, X., Zhu, H., & Zhang, S. (2024). Overview of electrolyser and hydrogen production power supply from industrial perspective. In *International Journal of Hydrogen Energy* (Vol. 49, pp. 1048–1059). Elsevier Ltd.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.10.325>
- Heat Integration*. (n.d.). Retrieved 6 March 2024, from <http://hix.eii.uva.es/hix/fb.pl>
- Heat Transfer. (2018). In *Coulson and Richardson's Chemical Engineering* (pp. 3–264). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102550-5.00001-8>
- Ibañez, Á. (2017, November 20). *Agua. El proceso de clarificado*. Nihon Kasettsu.
<https://nihonkasettsu.com/es/dbo-y-dqo-para-caracterizar-aguas-residuales/>
- Kobl, K., Thomas, S., Zimmermann, Y., Parkhomenko, K., & Roger, A. C. (2016). Power-law kinetics of methanol synthesis from carbon dioxide and hydrogen on copper-zinc oxide catalysts with alumina or zirconia supports. *Catalysis Today*, 270, 31–42.
<https://doi.org/10.1016/j.cattod.2015.11.020>
- Lasso, M. C., Veloza, M. L. L., & Prieto, L. C. E. (2017). Revista Ingeniería. *Ingeniería*, 22(1), 83–97. <https://doi.org/10.14483/UDISTRITAL.JOUR.REVING.2017.1.A05>
- Li, J., Zhao, R., Xu, Y., Wu, X., Bean, S. R., & Wang, D. (2022). Fuel ethanol production from starchy grain and other crops: An overview on feedstocks, affecting factors, and technical advances. In *Renewable Energy* (Vol. 188, pp. 223–239). Elsevier Ltd.
<https://doi.org/10.1016/j.renene.2022.02.038>
- M. del R. Rodero et al., “Performance evaluation of a control strategy for photosynthetic biogas upgrading in a semi-industrial scale photobioreactor,” *Bioresour. Technol.*, vol. 307, no. March, p. 123207, 2020, doi: 10.1016/j.biortech.2020.123207.
- Methanol institute. (2013). *Methanol Safe Handling Manual Spanish*. chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/https://www.methanol.org/wp-content/uploads/2016/06/Methanol-Safe-Handling-Manual-Final_Spanish.pdf
- Methanol Prices, Monitor, News, Market Analysis & Demand*. (n.d.). Retrieved 14 February 2024, from <https://www.chemanalyst.com/Pricing-data/methanol-1>
- Mignard, D., & Pritchard, C. (2006). Processes for the Synthesis of Liquid Fuels from CO₂ and Marine Energy. *Chemical Engineering Research and Design*, 84(9), 828–836.
<https://doi.org/10.1205/CHERD.05204>
- Military Standard, “O - M -232 N,” no. February. 2016.

- Milne, T. A., Abatzoglou, N., & Evans, R. J. (1998). *Biomass Gasifier “Tars”: Their Nature, Formation, and Conversion*.
- Momento dipolar: cómo se calcula y ejemplos*. (n.d.). Retrieved 5 February 2024, from <https://www.lifeder.com/momento-dipolar/>
- Normativa nacional de Seguridad en el trabajo: Trabajo con riesgo de explosión - ATEX*. (n.d.). Retrieved 18 March 2024, from <https://www.insst.es/normativa/seguridad-en-el-trabajo/trabajo-con-riesgo-de-explosion/atex>
- Ott, J., Gronemann, V., Pontzen, F., Fiedler, E., Grossmann, G., Kersebohm, D. B., Weiss, G., & Witte, C. (2012). Methanol. In *Ullmann’s Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Wiley. https://doi.org/10.1002/14356007.a16_465.pub3
- P. Mondal, G. S. Dang, and M. O. Garg, “Syngas production through gasification and cleanup for downstream applications - Recent developments,” *Fuel Process. Technol.*, vol. 92, no. 8, pp. 1395–1410, 2011, doi: 10.1016/j.fuproc.2011.03.021.
- Pérez-Fortes, M., Schöneberger, J. C., Boulamanti, A., & Tzimas, E. (2016). Methanol synthesis using captured CO₂ as raw material: Techno-economic and environmental assessment. *Applied Energy*, 161, 718–732. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.07.067>
- Tabibian, S. S., & Sharifzadeh, M. (2023). Statistical and analytical investigation of methanol applications, production technologies, value-chain and economy with a special focus on renewable methanol. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 179. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2023.113281>
- Van-Dal, É. S., & Bouallou, C. (2013a). Design and simulation of a methanol production plant from CO₂ hydrogenation. *Journal of Cleaner Production*, 57, 38–45. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2013.06.008>
- Van-Dal, É. S., & Bouallou, C. (2013b). Design and simulation of a methanol production plant from CO₂ hydrogenation. *Journal of Cleaner Production*, 57, 38–45. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2013.06.008>
- Vanden Bussche, K. M., & Froment, G. F. (1996). A steady-state kinetic model for methanol synthesis and the water gas shift reaction on a commercial Cu/ZnO/Al₂O₃ catalyst. *Journal of Catalysis*, 161(1), 1–10. <https://doi.org/10.1006/jcat.1996.0156>
- Zhen, X., & Wang, Y. (2015). An overview of methanol as an internal combustion engine fuel. In *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (Vol. 52, pp. 477–493). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.07.083>



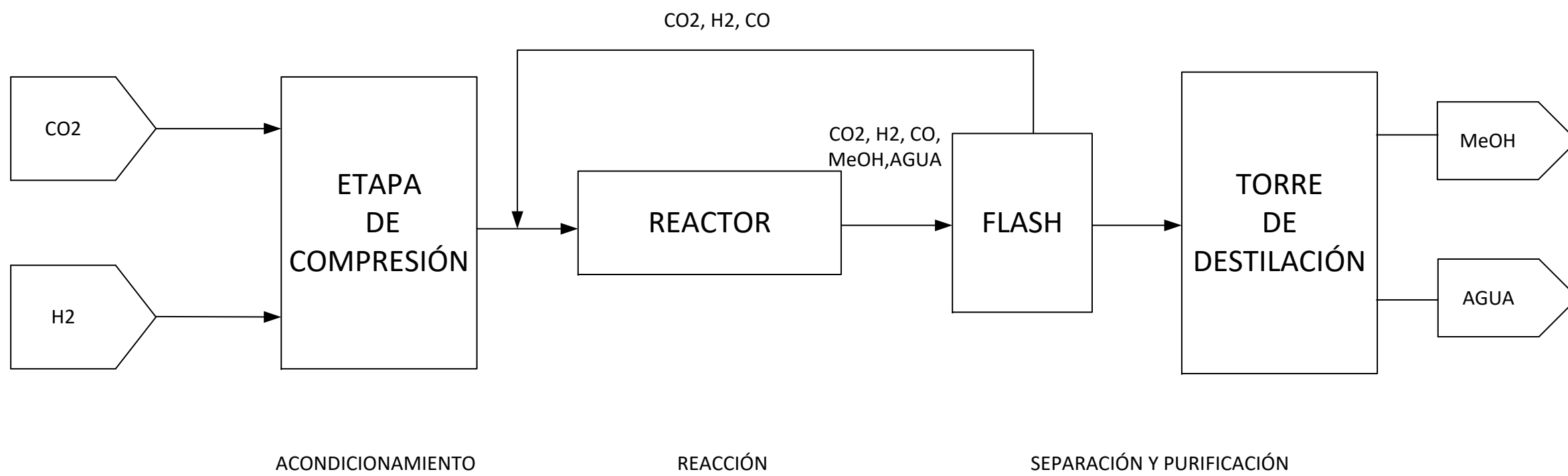
Zhou, Z., & Gao, P. (2022). Direct carbon dioxide hydrogenation to produce bulk chemicals and liquid fuels via heterogeneous catalysis. *Chinese Journal of Catalysis*, 43(8), 2045–2056. [https://doi.org/10.1016/S1872-2067\(22\)64107-X](https://doi.org/10.1016/S1872-2067(22)64107-X)



ANEXO I. Diagramas del proceso



1.1. Diagrama de Bloques



NOTAS GENERALES

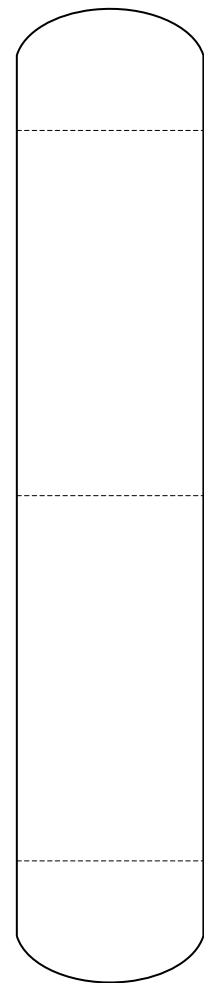
ESTE DIAGRAMA ES UNA REPRESENTACIÓN MUY GENERAL DE LAS SECCIONES EN LAS QUE SE DIVIDE EL PROCESO

NOTAS

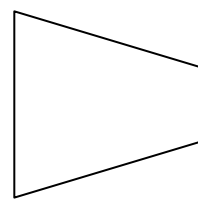
REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1			27/10/22	
DATE				
01/02/2024				
BY		CHECKED	APPROVED	
DFA				



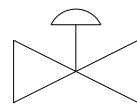
1.2. PFD



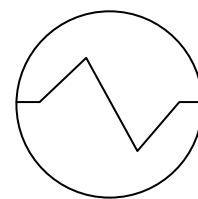
TORRE DE DESTILACIÓN



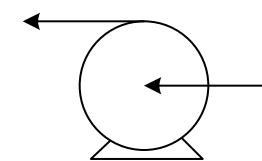
COMPRESOR CENTRIFUGO



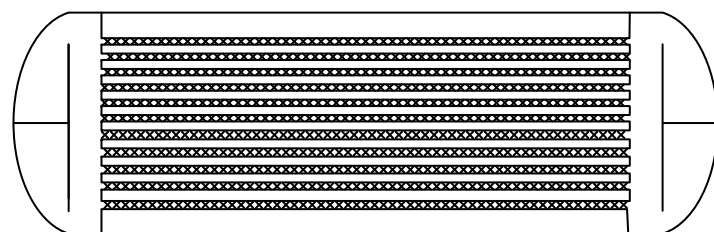
VÁLVULA DE CONTROL



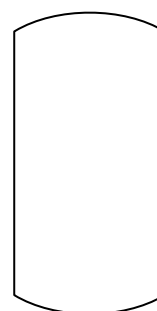
INTERCAMBIADOR DE CALOR DE CACASA Y TUBOS



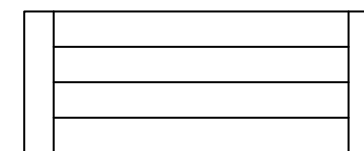
BOMBA CENTRIFUGA



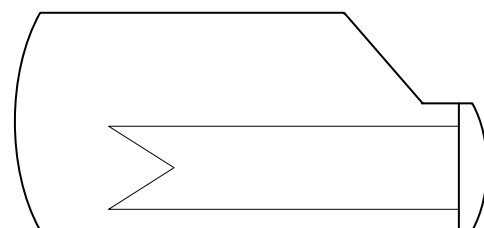
REACTOR CATALITICO MULTITUBULAR



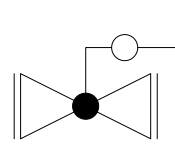
DEPOSITO A PRESIÓN / FLASH



CONDENSADOR DE TORRE



EBULLIDOR TIPO KETTLE



VÁLVULA DE CAMBIO DE PRESIÓN

EQUIPOS	
V	DEPÓSITOS A PRESIÓN/ FLASH
E	INTERCAMBIADORES DE CALOR
PFR	REACTOR CATALÍTICO MULTITUBULAR
T	TORRE DE DESTILACIÓN
C	COMPRESORES
P	BOMBAS

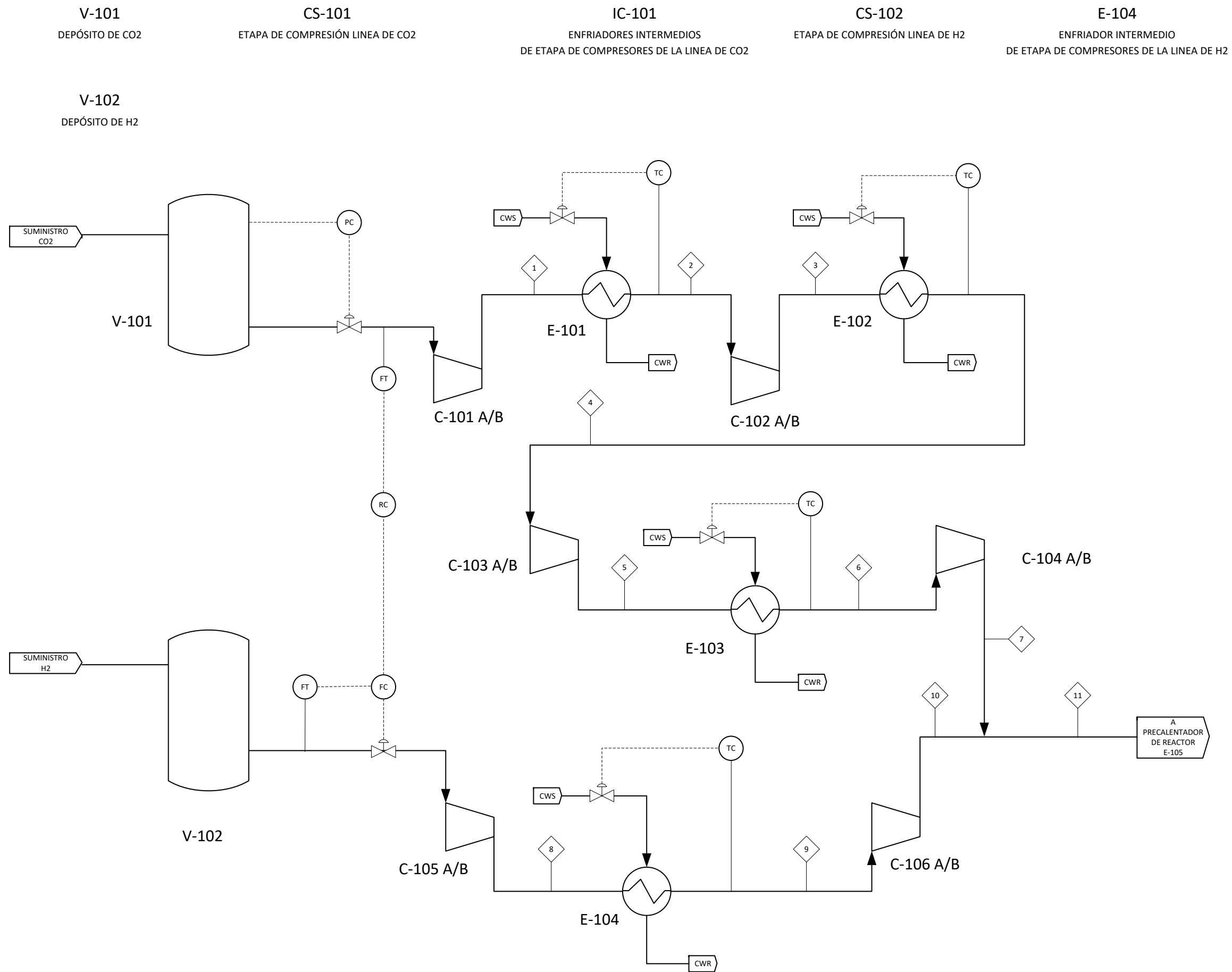
CONTROL Y SERVICIOS GENERALES	
CWS/CWR	AGUA DE REFRIGERACIÓN
HPS/HPC	VAPOR Y CONDENSADO DE ALTA PRESIÓN
LPS/LPC	VAPOR Y CONDENSADO DE BAJA PRESIÓN
FT	MEDIDOR DE FLUJO
FC	CONTROLADOR DE FLUJO
TC	CONTROLADOR DE TEMPERATURA
RC	CONTROLADOR DE RATIO
PC	CONTROLADOR DE PRESIÓN

