

SIMULACIÓN DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ACETALDEHÍDO EN ESTADO ESTACIONARIO CON ESTUDIO DE RENTABILIDAD

Giraldo, J.¹, Cardona, L.F.², Acosta, D.A.^{1*}

1. Universidad EAFIT, Departamento de Ingeniería de Procesos
2. Fundación Universitaria Luis Amigo, Departamento de Ciencias Básicas

* Autor corresponsal: Diego A. Acosta dacostam@eafit.edu.co

Noviembre, 2014

RESUMEN

En respuesta a la necesidad de producir químicos con biomasa como materia prima y a generar fuentes renovables de energía, se realizó un estudio de la rentabilidad a doce años de un proceso productor de acetaldehído por deshidrogenación de etanol anhidro al 98.41% *mol-g/mol-g*, 25.00 °C y 101.32 *kPa*, a partir de una simulación en estado estacionario en *Aspen Hysys*® V8.4. En la que se utilizó un reactor de lecho empacado con catalizador cromita de cobre a unas condiciones de reacción de 285.00 °C y 451.26 *kPa*, obteniéndose 14663.65 *kg/h* de acetaldehído al 99.36% *mol-g/mol-g* a 945.40 *kPa* y 10.03 °C como producto principal y 771.06 *kg/h* de hidrógeno al 99.34% *mol-g/mol-g* a 13828.82 *kPa* y 25.00 °C como subproducto. La conversión en el reactor fue de 99.95%. Los rendimientos para el acetaldehído y el hidrógeno fueron de 99.28% y 99.76%, respectivamente. La rentabilidad de la planta dependió significativamente del costo del etanol anhidro, al adquirirse a un precio de 0.48 *USD/kg* la planta fue rentable, con un valor presente neto de 9,506,968 *USD/kg* y una TIR de 42%, mientras que cuando el precio de compra fue 0.9 *USD/kg* la planta no fue rentable y se tuvo una pérdida de 70,708,370 *USD*.

Palabras claves: deshidrogenación, acetaldehído, hidrógeno, etanol, cromita de cobre.

ABSTRACT

As a response to the need for producing chemicals from biomass as raw material, and generating renewable energy sources, a profitability study with a twelve years horizon was carried out for the process of acetaldehyde by dehydrogenation of anhydrous ethanol 98.41% *mol-g/mol-g* at 25.00 °C and 101.32 *kPa*, from a steady state simulation in *Aspen Hysys*® V8.4. A plug flow reactor loaded with a copper chromite catalyst at 285.00 °C and 451.26 *kPa*, obtaining 14663.65 *kg/h* of acetaldehyde with 99.36% *mol-g/mol-g* purity at 945.40 *kPa* and 10.03 °C as main product and 771.06 *kg/h* of hydrogen at 99.34% *mol-g/mol-g* purity at 13828.82 *kPa* and 25.00 °C as a co-product. The single step conversion in the reactor was 99.95% Yields for acetaldehyde and hydrogen were 99.28% and 99.76%, respectively. The plant profitability depended significantly on anhydrous ethanol price, when it was purchased at 0.48 *USD/kg* the plant was profitable with a net present value of 9,506,968 *USD/kg* and a *ROI* of 42% whereas in case the purchase price of ethanol was 0.9 *USD/kg* the plant was not profitable with a loss of 70,708,370 *USD*.

Keywords: dehydrogenation, acetaldehyde, hydrogen, ethanol, copper chromite.

1. Introducción

En el mundo hay alrededor de 7.2 billones de personas que consumen aproximadamente 570 cuatrillones de *btu* de energía por año [1], [2]. De acuerdo con el *Population Reference Bureau*, en el 2050 se estima una población de 9.4 billones de personas y si no se reemplazan las energías fósiles por renovables, los problemas ambientales como la polución del aire, gases de efecto invernadero, el calentamiento global, entre otros, afectarán en gran medida al planeta [2], [3].

Dentro de las energías renovables se encuentra el bioetanol, que puede producirse a partir de biomasa que abunda en países tropicales con clima cálido [4]. En el 2010 Colombia fue el noveno productor mundial de bioetanol y es el segundo en América Latina, con una producción anual cercana a 350 millones de litros [5], [6]. Adicionalmente, se destaca que según el informe de Asocaña de mayo del 2014, la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO) concluyó para Colombia que “no existe conflicto entre el desarrollo de los biocombustibles y la seguridad alimentaria...”[5].

Teniendo en cuenta la creciente producción de bioetanol, adquiere gran importancia su utilización en la industria química para producir otros compuestos de alto valor agregado (e.g. etil acetato, acetaldehído, hidrógeno, etano, dietil carbonato, dietil éter, y óxido de etileno) [7]–[9].