NOTAS GENERALES

LOS EQUIPOS DE INTERCAMBIO DE PRESIÓN COMO LAS BOMBAS Y LOS COMPRESORES LLEVAN DESPUÉS DE LA IDENTIFICACIÓN LA NOMENCLATURA A/B, HACIENDO REFERENCIA A QUE HAY OTRO EQUIPO IGUAL EN PARALELO PARA REALIZAR MANTENIMIENTOS O EN CASO DE ROTURA DEL PRINCIPAL

NOTAS

REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1				
DATE				
01/02/2024				
BY		CHECKED	APPROVED	
DFA				



NOTAS GENERALES

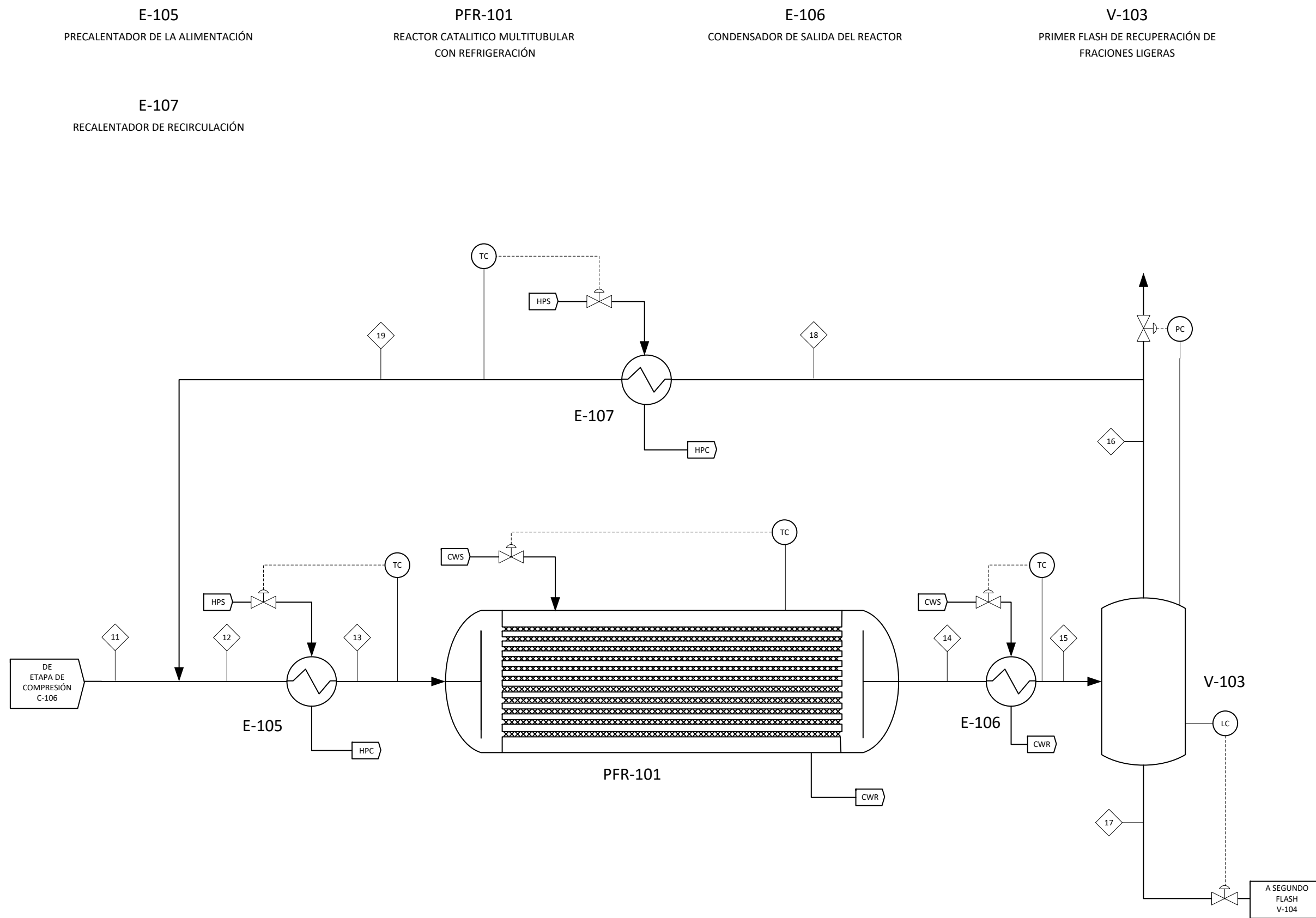
LAS CORRIENTES DE SUMINISTRO PROVIENEN DE EMPRESAS EXTERNAS .

CS: ETAPA DE COMPRESIÓN
 CS-101= C-101 A/B, C-102 A/B, C-103 A/B, C-104 A/B
 CS102=C-105 A/B, C-106 A/B

IC: ENFRIAMIENTO INTERMEDIO DE ETAPA DE COMPRESIÓN
 IC-101=E-101, E-102, E-103

NOTAS

REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1				
DATE				
01/02/2024				
BY		CHECKED	APPROVED	
DFA				



E-105
PRECALENTADOR DE LA ALIMENTACIÓN

E-107
RECALENTADOR DE RECIRCULACIÓN

PFR-101
REACTOR CATALITICO MULTITUBULAR
CON REFRIGERACIÓN

E-106
CONDENSADOR DE SALIDA DEL REACTOR

V-103
PRIMER FLASH DE RECUPERACIÓN DE
FRACCIONES LIGERAS

NOTAS GENERALES

LA REACCIÓN TIENE LUGAR EN EL INTERIOR DE LOS TUBOS CATALÍTICOS (ZONA MARCADA CON CRUCES) Y EL FLUIDO CALEFACTOR, EN ESTE CASO VAPOR SATURADO, FLUYE POR LA CARCASA DEL REACTOR.

NOTAS

REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1				
DATE				
01/02/2024				
BY		CHECKED		APPROVED
DFA				

NOTAS GENERALES

V-104
SEGUNDO FLASH DE RECUPERACIÓN DE
FRACCIONES LIGERAS

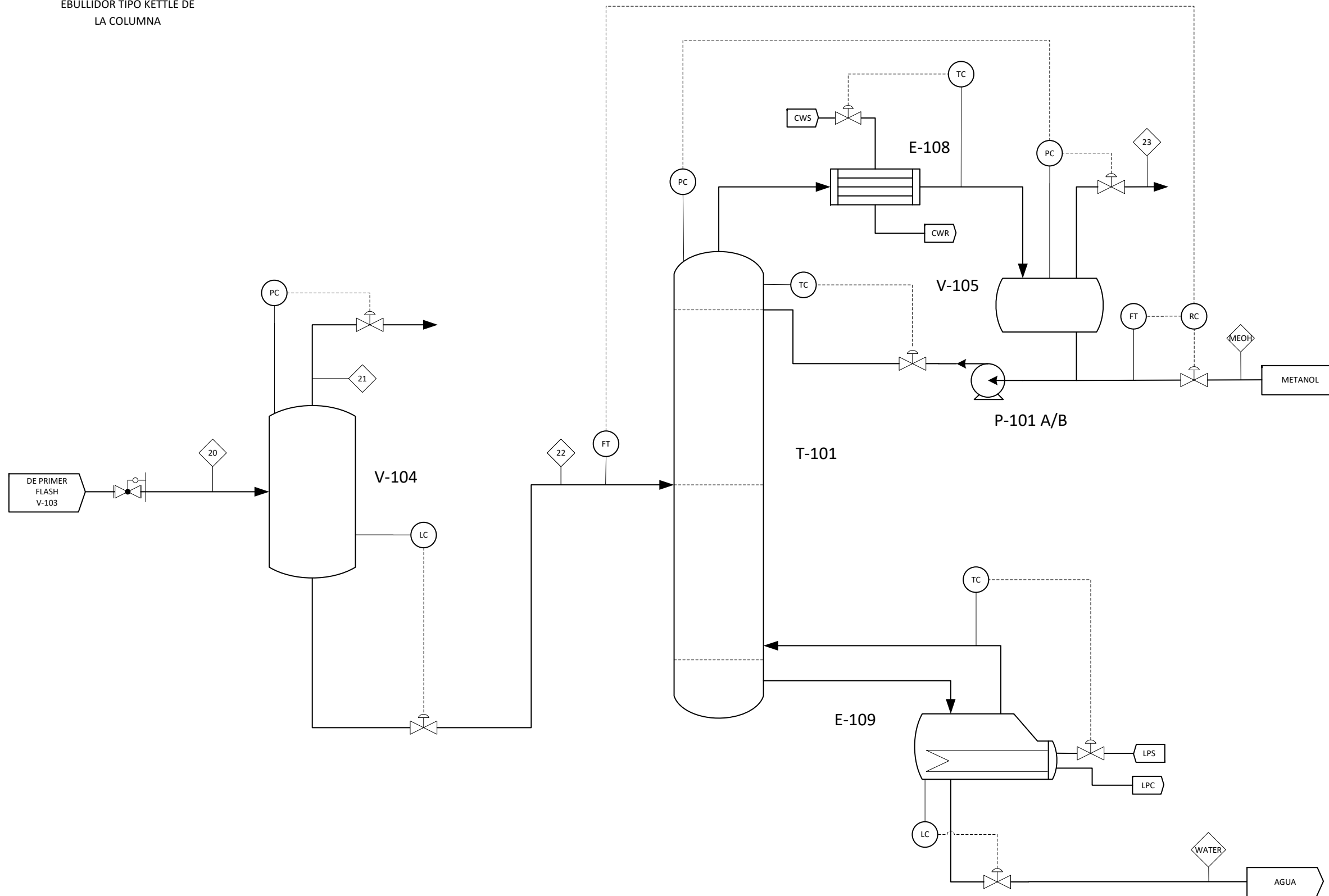
T-101
COLUMNA DE DESTILACIÓN DE AGUA
METANOL

P-101 A/B
BOMBA DE RECIRCULACIÓN DE
CONDENSADOS A LA COLUMNA

E-108
CONDENSADOR DE DESTILADOS A LA SALIDA
DE LA COLUMNA

V-105
DEPÓSITO DECONDENSADOS
DE LA COLUMNA

E-109
EBULLIDOR TIPO KETTLE DE
LA COLUMNA

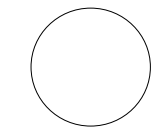


REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1				
DATE				
01/02/2024				
BY		CHECKED		APPROVED
DFA				

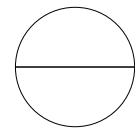


1.3. P&ID

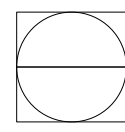
NOTAS GENERALES



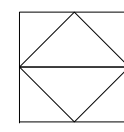
INTRUMENTO DE CAMPO



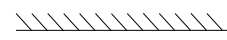
INTRUMENTO EN PANEL



CONTROLADOR



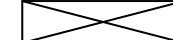
INTRUMENTO DE CONTROL DISTRIBUIDO



AISLANTE TÉRMICO



SEPARADOR DE GOTAS



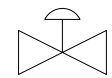
ROMPE VÓRTICES



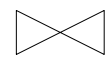
FILTRO EN Y



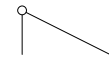
ACOMETIDA



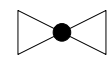
VÁLVULA DE CONTROL



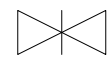
VÁLVULA DE CORTE



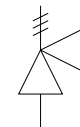
VÁLVULA ANTIRRETORNO



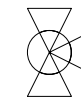
VÁLVULA DE GLOBO



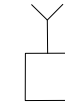
VÁLVULA MARIPOSA



VÁLVULA DE SEGURIDAD



VÁLVULA MEZCLADORA



DRENAJE



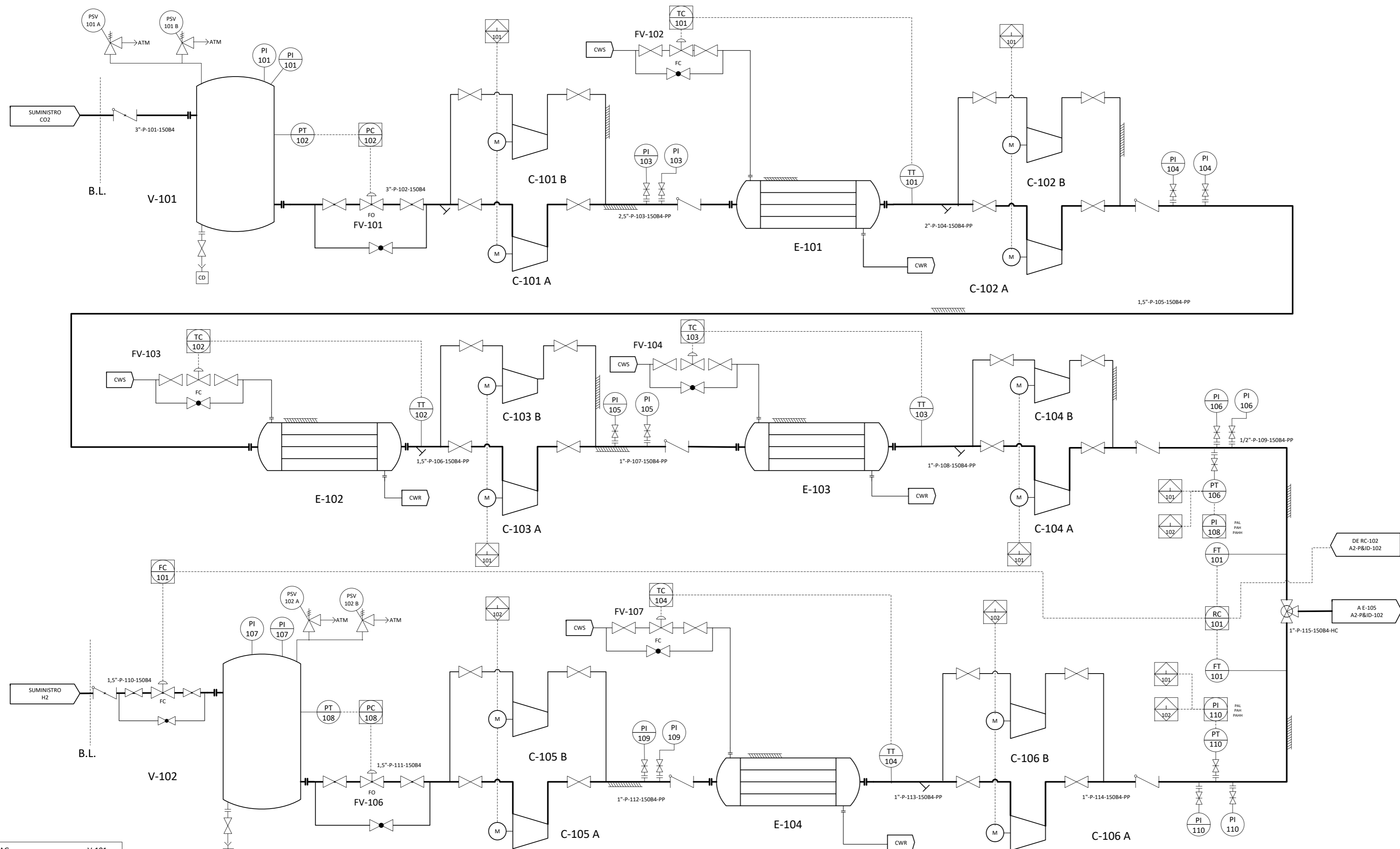
VENTEO

INSTRUMENTOS

Letra	Variable	Controladores	Indicadores	Transmisores	Válvulas	Alarmas (L-bajo, H-alto)	Alarmas (LL-muy bajo, HH-muy alto)
F	FLUJO	FC	FI	FT	FV	FAL/FAH	FALL/FAHH
L	NIVEL	LC	LI	LT		LAL/LAH	LALL/LAHH
P	PRESIÓN	PC	PI	PT	PV	PAL/PAH	PALL/PAHH
T	TEMPERATURA	TC	TI	TT		TAL/TAH	TALL/TAHH
R	RATIO	RC	RI	RT		RAL/RAH	RALL/RAHH
A	COMPOSICIÓN	AC	AI	AT		AAL/AAH	AALL/AAHH
Otros							
CD	DRENAJE QUÍMICO	I	INTERLOCK				
ATM	ATMÓSFERA	LG	MEDIDOR DE NIVEL DE CRISTAL				
FL	ANTROCHA	PSV	VÁLVULA DE SEGURIDAD				

NOTAS

REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1				
DATE				
01/02/2024				
BY		CHECKED	APPROVED	
DFA				
A3-P&ID-100				



TAG:	V-101
Servicio:	Deposito de alimentación de CO2
D (cm):	165
L (cm):	412,74
P diseño (barg):	90
T diseño (°C):	240
MAT:	CS

TAG:	C-101 A/B
Servicio:	Compresión de CO2 alimentación
Q (m3/h):	975
ΔP (barg):	4
Tipo:	Centrifugo

TAG:	C-103 A/B
Servicio:	Compresión de CO2 alimentación
Q (m3/h):	162
ΔP (barg):	18
Tipo:	Centrifugo

TAG:	C-105 A/B
Servicio:	Compresión de H2 alimentación
Q (m3/h):	167
ΔP (barg):	19
Tipo:	Centrifugo

TAG:	E-101
Servicio :	enfriador intermedio
Duty (kW):	52
P diseño carcasa (barg):	90
P diseño tubos (barg):	90
T diseño (°C):	240
MAT:	CS

TAG:	E-103
Servicio :	enfriador intermedio
Duty (kW):	87.2
P diseño carcasa (barg):	90
P diseño tubos (barg):	90
T diseño (°C):	240
MAT:	CS

TAG:	V-101
Servicio:	Deposito de alimentación de H2
D (cm):	165
L (cm):	412,74
P diseño (barg):	90
T diseño (°C):	240
MAT:	CS

TAG:	C-102 A/B
Servicio:	Compresión de CO2 alimentación
Q (m3/h):	418
ΔP (barg):	8
Tipo:	Centrifugo

TAG:	C-104 A/B
Servicio:	Compresión de CO2 alimentación
Q (m3/h):	62
ΔP (barg):	50
Tipo:	Centrifugo

TAG:	C-106 A/B
Servicio:	Compresión de H2 alimentación
Q (m3/h):	123
ΔP (barg):	31
Tipo:	Centrifugo

TAG:	E-102
Servicio :	enfriador intermedio
Duty (kW):	88
P diseño carcasa (barg):	90
P diseño tubos (barg):	90
T diseño (°C):	240
MAT:	CS

TAG:	E-104
Servicio :	enfriador intermedio
Duty (kW):	11
P diseño carcasa (barg):	90
P diseño tubos (barg):	90
T diseño (°C):	240
MAT:	CS

NOTAS GENERALES

LOS DETALLES SERÁN DEFINIDOS EN LA SIGUIENTE ETAPA DE DISEÑO

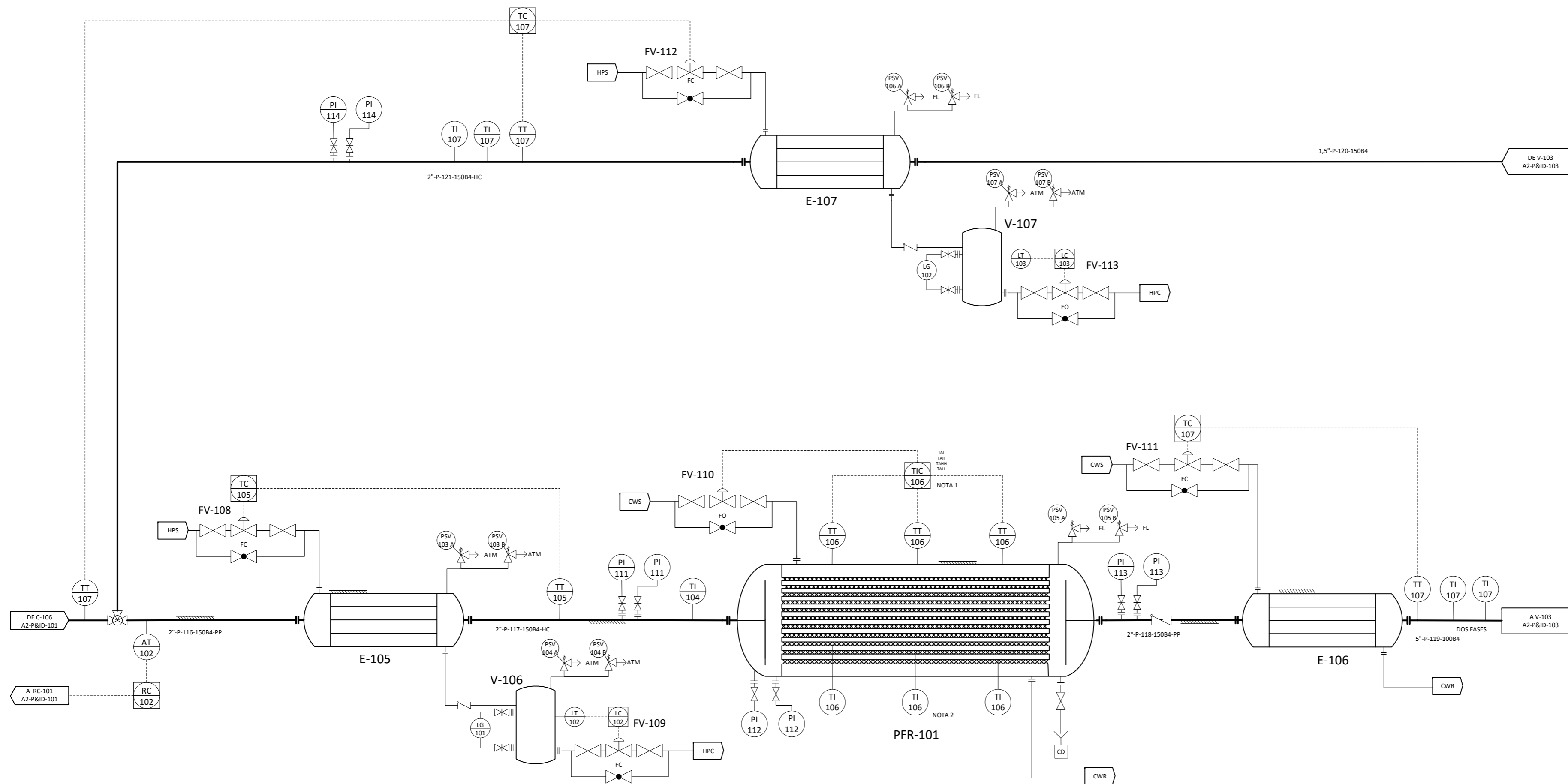
CADA COMPRESOR TIENE UNO EN PARALELO PERO SOLO OPERA UNA DE LOS DOS. EL OTRO ESTA PARA QUE CUANDO EL PRINCIPAL ESTE EN MANTENIMIENTO EL PROCESO SIGA EN CONTINUO

NOTAS

REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1		DFA	01/02/2024	
DATE				
BY		CHECKED	APPROVED	
A2-P&ID-101				

NOTAS GENERALES

LOS DETALLES SERÁN DEFINIDOS EN LA SIGUIENTE ETAPA DE DISEÑO



NOTAS

1. EL VALOR DE LA TEMPERATURA TRANSMITIDO E INDICADO EN EL CONTROLADOR SERÁ AQUELLA QUE COINCIDA EN DOS TRANSMISORES DISTINTOS
2. ESTOS INSTRUMENTOS DEL REACTOR INDICAN Y TRANSMITEN LA TEMPERATURA DENTRO DE LOS TUBOS DEL REACTOR

TAG:	E-105
Servicio :	Precalentador de materias primas
Duty (kW):	856
P diseño carcasa (barg):	90
P diseño tubos (barg):	90
T diseño (°C):	250
MAT:	CS

TAG:	E-105
Servicio :	Condensador de corriente de salida del reactor
Duty (kW):	3439
P diseño carcasa (barg):	90
P diseño tubos (barg):	90
T diseño (°C):	250
MAT:	CS

TAG:	E-106
Servicio :	Recalentador de reciclo de materia primas
Duty (kW):	885
P diseño carcasa (barg):	90
P diseño tubos (barg):	90
T diseño (°C):	240
MAT:	CS

TAG:	V-106
Servicio :	Deposito de condensados de HPS
D (cm):	50
L (cm):	100
P diseño (barg):	40
T diseño (°C):	270
MAT:	CS

TAG:	V-107
Servicio :	Deposito de condensados de HPS
D (cm):	50
L (cm):	1
P diseño (barg):	40
T diseño (°C):	270
MAT:	CS

TAG:	PFR-101
Servicio :	Reactor catalítico multitubular
D (m):	3
L (m):	11
P diseño (barg):	90
T diseño (°C):	250
Duty Jacket (kW):	1164
MAT:	CS

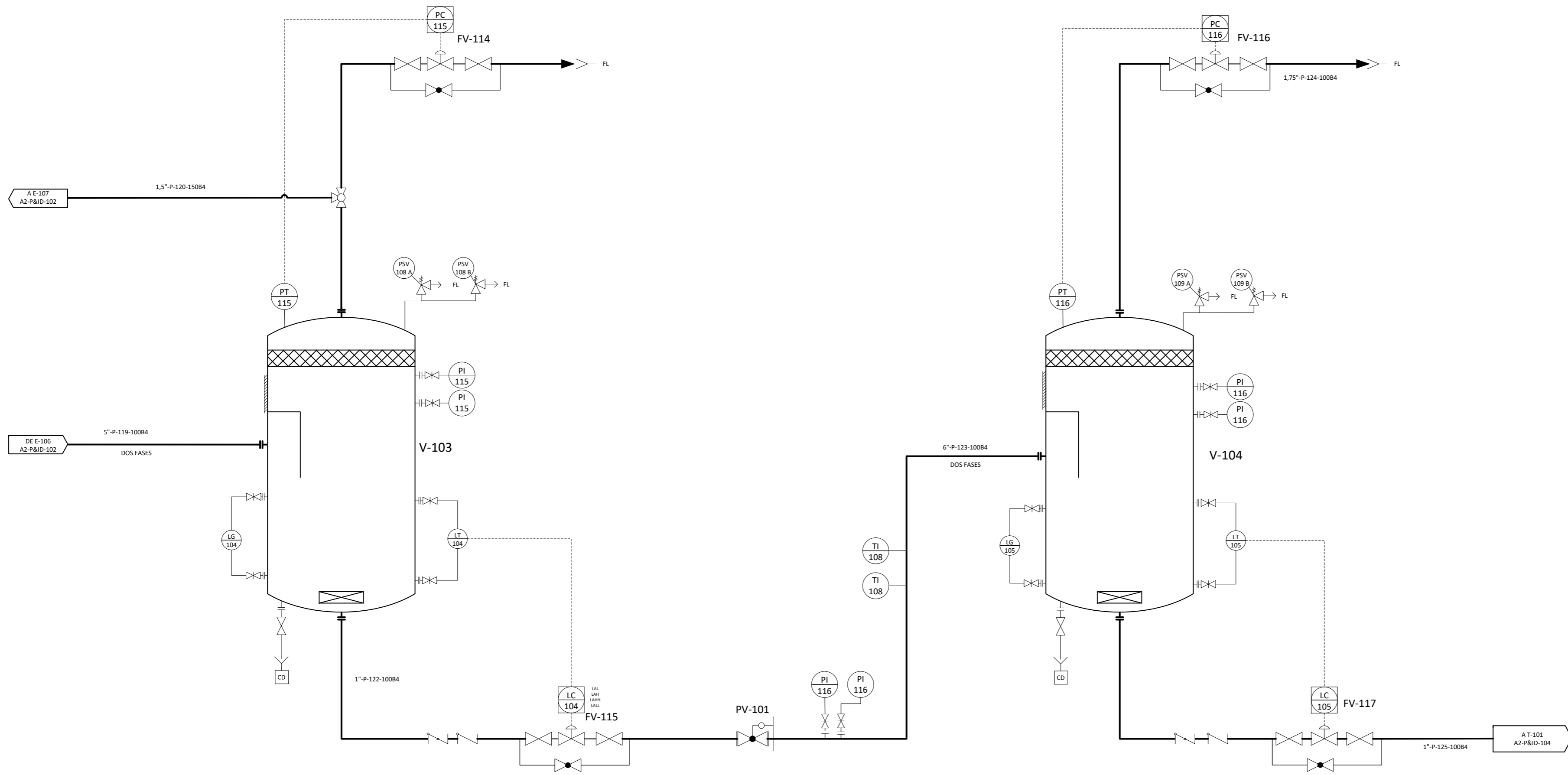
REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1				

DATE: 01/02/2024

BY	CHECKED	APPROVED
DFA		

NOTAS GENERALES

LOS DETALLES SERÁN DEFINIDOS EN LA SIGUIENTE ETAPA DE DISEÑO



TAG:	V-103
Servicio:	Primer flash
D (cm):	50
L (cm):	100
DESIGN P (barg):	90
DESIGN T (°C):	270
MAT:	CS

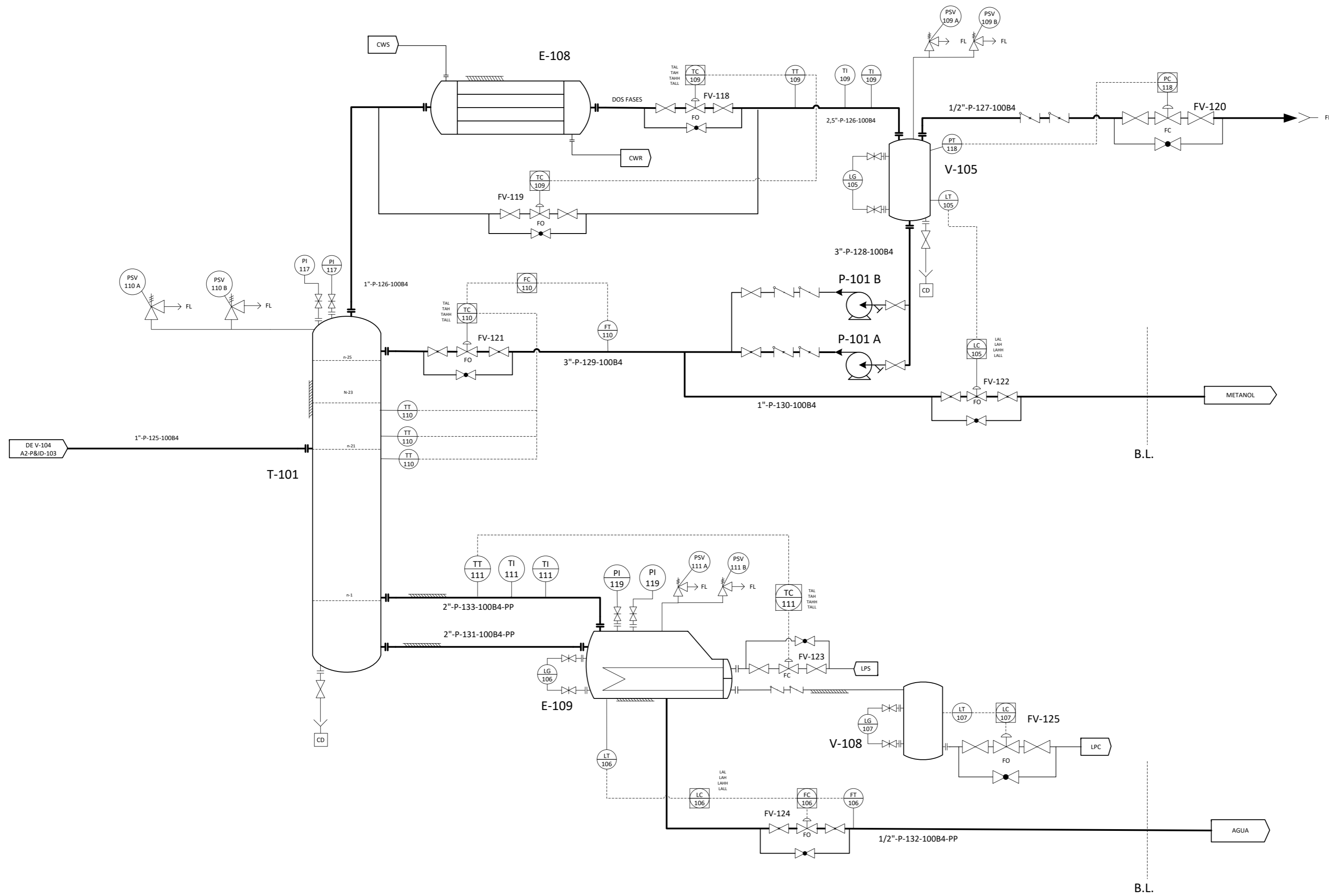
TAG:	V-104
Servicio:	segundo flash
D (cm):	50
L (cm):	100
DESIGN P (barg):	40
DESIGN T (°C):	270
MAT:	CS

NOTAS

REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1			01/02/2024	
DATE				
BY	CHECKED	APPROVED		
DFA				
A2-P&ID-103				

NOTAS GENERALES

LOS DETALLES SERÁN DEFINIDOS EN LA SIGUIENTE ETAPA DE DISEÑO



B.L.

B.L.

NOTAS

TAG:	T-101
Servicio:	Torre de destilación
D (m):	1
L (m):	25
DESIGN P (barg):	3,5
DESIGN T (°C):	200
MAT:	CS

TAG:	E-109
Servicio:	Ebullidor kettle torre de destilación
Duty (kW):	1897
P diseño carcasa (barg):	2
P diseño tubos (barg):	2
Temperatura de diseño (°C):	200
MAT:	CS

TAG:	E-108
Servicio:	Condensador de torre de destilación
Duty (kW):	1687
P diseño carcasa (barg):	2
P diseño tubos (barg):	2
T diseño (°C):	200
MAT:	CS

TAG:	V-105
Servicio:	Deposito de condensados
D (cm):	75
L (cm):	200
P diseño (barg):	2
T diseño (°C):	200
MAT:	CS

TAG:	V-108
Servicio:	Deposito de condensados de LPS
D (cm):	50
L (cm):	100
DESIGN P (barg):	2
DESIGN T (°C):	200
MAT:	CS

REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1		DFA	01/02/2024	
DATE				
01/02/2024				
BY		CHECKED	APPROVED	
DFA				
A2-P&ID-104				



1.4. Integración energética

ΔH

-103

-900

-3439

-87,22

-88,72

-58

-10,97

-1687

856

885

1897

836,8

1900,8

kW

113°C

250°C

250°C

125°C

125°C

25°C

38°C

90°C

175°C

193°C

240°C

50°C

145°C

50°C

144°C

50°C

114°C

80°C

87°C

30°C

30°C

152°C

230°C

240°C

25°C

77,5°C

86°C

95°C

103,13°C

107°C

111,6°C

152°C

25°C

35°C

103°C

103°C

5°C

15°C

103°C

mCp

INF

INF

16

0,91

0,94

0,9

1,67

INF

9,7

6,9

INF

83,68

190

kW/°C

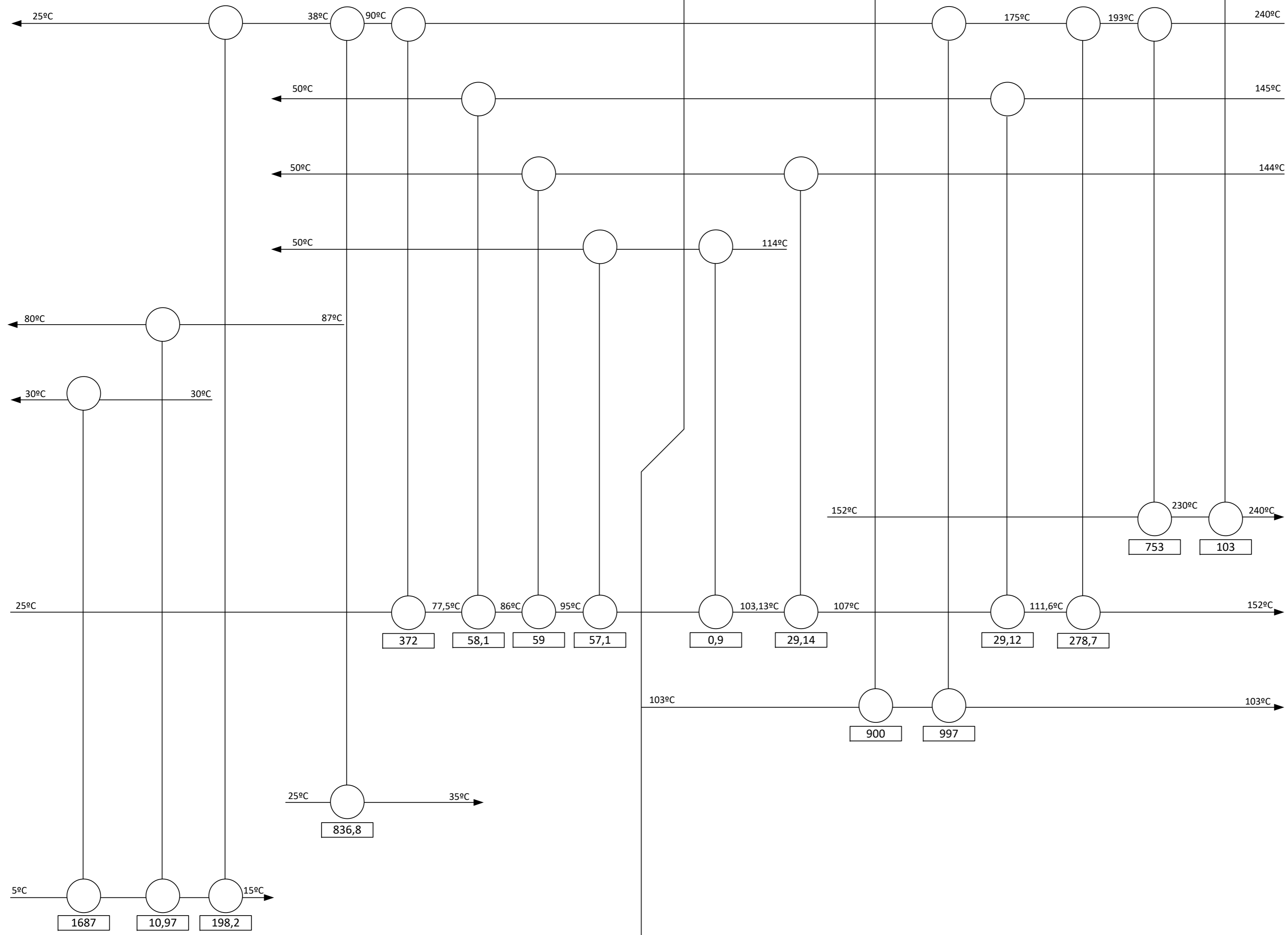
NOTAS GENERALES

LAS CORRIENTES NO ESTAN ORDENADA NI POR NIVEL TÉRMICO NI POR ESCALAS.
ESTA DIAGRAMA MUESTRA LA POSIBLE RED DE CAMBIADORES SI SE REALIZA LA INTEGRACIÓN ENERGÉTICA PROPUESTA

NOTAS

ALGUNOS RESULTADOS NO SON EXACTOS YA QUE SE HAN IDO PERDIENDO DECIMALES DURANTE EL CÁLCULO

REV.	DESCRIPTION	BY	DATE	APPROVED
1				
DATE				
01/02/2024				
BY	CHECKED	APPROVED		
DFA				
INTEGRACIÓN ENERGÉTICA				





ANEXO II. Cálculos

2.1. Intercambiador de calor E-103

El intercambiador de calor E-103 se diseñó siguiendo la siguiente ruta de cálculo:

En primer lugar, se comenzó calculando los flujos que intervienen en dicho intercambiador tanto el flujo de proceso, que en este caso es una corriente de CO₂, y el flujo de los servicios generales, o utilities, que en este caso es agua de refrigeración. Tanto el flujo de proceso como el duty, o necesidades energéticas, se obtuvieron directamente del simulador ASPEN PLUS V12 y el flujo de los utilities se obtienen directamente de la ecuación de la energía (Ecuación II.1) asumiendo que la diferencia de temperatura es de 10°C para poder luego volver a enfriar el agua.

$$q = \dot{m} \cdot cp \cdot \Delta T \quad \text{Ecuación II.1}$$

Una vez obtenido los flujos de que se van a usar en el cambiador se procede a la elección de por dónde va cada uno de ellos ya que este intercambiador es de carcasa y tubos.

Por los tubos va a circular la corriente de proceso principalmente porque es el fluido con mayor presión y temperatura. Esto es debido a que es mucho más económico aumentar el espesor o escoger un material resistente a la temperatura y presión en los tubos que en la carcasa.

En segundo lugar, se recogen las propiedades físicas de ambos fluidos a las distintas temperaturas y presiones. Para la recopilación de las propiedades físicas se usa una herramienta web llamada NIST, (“National Institute of Standards and Technology”, de los Estados Unidos).

Para el diseño del cambiador de calor será necesario anotar los valores de: ρ la densidad, c_p calor específico, μ que es la viscosidad dinámica y k_L es la conductividad térmica. Todos ellos en unidades del sistema internacional, salvo el calor específico que se expresa en kJ/kgK.

Tabla 32: Propiedades físicas de fluidos

Fluido Tubos			Fluido carcasa		
	CO2			CW	
Te	145	°C	Te	25	°C
Ts	60	°C	Ts	35	°C
cp	1,0305	kJ/kg k	cp	4,181	kJ/kg k
kL	0,021403	w/m*k	kL	0,60652	w/m*k
ρ	54,34	kg/m3	ρ	1000	kg/m3
μ	1,75E-05	pa*s	μ	8,90E-04	pa*s
m	0,98	kg/s	m	2,09	kg/s

En tercer lugar, se estima un valor del coeficiente global de transmisión de calor, aunque estos vienen tabulados en el Coulson en la página 199, tabla 1.22.

De esta tabla se obtiene que los coeficientes globales para este caso oscilan entre 20-300 W/m²°C y en este caso se elige 300 W/m²°C porque al aumentar el coeficiente de transmisión de calor el área de intercambio de calor será menor y el diseño será más barato y eficiente.

Lo siguiente será calcular el área necesaria de transferencia de calor y esto se hará con la ecuación de transferencia de calor (Ecuación II.2) donde se obtiene un área de 2,8 m².

$$q = U \cdot A \cdot F \cdot \Delta T_{ln} \quad \text{Ecuación II.2}$$

Una vez ya se ha calculado todo lo anterior se comienza con el diseño mecánico de los tubos:

Para realizar el diseño mecánico de los tubos en primer lugar hay que calcular el número de tubos que van a haber en la bancada y esto se realiza con la siguiente ecuación:

$$N_t = \frac{A}{A_T} = \frac{A}{\pi \cdot d_o \cdot L} \quad \text{Ecuación II.2}$$

Donde A_T es el área exterior de cada tubo en m².

Para elegir las dimensiones de cada tubo se realiza observando la velocidad del fluido dentro de cada tubo, que para este caso siendo un gas a presiones elevadas debe oscilar entre 5 m/s y 10 m/s. Teniendo en cuenta que la velocidad y turbulencia de la corriente es un factor importante en el posterior cálculo del coeficiente individual de transferencia de calor y en la pérdida de carga. La velocidad se calcula de la siguiente manera:

$$u_t = \frac{4 \cdot \dot{m} \cdot N_p}{\pi \cdot N_t \cdot \rho \cdot d_i^2} \quad \text{Ecuación II.3}$$

Con un único número de pasos por tubos y usando valores normalizados del diámetro exterior, longitud y espesor de los tubos se llega a estos resultados:

Tabla 33: Resumen de diseño mecánico de los tubos

Tubos	
Longitud (m)	1,83
Diámetro externo(m)	0,016
Diámetro interno (m)	0,012
Espesor (m)	0,002
Número de tubos	30
Velocidad tubos (m/s)	5,24

A continuación, se procede a calcular el coeficiente individual de transferencia de calor por el interior de los tubos, h_i , usando las siguiente correlaciones y números adimensionales:

$$Re = \frac{\rho \cdot u_t \cdot d_i}{\mu} \quad Pr = \frac{\mu \cdot cp}{k_L} \quad \text{Ecuación II.4 y II.5}$$

$$Nu = \frac{h_i \cdot d_i}{k_l} = 0,021 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^{0,3} \quad \text{Ecuación II.6}$$

Y también se calcula la pérdida de carga en el interior de los tubos:

$$(-\Delta P) = N_p \left[8 \cdot j_f \cdot \frac{L}{d_i} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{-0,14} + 2,5 \right] \cdot \frac{\rho \cdot u_t^2}{2} \quad \text{Ecuación II.7}$$

Donde el factor de fricción, j_f , se saca de una gráfica del Coulson en función del Reynolds, Re , y es la siguiente:

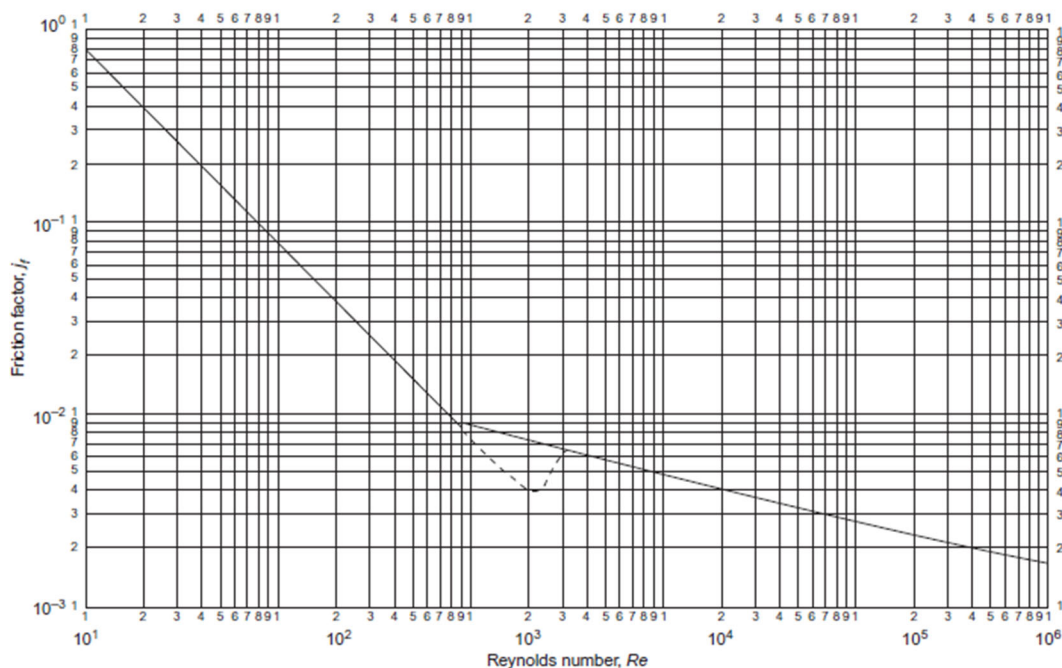


Figura 52: Gráfica de factor de fricción en el interior de los tubos. ('Heat Transfer', 2018)

Obteniendo finalmente en el interior de los tubos los siguientes resultados:

Tabla 34: Resumen de resultados del interior de los tubos

	Tubos
Reynolds	195253
Prandtl	0,84
Nusselt	341
Coefficiente individual, h_i (W/m ² °C)	608
Pérdida de carga tubos (Pa)	6388

En siguiente lugar, se procede a realizar el diseño mecánico de la carcasa comenzando por el diámetro de la misma.

Se selecciona un cambiador de cabezal flotante, con los tubos distribuidos al tresbolillo. De esta forma el paso de tubo, P_t en metros, es el siguiente:

$$P_t = 1,25 \cdot d_o \quad \text{Ecuación II.8}$$

Y el diámetro de la bancada de tubos para un único paso se calcula con la siguiente ecuación:

$$d_b = d_o \cdot \left(\frac{N_t}{k_1}\right)^{\frac{1}{n_1}}$$

Ecuación II.9

Tabla 35: Constantes empíricas de diámetro de bancada

Triangular pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
K_1	0.319	0.249	0.175	0.0743	0.0365
n_1	2.142	2.207	2.285	2.499	2.675

Para obtener el diámetro de la carcasa, d_s , se utiliza la siguiente correlación grafica en función del tipo de cambiador que se vaya a usar:

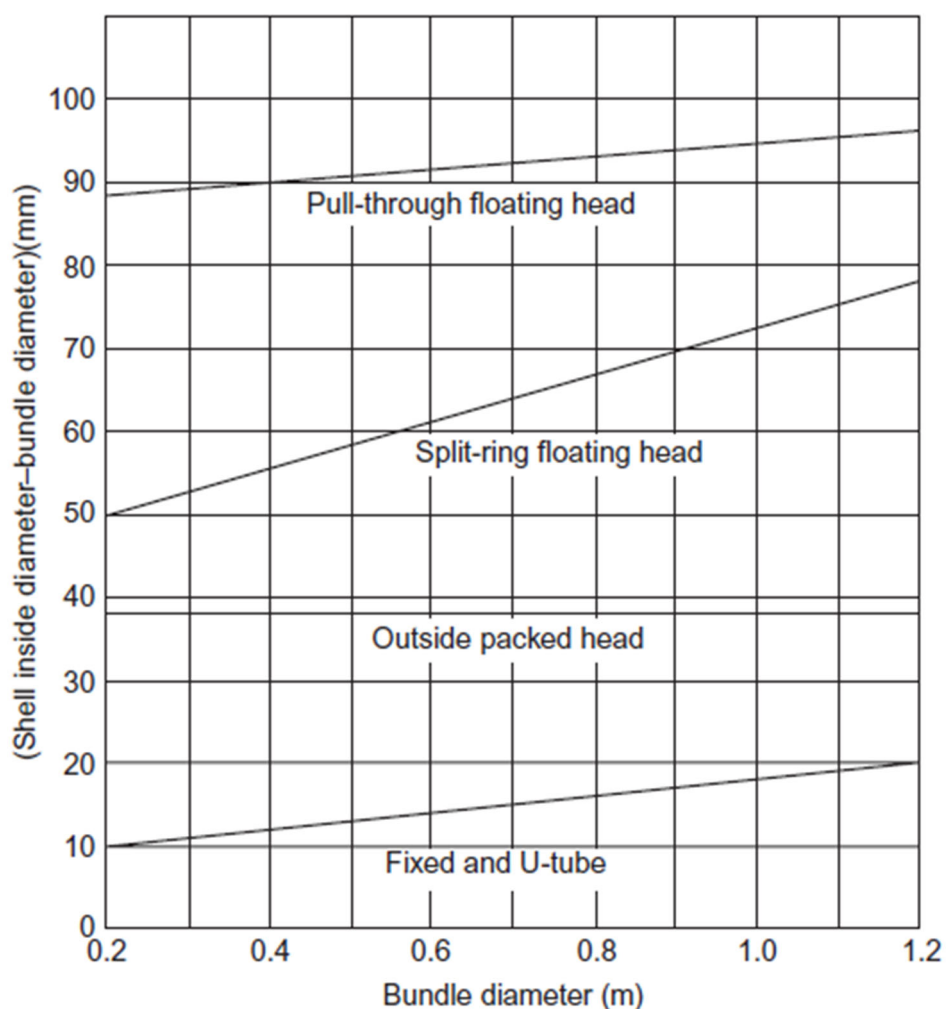


Figura 53: Holgura entre carcasa y bancada de tubos ('Heat Transfer', 2018)

Por último, del diseño mecánico de la carcasa falta por determinar las placas deflectoras que hay en el interior de la carcasa que se ocupan de mantener un flujo cruzado entre los tubos y la carcasa. Estas se diseñaron con un 25% de

corte de placa y una separación $l_b = 0,4 \cdot d_s$ que es un valor óptimo según el Coulson.

Obteniendo así los siguientes parámetros del diseño de la carcasa:

Tabla 36: Resumen de diseño mecánico de la carcasa

Carcasa	
Pt (m)	0,02
Diámetro de bancada (m)	0,141
Diámetro de carcasa (m)	0,176
Espacio entre placas (m)	0,070
Corte de placas	25%

A continuación, se procede a realizar el cálculo del coeficiente individual de transferencia de calor por la carcasa y para ello es necesario calcular el área transversal, A_s , que atravesará el fluido a través de la carcasa, también se calculará el flujo másico, $G's$, que atraviesa dicha área transversal y el diámetro equivalente, d_e .

$$A_s = \frac{d_s \cdot l_b \cdot (P_t - d_o)}{P_t} \quad \text{Ecuación II.10}$$

$$G's = \frac{\dot{m}}{A_s} \quad d_e = \frac{1,1}{d_o} \cdot (P_t^2 - 0,917 \cdot d_o^2) \quad \text{Ecuación II.11 y II.12}$$

Una vez calculado estos valores se calcula el coeficiente individual de transferencia, h_o , con la correlación del método de Kern en la que intervienen los números adimensionales de Reynolds, Prandtl y Nusselt y el factor j_h que depende de la gráfica de la siguiente figura.

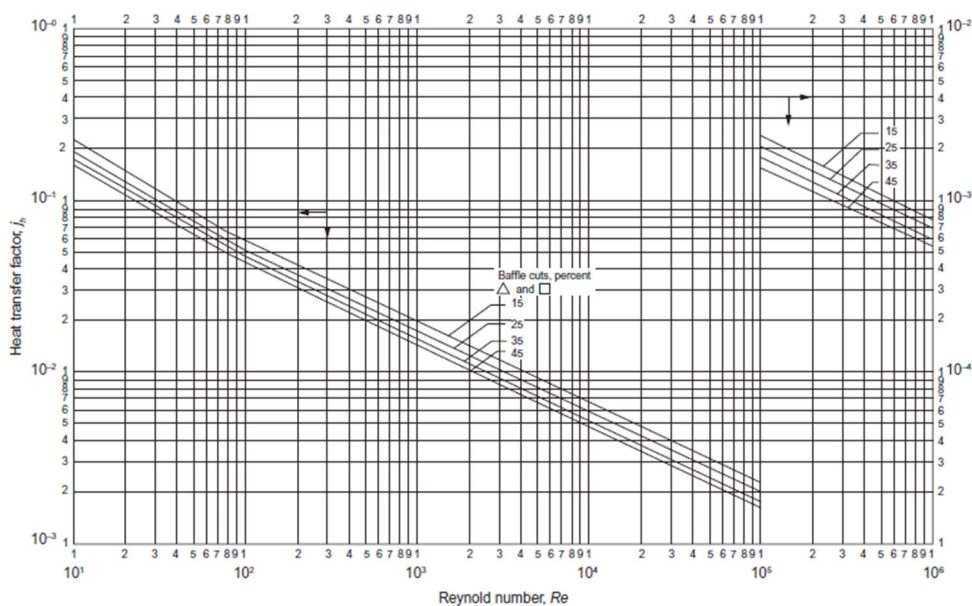


Figura 54: Correlación gráfica para obtener el factor j_h ('Heat Transfer', 2018)

$$Re = \frac{(G' s \cdot d_e)}{\mu} \quad \text{Ecuación II.12}$$

$$Nu = \frac{h_o \cdot d_e}{k_l} = j_h \cdot Re \cdot Pr^{0,33} \quad \text{Ecuación II.13}$$

Y también se calcula la pérdida de carga en la carcasa:

$$(-\Delta P) = 8 \cdot j_f \cdot \left(\frac{d_s}{d_e}\right) \cdot \frac{L}{l_b} \cdot \frac{\rho \cdot u_c^2}{2} \quad \text{Ecuación II.14}$$

Donde el factor de fricción, j_f , se obtiene de la siguiente grafica presente en el Coulson:

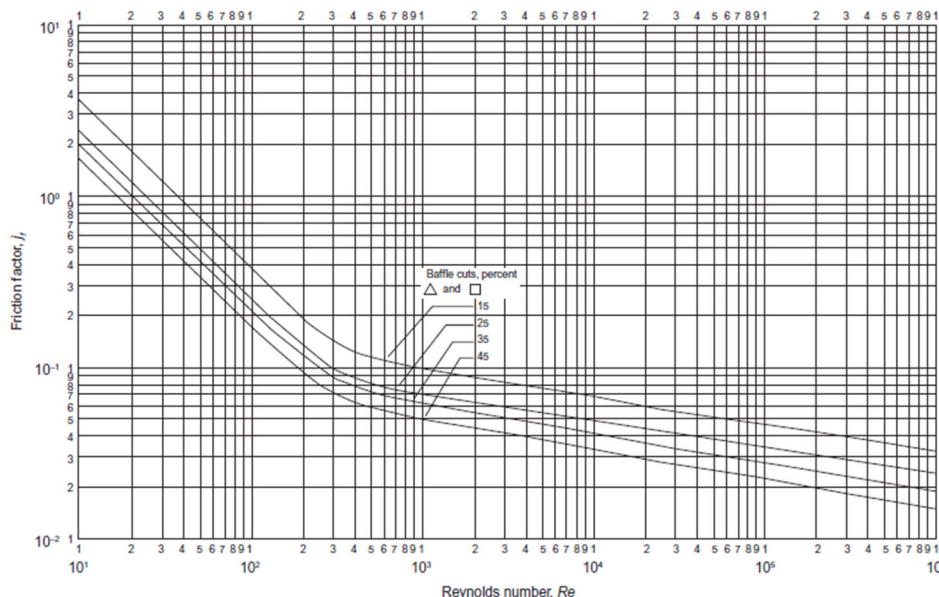


Figura 55: Factor de fricción por el lado de la carcasa ('Heat Transfer', 2018)

Obteniendo finalmente en la carcasa los siguientes resultados:

Tabla 37: Resumen valores por la carcasa

	Carcasa
Reynolds	10737
Prandtl	6,14
Nusselt	196,57
Coefficiente individual, h_o (W/m ² °C)	10494
Pérdida de carga tubos (Pa)	4611

Finalmente, para comprobar que el diseño es válido y eficiente se comprueba que el coeficiente global de transferencia de calor calculado ahora sea mayor que el coeficiente global supuesto al principio del proceso. Para calcular el coeficiente global real de este diseño, y suponiendo que los coeficientes de ensuciamiento h_{od} y h_{id} tienen un valor estándar de 6000 W/m²°C, se realiza con la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_i} + \frac{d_o \cdot \ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2 \cdot k_w} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_o}{d_i \cdot h_{id}} \quad \text{Ecuación II.15}$$

Obteniendo estos resultados resumen finales:



Tabla 38: Resumen final del diseño del intercambiador

Pérdida de carga tubos (Pa)	6388,2
Pérdida de carga carcasa (Pa)	4611,4
Coefficiente global (W/m ² °C)	371

Como las pérdidas de carga son menores a 35 kPa para líquidos, en el caso del flujo por carcasa, y menores a $0,1 \cdot P_{\text{relativa}} = 200$ kPa para gases, ya que la corriente por los tubos está a 20 barg, y el coeficiente global calculado es mayor al supuesto, $300 \text{ W/m}^2\text{°C} < 371 \text{ W/m}^2\text{°C}$, se puede dar por valido este diseño.

2.2. Torre de destilación T-101

Como ya se expresa en la memoria el proceso de elección del número de platos de la torre de destilación se hace mediante un estudio económico usando ASPEN con los datos que proporciona:

Tabla 39: Evaluación económica en ASPEN

Total Capital Cost [USD]	2.046.920
Total Operating Cost [USD/Year]	1.451.790
Total Raw Materials Cost [USD/Year]	0
Total Product Sales [USD/Year]	0
Total Utilities Cost [USD/Year]	496.431
Desired Rate of Return [Percent/Year]	20
P.O. Period [Year]	0
Equipment Cost [USD]	77.100
Total Installed Cost [USD]	343.700

Como el programa no recopila los datos económicos de cada una de las opciones se simula cada una de las opciones por separado y posteriormente se recopilan los datos económicos en una tabla. Para que la elección sea más acorde a la realidad en cada paso se elige la etapa de alimentación más beneficiosa con el gráfico de composiciones como se explica también en la memoria.

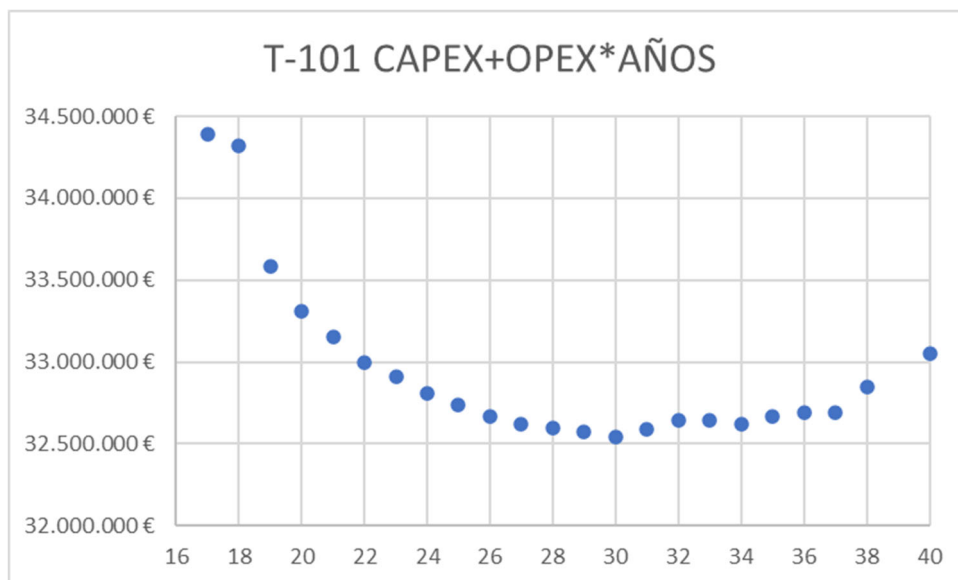


Figura 56: Selección del número de etapas de T-101

Y la tabla correspondiente a estos datos es la siguiente:



Tabla 40: Recopilación de datos para la selección de número de etapas de T-101

N ETAPAS	CAPEX	OPEX	TOTAL	RR
17	2.661.010 €	1.586.640 €	34.393.810 €	1,319
18	2.688.550 €	1.581.360 €	34.315.750 €	1,297
19	2.673.800 €	1.545.330 €	33.580.400 €	1,136
20	2.677.700 €	1.531.540 €	33.308.500 €	1,077
21	2.698.170 €	1.522.710 €	33.152.370 €	1,03
22	2.706.080 €	1.514.640 €	32.998.880 €	0,992
23	2.720.820 €	1.509.420 €	32.909.220 €	0,961
24	2.727.460 €	1.503.980 €	32.807.060 €	0,935
25	2.737.550 €	1.500.040 €	32.738.350 €	0,914
26	2.741.920 €	1.496.160 €	32.665.120 €	0,895
27	2.749.880 €	1.493.410 €	32.618.080 €	0,879
28	2.757.810 €	1.492.060 €	32.599.010 €	0,865
29	2.768.350 €	1.490.410 €	32.576.550 €	0,853
30	2.766.940 €	1.488.750 €	32.541.940 €	0,843
31	2.791.750 €	1.489.730 €	32.586.350 €	0,833
32	2.792.000 €	1.492.710 €	32.646.200 €	0,826
33	2.829.740 €	1.490.710 €	32.643.940 €	0,817
34	2.827.520 €	1.489.660 €	32.620.720 €	0,810
35	2.848.220 €	1.490.880 €	32.665.820 €	0,804
36	2.861.050 €	1.491.510 €	32.691.250 €	0,799
37	2.866.970 €	1.491.060 €	32.688.170 €	0,794
38	2.915.200 €	1.496.710 €	32.849.400 €	0,807
40	2.975.050 €	1.503.820 €	33.051.450 €	0,785

El valor sombreado corresponde con el valor mínimo y el elegido posteriormente.



ANEXO III. Tablas de corrientes

Corriente	CO2INLET	H2INLET	1	2
Fase	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
Temperatura (°C)	25	25	114	50
Presión (bar)	2	31	5	5
Fracción molar vapor	1	1	1	1
Fracción molar líquido	0	0	0	0
Fracción másica vapor	1	1	1	1
Fracción másica líquido	0	0	0	0
Entalpia Molar (MJ/kmol)	-393,592	0,027	-390,135	-392,748
Entalpia Másica (kJ/kg)	-8943,289	13,423	-8864,737	-8924,096
Entropia Molar (kJ/kmol-K)	-3,017	-28,516	-0,440	-7,807
Entropia Másica (kJ/kg-K)	-0,069	-14,146	-0,010	-0,177
Densidad molar (kmol/m ³)	0,082	1,227	0,158	0,191
Densidad másica (kg/m ³)	3,610	2,474	6,942	8,404
Flujo de Entalpia (kW)	-8746,496	1,545	-8669,673	-8727,726
Average MW	44,010	2,016	44,010	44,010
Flujo molar (kmol/hr)	80,000	205,577	80,000	80,000
CO2	80,000	0,000	80,000	80,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	205,577	0,000	0,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Fracción molar				
CO2	1,000	0,000	1,000	1,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	1,000	0,000	0,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Flujo másico (kg/hr)	3520,784	414,419	3520,784	3520,784
CO2	3520,784	0,000	3520,784	3520,784
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	414,419	0,000	0,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Fracción másica				
CO2	1,000	0,000	1,000	1,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	1,000	0,000	0,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Flujo Volumétrico (m ³ /hr)	975,182	167,519	507,203	418,941

Corriente	3	4	5	6
Fase	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
Temperatura (°C)	144	50	145	60
Presión (bar)	13	13	31	31
Fracción molar vapor	1	1	1	1
Fracción molar líquido	0	0	0	0
Fracción másica vapor	1	1	1	1
Fracción másica líquido	0	0	0	0
Entalpia Molar (MJ/kmol)	-389,043	-393,035	-389,430	-393,355
Entalpia Másica (kJ/kg)	-8839,914	-8930,630	-8848,713	-8937,893
Entropia Molar (kJ/kmol-K)	-5,247	-16,077	-13,598	-24,091
Entropia Másica (kJ/kg-K)	-0,119	-0,365	-0,309	-0,547
Densidad molar (kmol/m ³)	0,369	0,492	0,941	1,278
Densidad másica (kg/m ³)	16,222	21,656	41,404	56,228
Flujo de Entalpia (kW)	-8645,397	-8734,116	-8654,002	-8741,220
Average MW	44,010	44,010	44,010	44,010
Flujo molar (kmol/hr)	80,000	80,000	80,000	80,000
CO2	80,000	80,000	80,000	80,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	0,000	0,000	0,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Fracción molar				
CO2	1,000	1,000	1,000	1,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	0,000	0,000	0,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Flujo másico (kg/hr)	3520,784	3520,784	3520,784	3520,784
CO2	3520,784	3520,784	3520,784	3520,784
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	0,000	0,000	0,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Fracción másica				
CO2	1,000	1,000	1,000	1,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	0,000	0,000	0,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Flujo Volumétrico (m ³ /hr)	217,037	162,577	85,035	62,616

Corriente	7	8	9	10
Fase	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
Temperatura (°C)	161	87	80	152
Presión (bar)	80	50	50	80
Fracción molar vapor	1	1	1	1
Fracción molar líquido	0	0	0	0
Fracción másica vapor	1	1	1	1
Fracción másica líquido	0	0	0	0
Entalpia Molar (MJ/kmol)	-389,714	1,842	1,650	3,821
Entalpia Másica (kJ/kg)	-8855,161	913,699	818,444	1895,308
Entropia Molar (kJ/kmol-K)	-21,692	-27,068	-27,606	-26,143
Entropia Másica (kJ/kg-K)	-0,493	-13,427	-13,695	-12,968
Densidad molar (kmol/m ³)	2,418	1,630	1,660	2,202
Densidad másica (kg/m ³)	106,426	3,286	3,346	4,438
Flujo de Entalpia (kW)	-8660,309	105,182	94,216	218,181
Average MW	44,010	2,016	2,016	2,016
Flujo molar (kmol/hr)	80,000	205,577	205,577	205,577
CO2	80,000	0,000	0,000	0,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	205,577	205,577	205,577
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Fracción molar				
CO2	1,000	0,000	0,000	0,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	1,000	1,000	1,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Flujo másico (kg/hr)	3520,784	414,419	414,419	414,419
CO2	3520,784	0,000	0,000	0,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	414,419	414,419	414,419
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Fracción másica				
CO2	1,000	0,000	0,000	0,000
CO	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	0,000	1,000	1,000	1,000
MEOH	0,000	0,000	0,000	0,000
WATER	0,000	0,000	0,000	0,000
Flujo Volumétrico (m ³ /hr)	33,082	126,098	123,845	93,372

Corriente	11	12	14	15
Fase	Vapor	Vapor	Vapor	Mezcla
Temperatura (°C)	152	152	240	25
Presión (bar)	80	80	80	80
Fracción molar vapor	1	1	1	0,83
Fracción molar líquido	0	0	0	0,17
Fracción másica vapor	1	1	1	0,70
Fracción másica líquido	0	0	0	0,30
Entalpia Molar (MJ/kmol)	-106,422	-94,920	-110,631	-124,630
Entalpia Másica (kJ/kg)	-7723,022	-7429,931	-7514,750	-8465,624
Entropia Molar (kJ/kmol-K)	-20,034	-18,599	-21,140	-57,060
Entropia Másica (kJ/kg-K)	-1,454	-1,456	-1,436	-3,876
Densidad molar (kmol/m ³)	2,261	2,253	1,875	3,918
Densidad másica (kg/m ³)	31,161	28,783	27,597	57,681
Flujo de Entalpia (kW)	-8442,128	-26879,542	-27186,394	-30626,409
Average MW	13,780	12,775	14,722	14,722
Flujo molar (kmol/hr)	285,577	1019,449	884,660	884,660
CO2	80,000	250,616	183,104	183,104
CO	0,000	15,234	15,352	15,352
H2	205,577	751,863	549,562	549,562
MEOH	0,000	1,473	68,867	68,867
WATER	0,000	0,264	67,776	67,776
Fracción molar				
CO2	0,280	0,246	0,207	0,207
CO	0,000	0,015	0,017	0,017
H2	0,720	0,738	0,621	0,621
MEOH	0,000	0,001	0,078	0,078
WATER	0,000	0,000	0,077	0,077
Flujo másico (kg/hr)	3935,203	13023,856	13023,856	13023,856
CO2	3520,784	11029,542	8058,353	8058,353
CO	0,000	426,706	430,004	430,004
H2	414,419	1515,665	1107,851	1107,851
MEOH	0,000	47,188	2206,646	2206,646
WATER	0,000	4,754	1221,001	1221,001
Fracción másica				
CO2	0,895	0,847	0,619	0,619
CO	0,000	0,033	0,033	0,033
H2	0,105	0,116	0,085	0,085
MEOH	0,000	0,004	0,169	0,169
WATER	0,000	0,000	0,094	0,094
Flujo Volumétrico (m ³ /hr)	126,287	452,481	471,928	225,789

Corriente	16	17	18	19
Fase	Vapor	Líquido	Vapor	Vapor
Temperatura (°C)	25	25	25	152
Presión (bar)	80	80	80	80
Fracción molar vapor	1	0	1	1
Fracción molar líquido	0	1	0	0
Fracción másica vapor	1	0	1	1
Fracción másica líquido	0	1	0	0
Entalpia Molar (MJ/kmol)	-94,784	-269,910	-94,784	-90,445
Entalpia Másica (kJ/kg)	-7653,557	-10341,227	-7653,557	-7303,029
Entropia Molar (kJ/kmol-K)	-30,250	-187,564	-30,250	-18,117
Entropia Másica (kJ/kg-K)	-2,443	-7,186	-2,443	-1,463
Densidad molar (kmol/m ³)	3,336	26,093	3,336	2,250
Densidad másica (kg/m ³)	41,310	681,027	41,310	27,866
Flujo de Entalpia (kW)	-19322,582	-11303,826	-19322,582	-18437,414
Average MW	12,384	26,100	12,384	12,385
Flujo molar (kmol/hr)	733,892	150,768	733,892	733,872
CO2	170,617	12,487	170,617	170,616
CO	15,234	0,117	15,234	15,234
H2	546,304	3,258	546,304	546,286
MEOH	1,473	67,394	1,473	1,473
WATER	0,264	67,512	0,264	0,264
Fracción molar				
CO2	0,232	0,083	0,232	0,232
CO	0,021	0,001	0,021	0,021
H2	0,744	0,022	0,744	0,744
MEOH	0,002	0,447	0,002	0,002
WATER	0,000	0,448	0,000	0,000
Flujo másico (kg/hr)	9088,754	3935,101	9088,754	9088,653
CO2	7508,810	549,542	7508,810	7508,758
CO	426,716	3,288	426,716	426,706
H2	1101,284	6,567	1101,284	1101,246
MEOH	47,190	2159,456	47,190	47,188
WATER	4,754	1216,247	4,754	4,754
Fracción másica				
CO2	0,826	0,140	0,826	0,826
CO	0,047	0,001	0,047	0,047
H2	0,121	0,002	0,121	0,121
MEOH	0,005	0,549	0,005	0,005
WATER	0,001	0,309	0,001	0,001
Flujo Volumétrico (m ³ /hr)	220,011	5,778	220,011	326,150

Corriente	20	21	22	23
Fase	Mezcla	Vapor	Líquido	Vapor
Temperatura (°C)	10	10	10	30
Presión (bar)	1	1	1	1
Fracción molar vapor	0,10	1	0	1
Fracción molar líquido	0,90	0	1	0
Fracción másica vapor	0,14	1	0	1
Fracción másica líquido	0,86	0	1	0
Entalpia Molar (MJ/kmol)	-269,910	-301,667	-266,293	-349,488
Entalpia Másica (kJ/kg)	-10341,227	-8746,765	-10590,268	-8544,036
Entropia Molar (kJ/kmol-K)	-184,539	0,950	-205,662	-17,265
Entropia Másica (kJ/kg-K)	-7,070	0,028	-8,179	-0,422
Densidad molar (kmol/m ³)	0,492	0,051	26,290	0,048
Densidad másica (kg/m ³)	12,854	1,766	661,069	1,963
Flujo de Entalpia (kW)	-11303,826	-1291,603	-10012,223	-50,371
Average MW	26,100	34,489	25,145	40,904
Flujo molar (kmol/hr)	150,768	15,414	135,355	0,519
CO2	12,487	11,440	1,047	0,413
CO	0,117	0,117	0,000	0,001
H2	3,258	3,246	0,012	0,011
MEOH	67,394	0,521	66,873	0,094
WATER	67,512	0,090	67,422	0,000
Fracción molar				
CO2	0,083	0,742	0,008	0,795
CO	0,001	0,008	0,000	0,001
H2	0,022	0,211	0,000	0,022
MEOH	0,447	0,034	0,494	0,182
WATER	0,448	0,006	0,498	0,000
Flujo másico (kg/hr)	3935,101	531,599	3403,502	21,224
CO2	549,542	503,458	46,084	18,156
CO	3,288	3,269	0,019	0,017
H2	6,567	6,543	0,024	0,023
MEOH	2159,456	16,704	2142,752	3,028
WATER	1216,247	1,624	1214,623	0,000
Fracción másica				
CO2	0,140	0,947	0,014	0,855
CO	0,001	0,006	0,000	0,001
H2	0,002	0,012	0,000	0,001
MEOH	0,549	0,031	0,630	0,143
WATER	0,309	0,003	0,357	0,000
Flujo Volumétrico (m ³ /hr)	306,138	300,989	5,148	10,810

Corriente	MEOH	WATER
Fase	Líquido	Líquido
Temperatura (°C)	30	104
Presión (bar)	1	1
Fracción molar vapor	0	0
Fracción molar líquido	1	1
Fracción másica vapor	0	0
Fracción másica líquido	1	1
Entalpia Molar (MJ/kmol)	-240,798	-279,766
Entalpia Másica (kJ/kg)	-7490,436	-15477,467
Entropia Molar (kJ/kmol-K)	-240,778	-145,972
Entropia Másica (kJ/kg-K)	-7,490	-8,076
Densidad molar (kmol/m ³)	18,510	38,972
Densidad másica (kg/m ³)	595,058	704,439
Flujo de Entalpia (kW)	-4492,106	-5259,393
Average MW	32,147	18,076
Flujo molar (kmol/hr)	67,158	67,677
CO2	0,635	0,000
CO	0,000	0,000
H2	0,001	0,000
MEOH	66,487	0,292
WATER	0,036	67,386
Fracción molar		
CO2	0,009	0,000
CO	0,000	0,000
H2	0,000	0,000
MEOH	0,999	0,004
WATER	0,001	0,996
Flujo másico (kg/hr)	2158,964	1223,315
CO2	27,928	0,000
CO	0,002	0,000
H2	0,002	0,000
MEOH	2130,382	9,343
WATER	0,651	1213,972
Fracción másica		
CO2	0,010	0,000
CO	0,000	0,000
H2	0,000	0,000
MEOH	0,9985	0,008
WATER	0,0005	0,992
Flujo Volumétrico (m ³ /hr)	3,628	1,737






ANEXO IV. Hojas de seguridad

HIDRÓGENO	ICSC: 0001 (Abril 2014)
CAS: 1333-74-0 N° ONU: 1049 CE: 215-605-7	



	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Extremadamente inflamable. Muchas reacciones pueden producir incendio o explosión. Las mezclas gas/aire son explosivas.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas. No manipular botellas con las manos grasientas.	Cortar el suministro; si no es posible y no existe riesgo para el entorno próximo, dejar que el incendio se extinga por sí mismo; en otros casos apagar con agua pulverizada, polvo, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.

Usar controles apropiados en el proceso.			
	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Vértigo. Dolor de cabeza. Apatía. Asfixia.	Usar ventilación.	Aire limpio, reposo.
Piel	EN CONTACTO CON GAS: CONGELACIÓN.	Guantes aislantes del frío.	EN CASO DE CONGELACIÓN: aclarar con agua abundante, NO quitar la ropa. Proporcionar asistencia médica inmediatamente.
Ojos	EN CONTACTO CON GAS: CONGELACIÓN.	Utilizar pantalla facial.	EN CASO DE CONGELACIÓN: enjuagar con agua abundante. Proporcionar asistencia médica inmediatamente.
Ingestión			

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
¡Evacuar la zona de peligro! ¡Consultar a un experto! Ventilar. Eliminar toda fuente de ignición. Eliminar el vapor con agua pulverizada.	<p>Conforme a los criterios del GHS de la ONU</p> <div style="text-align: center;">  <p>PELIGRO</p> </div> <p>Gas extremadamente inflamable Contiene gas a presión; puede explotar si se calienta</p> <p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 2.1</p>
ALMACENAMIENTO	
A prueba de incendio. Fresco. Ventilación a ras del suelo y techo. Separado de materiales oxidantes.	
ENVASADO	

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
 © OIT y OMS 2018

HIDRÓGENO	ICSC: 0001
------------------	-------------------

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA	
Estado físico; aspecto GAS INODORO INCOLORO COMPRIMIDO.	Fórmula: H ₂ Masa molecular: 2.0 Punto de ebullición: -253°C Punto de fusión: -259°C Densidad relativa de vapor (aire = 1): 0.07 Punto de inflamación: gas inflamable Temperatura de autoignición: 560°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 4-75 Presión de vapor, kPa a 25°C: 165320
Peligros físicos El gas se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas. El gas es más ligero que el aire.	
Peligros químicos El calentamiento intenso puede originar combustión violenta o explosión. Reacciona violentamente con halógenos, materiales oxidantes y grasas.	

<p>Esto genera peligro de incendio y explosión. Los metales catalizadores tales como el platino o el níquel aumentan este tipo de reacciones.</p>	<p>Solubilidad en agua, mg/l a 21°C: 1.62 (muy escasa)</p>
---	--

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

<p>Vías de exposición La exposición es por vía inhalatoria principalmente.</p> <p>Efectos de exposición de corta duración Asfixia. Ver Notas. La exposición a gas frío podría causar congelación.</p>	<p>Riesgo de inhalación Al producirse pérdidas en zonas confinadas, esta sustancia puede originar asfixia por disminución del contenido de oxígeno en el aire.</p> <p>Efectos de exposición prolongada o repetida</p>
---	---

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

--

MEDIO AMBIENTE



--

NOTAS

<p>Altas concentraciones en el aire producen una deficiencia de oxígeno con riesgo de pérdida de conocimiento o muerte. Comprobar el contenido de oxígeno antes de entrar en la zona. Medir concentraciones de hidrógeno con un detector de gas adecuado (un detector de gas inflamable normal no es adecuado).</p>

INFORMACIÓN ADICIONAL

<p>- Límites de exposición profesional (INSST 2022): Notas: asfixiante simple. - N° de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 001-001-00-9 - Clasificación UE Pictograma: F+; R: 12; S: (2)-9-16-33</p>
--


 <p>GOBIERNO DE ESPAÑA MINISTERIO DE TRABAJO Y ECONOMÍA SOCIAL</p>	 <p>insst Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo</p>	<p>La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea. © Versión en español, INSST, 2018</p>
--	--	---



DIÓXIDO DE CARBONO ICSC: 0021 (Octubre 2006)
 Gas carbónico
 Anhídrido carbónico

CAS: 124-38-9
Nº ONU: 1013
CE: 204-696-9



	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	No combustible.		En caso de incendio en el entorno: usar un medio de extinción adecuado. En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Vértigo. Dolor de cabeza. Presión sanguínea elevada. Ritmo cardíaco acelerado. Asfixia. Pérdida del conocimiento.	Usar ventilación.	Aire limpio, reposo. Puede ser necesaria respiración artificial. Proporcionar asistencia médica.
Piel	EN CONTACTO CON GAS O HIELO SECO: CONGELACIÓN.	Guantes aislantes del frío.	EN CASO DE CONGELACIÓN: aclarar con agua abundante, NO quitar la ropa. Proporcionar asistencia médica.
Ojos		Utilizar gafas de protección.	
Ingestión			

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Protección personal: equipo autónomo de respiración. Ventilar. No utilizar agua.	<p>Conforme a los criterios del GHS de la ONU</p> <div style="text-align: center;">  <p>ATENCIÓN</p> </div> <p>Contiene gas refrigerado; puede provocar quemaduras o lesiones criogénicas Puede ser nocivo si se inhala</p> <p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 2.2</p>
ALMACENAMIENTO	
A prueba de incendio, si está en local cerrado. Fresco. Ventilación a ras del suelo.	
ENVASADO	

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
 © OIT y OMS 2018

DIÓXIDO DE CARBONO ICSC: 0021

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA	
<p>Estado físico; aspecto GAS INODORO INCOLORO COMPRIMIDO LICUADO.</p> <p>Peligros físicos El gas es más denso que el aire y puede acumularse en las zonas más bajas produciendo una deficiencia de oxígeno. Las pérdidas de líquido condensan formando hielo seco extremadamente frío.</p> <p>Peligros químicos Se descompone por encima de 2000°C. Esto produce monóxido de carbono tóxico.</p>	<p>Fórmula: CO₂ Masa molecular: 44.0 Punto de sublimación: -79°C Solubilidad en agua, ml/100ml a 20°C: 88 Presión de vapor, kPa a 20°C: 5720 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.5 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 0.83</p>

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La sustancia se puede absorber por inhalación.

Efectos de exposición de corta duración

La evaporación rápida del líquido puede producir congelación. La inhalación de concentraciones altas puede causar pérdida del conocimiento. Asfixia.

Riesgo de inhalación

Al producirse pérdidas en zonas confinadas, esta sustancia puede originar riesgo grave de asfixia.

Efectos de exposición prolongada o repetida

La sustancia puede afectar al metabolismo.

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

TLV: 5000 ppm como TWA; 30000 ppm como STEL.

MAK: 9100 mg/m³, 5000 ppm; categoría de limitación de pico: II(2).

EU-OEL: 9000 mg/m³, 5000 ppm como TWA

MEDIO AMBIENTE

NOTAS

El dióxido de carbono se libera en muchos procesos de fermentación (vino, cerveza, etc.) y es un componente mayoritario en los gases de combustión.

Altas concentraciones en el aire producen una deficiencia de oxígeno con riesgo de pérdida de conocimiento o muerte.

Comprobar el contenido de oxígeno antes de entrar en la zona.

A concentraciones tóxicas no hay alerta por el olor.

Otros números ONU: ONU 1845 dióxido de carbono, sólido (Hielo seco); ONU 2187 dióxido de carbono líquido refrigerado.

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Límites de exposición profesional (INSST 2021):

VLA-ED: 5000 ppm; 9150 mg/m³

- **Clasificación UE**



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIAL



La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSST, 2018


METANOL **ICSC: 0057 (Mayo 2018)**
 Alcohol metílico
 Carbinol




CAS: 67-56-1
Nº ONU: 1230
CE: 200-659-6

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Altamente inflamable. Las mezclas vapor/aire son explosivas. Riesgo de incendio y explosión en contacto con sustancias incompatibles. Ver Notas.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. NO poner en contacto con sustancias incompatibles. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas.	Usar agua pulverizada, polvo, espuma resistente al alcohol, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.

¡EVITAR LA FORMACIÓN DE NIEBLAS DEL PRODUCTO!

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Tos. Vértigo. Dolor de cabeza. Debilidad. Alteraciones de la vista. Somnolencia. Jadeo. Convulsiones. Pérdida del conocimiento.	Usar ventilación. Usar extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Piel seca. Enrojecimiento.	Guantes de protección. Traje de protección.	Enjuagar la ropa contaminada con agua abundante (peligro de incendio). Proporcionar asistencia médica.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor. Visión borrosa.	Utilizar pantalla facial o protección ocular en combinación con protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Dolor abdominal. Además ver Inhalación.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	NO provocar el vómito. Dar a beber uno o dos vasos de agua. Proporcionar asistencia médica inmediatamente.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
¡Evacuar la zona de peligro! ¡Consultar a un experto! Eliminar toda fuente de ignición. Ventilar. Protección personal: traje de protección completo incluyendo equipo autónomo de respiración. NO verterlo en el alcantarillado. Recoger, en la medida de lo posible, el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes tapados. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte. Eliminar el residuo con agua abundante. Almacenar y eliminar el residuo conforme a la normativa local.	<p align="center">Conforme a los criterios del GHS de la ONU</p> <div align="center">  </div> <p align="center">PELIGRO</p> <p>Líquido y vapores muy inflamables Tóxico en caso de ingestión Nocivo si se inhala Provoca daños en el sistema nervioso central</p> <p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 3; Peligro Secundario ONU: 6.1; Grupo de Embalaje/Envase ONU: II</p>
ALMACENAMIENTO	
Separado de materiales incompatibles. Fresco. A prueba de incendio. Mantener en lugar bien ventilado.	
ENVASADO	

 Organización Internacional del Trabajo	 Organización Mundial de la Salud	La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea. © OIT y OMS 2018	
--	---	---	---

METANOL **ICSC: 0057**

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

<p>Estado físico; aspecto LÍQUIDO INCOLORO DE OLOR CARACTERÍSTICO.</p> <p>Peligros físicos El vapor se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas.</p> <p>Peligros químicos Reacciona violentamente con oxidantes fuertes, ácidos y agentes reductores. Esto genera peligro de incendio y explosión.</p>	<p>Fórmula: CH₄O / CH₃OH Masa molecular: 32.0 Punto de ebullición: 65°C Punto de fusión: -98°C Densidad relativa (agua = 1): 0.79 Solubilidad en agua: miscible Presión de vapor, kPa a 20°C: 12.9 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.1 Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.01 Punto de inflamación: 9°C c.c. Temperatura de autoignición: 440°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 6-50 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.74 Viscosidad: 0.544 mPa a 25°C</p>
--	---

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

<p>Vías de exposición La sustancia se puede absorber por inhalación, a través de la piel y por ingestión.</p> <p>Efectos de exposición de corta duración La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central. Esto puede dar lugar a pérdida del conocimiento. La exposición podría causar ceguera y la muerte. Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata. Se recomienda vigilancia médica.</p>	<p>Riesgo de inhalación Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire.</p> <p>Efectos de exposición prolongada o repetida El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central. Esto puede dar lugar a dolores de cabeza persistentes y alteraciones de la visión.</p>
--	---

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

<p>TLV: 200 ppm como TWA; 250 ppm como STEL; (piel); BEI establecido. EU-OEL: 260 mg/m³, 200 ppm como TWA; (piel). MAK: 130 mg/m³, 100 ppm; categoría de limitación de pico: II(2); absorción dérmica (H); riesgo para el embarazo: grupo C</p>

MEDIO AMBIENTE




<p>Evitar su liberación al medio ambiente en circunstancias distintas al uso normal.</p>
--

NOTAS

<p>Arde con llama azulada. Está indicado un examen médico periódico dependiendo del grado de exposición. En caso de envenenamiento con esta sustancia es necesario realizar un tratamiento específico; así como disponer de los medios adecuados junto a las instrucciones correspondientes.</p>
--

INFORMACIÓN ADICIONAL

<p>- Límites de exposición profesional (INSST 2021): VLA-ED: 200 ppm; 266 mg/m³ Notas: vía dérmica; esta sustancia tiene establecidas restricciones a la fabricación, la comercialización o el uso especificadas en el Reglamento REACH. VLB: 15 mg/L en orina. Notas F, I. - Nº de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 603-001-00-X - Clasificación UE</p>
--

 <p>GOBIERNO DE ESPAÑA</p>	 <p>MINISTERIO DE TRABAJO Y ECONOMÍA SOCIAL</p>	 <p>insst Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo</p>	<p>La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea. © Versión en español, INSST, 2018</p>
--	--	--	---



ANEXO V. HAZOP

No del Proyecto	1		Título del proyecto	
Planta	Producción de MeOH a partir de CO2 y H2		HAZOP	
Localización	España		Unidad	100
Nodo	Torre de destilación T-101		P&ID Número	104

Parametro	Desviación	Causa	Consecuencia	Salvaguardas existentes	Recomendaciones	
Presión	Más/Alto	<ul style="list-style-type: none"> -Incremento del flujo de entrada de la columna. - Más vapor recirculado desde el calderín E-109. - Mayor recirculación en cabeza por fallo de válvula FV-121. -Fallo en válvula FV-122 - Fallo en la válvula PV-101 	<ul style="list-style-type: none"> -Posible condensación de los compuestos de la torre que crea un problema por inundación de los platos pudiendo a llegar a romperlos. - Posible arrastre del líquido por el vapor -Problemas en la separación de los compuestos y reducción de calidad del producto 	<ul style="list-style-type: none"> -Control de temperatura -Control de presión -Uso de PSV y la instalación de una de reserva -Alarmas de que avisan de presiones y temperaturas elevadas -Válvula FV-123 en caso de fallo se cierra -Apertura total de FV-120 	<ul style="list-style-type: none"> -Mejorar diseño mecánico de la torre para prevenir posibles roturas -Llevar un mantenimiento de todas las válvulas del sistema -Llevar un mantenimiento de todos los equipos ligados a la torre -Parado manual de la torre 	
	Menos/Bajo	<ul style="list-style-type: none"> -Elevadas pérdidas de carga en la alimentación 	<ul style="list-style-type: none"> -Posible retroflujos de la torre al sistema 	<ul style="list-style-type: none"> -Válvulas antirretorno -Venteos a la atmosfera 	<ul style="list-style-type: none"> -Mejorar diseño de red de tuberías -Parado manual de la torre 	
	No					
	Reversa					
Temperatura	Más/Alto	<ul style="list-style-type: none"> -Incremento de la presión de operación -Mayor temperatura de salida en el E-108 y E-109 por fallo en los controladores TC-109 y TC-111 -Menor reflujo de condensados a las torre por fallo en FV-121 o FV-122 	<ul style="list-style-type: none"> -Riesgo de Runaway -Riesgo de explosión debido a la vaporización del producto -Pérdida de eficiencia de la torre ya que el equilibrio químico cambiara 	<ul style="list-style-type: none"> -Control e indicadores de temperatura -Control de presión -Uso de PSV e instalación de una de reserva -Alarmas de que avisan de temperaturas elevadas -Válvula FV-123 en caso de fallo se cierra 	<ul style="list-style-type: none"> -Aumentar el reflujo de condensados para disminuir la temperatura de la torre cerrando FV-122 -Llevar un mantenimiento de todos los equipos y válvulas del sistema -Parado manual de la torre 	
	Menos/Bajo	<ul style="list-style-type: none"> -Aumento de entrada de alimentación -Menor temperatura de salida en el E-108 y E-109 por fallo en los controladores TC-109 y TC-111 -Mayor reflujo de condensados a la torre por fallo en FV-121 o FV-122 	<ul style="list-style-type: none"> -No existen problemas de seguridad pero si una posible pérdida de eficiencia de la torre 	<ul style="list-style-type: none"> -Control e indicadores de temperatura -Alarmas de que avisan de temperaturas bajas 	<ul style="list-style-type: none"> -Disminuir el reflujo de condensados añadiendo bypasses, abriendo FV-122 o parando bombas P-101 A/B -Llevar un mantenimiento de todos los equipos y válvulas del sistema -Parado manual de la torre 	
	No					
	Reversa					
Otra						

Flujo	Más/Alto	<ul style="list-style-type: none"> -Posible incremento de la alimentación por fallo de FV-117 -Apertura de valvula de reflujo FV-121 -Cierre de válvula de control FV-122 -Incremento de vapor de salida en el E-109 -Cierre de válvula FV-124 	<ul style="list-style-type: none"> -Incremento de presión en la torre -Posible inundación en los platos -Posible arrastre de liquido en los platos por el vapor -Riesgo de explosión 	<ul style="list-style-type: none"> -Control de temperatura -Control de presión -Uso de PSV e instalación de una de reserva -Alarmas de que avisan de presiones y temperaturas elevadas -Controles de flujos y niveles 	<ul style="list-style-type: none"> -Drenajes en los equipos -Bypass que habiliten a salida de flujo de la torre -Llevar un mantenimiento de todos los equipos y válvulas del sistema -Parado manual de la torre
	Menos/Bajo	<ul style="list-style-type: none"> -Obstrucción de la linea de alimentación -Cierre de valvula de reflujo FV-121 -Aperturs de la válvula de control FV-122 -Fugas del fluido en las conexiones 	<ul style="list-style-type: none"> -No existen posibles riesgos de seguridad -Secados de la torre lo que hace imposible de operar -Pérdida de eficiencia de la torre -Pérdida de calidad del producto 	<ul style="list-style-type: none"> -Control de flujos y niveles 	<ul style="list-style-type: none"> -Llevar un mantenimiento de todos los equipos y válvulas del sistema -Parado manual de la torre
	No	<ul style="list-style-type: none"> -Obstrucción de la linea de alimentación -Cierre de valvula de reflujo FV-121 -Aperturs de la válvula de control FV-122 -Fugas del fluido en las conexiones 	<ul style="list-style-type: none"> -No existen posibles riesgos de seguridad -Secados de la torre lo que hace imposible de operar 	<ul style="list-style-type: none"> -Control de flujos y niveles 	<ul style="list-style-type: none"> -Llevar un mantenimiento de todos los equipos y válvulas del sistema -Parado manual de la torre
	Reversa	<ul style="list-style-type: none"> -Cierre de válvula FV-119 -Cierre de FV-124 o FV-122 -Exceso de nivel en el E-109, V-105 	<ul style="list-style-type: none"> -Riesgo de inundación de la torre -Riesgo de rotura del condensador E-108 -Riesgo de explosión 	<ul style="list-style-type: none"> -Valvulas antirretorno en las lineas críticas 	<ul style="list-style-type: none"> -Llevar un mantenimiento de todos los equipos y válvulas del sistema -Parado manual de la torre
	Otra				
Nivel	Más/Alto	<ul style="list-style-type: none"> -Mayor alimentación de líquidos a la torre de los normal -Mayor flujo de condensados -Perdida de potencia o parada de bomba P-101 A -Cierre de valvulas de control FV-121 o FV-122 -Disminución de alimentación de vapor en E-109 por fallo en FV-123 -Cierre de válvula de control FV-124 	<ul style="list-style-type: none"> -Inundamiendo de torre, E-109 o V-105 -Incremento de presión en dichos equipos -Riesgo de explosión 	<ul style="list-style-type: none"> -Control de flujos y niveles - Alarmas de alto nivel en los equipos -Bomba de reserva -Drenajes de líquidos -Uso de PSV e instalación de una de reserva 	<ul style="list-style-type: none"> -Llevar un mantenimiento de todos los equipos y válvulas del sistema -Parado manual de la torre
	Menos/Bajo	<ul style="list-style-type: none"> -Menor alimentación de líquidos a la torre de los normal -Menor flujo de condensados - incremento de potencia o parada de bomba P-101 A -Apertura de valvulas de control FV-121 o FV-122 -Aumento de alimentación de vapor en E-109 por fallo en FV-123 -Apertura de válvula de control FV-124 	<ul style="list-style-type: none"> -Cavitación en las bombas por no cumplir el NPSH -No existien riesgos de seguridad 	<ul style="list-style-type: none"> -Control de flujos y niveles - Alarmas de bajo nivel en los equipos 	<ul style="list-style-type: none"> -Parada de bombas en caso de posible cavitación -Llevar un mantenimiento de todos los equipos y válvulas del sistema -Parado manual de la torre
	No				
	Reversa				
	Otra				

Composición	Más/Alto				
	Menos/Bajo				
	No				
	Reversa				
	Otra				
Otros	Más/Alto				
	Menos/Bajo				
	No				
	Reversa				
	Otra				