El acetaldehído es un compuesto que tiene muchas aplicaciones, es empleado en perfumería, saborizantes, colorantes de anilina, plásticos, endurecimiento de fibras gelatinosas, fertilizantes y puede ser un intermediario químico para producir ácido acético, anhídrido acético, etil

acetato, ácido peracético, butanol, 2-etilhexanol, pentaeritritol, cloral, glioxal, alquil aminas, piridinas y sus bases, butadieno, entre otros [10], [11]. La producción mundial de acetaldehído en el 2012 estuvo alrededor de 1.33 millones de toneladas [12].

El hidrógeno se emplea en aplicaciones como refinación de petróleo, manufactura de fertilizantes, plásticos y solventes; tratamiento de metales, y celdas de combustible donde se produce electricidad con alta eficiencia de manera extremadamente limpia al generarse sólo agua [3], [13], [14]. Además al partir de biomasa como materia prima ya se ha contribuido a priori a la captura de CO₂ [13]. La producción global de hidrógeno en el 2013 fue de más de 50 millones de toneladas [15].

En este artículo se presenta la simulación en estado estacionario en *Aspen Hysys V8.4* y el diseño de una planta para la producción de acetaldehído e hidrógeno a partir de etanol, con su respectivo análisis de costos y financiero. El efluente principal de la planta es agua con trazas de acetaldehído y etanol que es fácilmente tratable antes de ser expulsado al medio ambiente y no se emiten gases contaminantes en este proceso.

La elección de la ruta química para la producción del acetaldehído depende principalmente de la disponibilidad y el precio de la materia prima. Al ser Colombia un gran productor de bioetanol, es conveniente deshidrogenarlo para además obtener hidrógeno de alto valor agregado [10].

Las rutas químicas conocidas para producir acetaldehído incluyen: (1) deshidrogenación de etanol (2) oxidación de etanol, (3) hidratación de acetileno, (4) oxidación de etileno o proceso Hoechst, (5) vía biotecnológica, (6) gas de síntesis

como materia prima (7) oxidación de alcanos, entre otras. Con selectividades entre 90 y 100% y rendimientos entre 30% y 99%, siendo el 30% alcanzado a partir de gas de síntesis [9], [16]–[24].

Las temperaturas de reacción adecuadas según las investigaciones para la deshidrogenación de etanol están entre 255 – 285 °C, puesto que básicamente ocurre la reacción de producción de acetaldehído y no reacciones secundarias como las de producción de cronotaldehído, acetato de etilo, alcoholes superiores y etileno [17], [21], [25], [26].

Se han estudiado diferentes catalizadores para la deshidrogenación del etanol como sílica deshidratada [18], silicalita-1 [19], plata [21], cobre en ceniza de cascarilla de arroz [16], cobre suportado en SiO₂ [7], cromita de cobre o catalizador de Adkins [8], [17], [25], [27], óxidos metálicos con base de vanadio y molibdeno [9], entre otros. Generalmente se emplean catalizadores de cobre, puesto que con estos la reacción es rápida a temperaturas menores de 300 °C y en el caso de la cromita de cobre, por su inusual morfología se tiene un alto rendimiento respecto a otros catalizadores [25], [27]–[29]. Razones por las cuales se eligió utilizar cromita de cobre para el presente estudio.

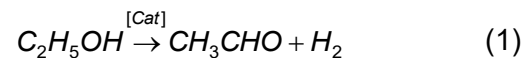
2. Descripción Del Proceso

La producción de acetaldehído e hidrógeno partió de etanol anhidro a 99.5% vol/vol que ingresó a una bomba centrífuga y después a un intercambiador de calor para alcanzar las condiciones de reacción necesarias. Luego se envió a un reactor isotérmico de lecho empacado fijo con cromita de cobre como catalizador. La salida de este se comprimió y enfrió para luego ingresar a un separador gas-líquido de donde en fase gaseosa, se obtuvo la corriente de hidrógeno que se acondicionó tanto en temperatura como en presión y corresponde a uno de los

productos. La fase líquida de este equipo se envió a una torre de destilación de platos perforados, de donde salieron dos corrientes de destilado que luego de llevarse a la temperatura y presión deseadas, se mezclaron formando la corriente de acetaldehído como producto final.

2.1. Cinética de reacción

La reacción de deshidrogenación de etanol (Ec. 1), cuya la cinética fue descrita por Peloso, Moresi, Mustachi, & Soracco (1979) quienes utilizaron un catalizador no suportado de cobre con cromita CuO-Cr₂O₃ [25], se presenta a continuación:



$$R_A = \frac{k \cdot \left(p_A - p_R \cdot \frac{p_S}{K_E} \right)}{\left(1 + K_A \cdot p_A + K_{RS} \cdot p_R \right)^2} \quad (2)$$

Donde:

K_e : constante de equilibrio (atm)
 K : constante de velocidad de reacción homogénea (mol/s.kg cat. atm)
 p_i : presiones parciales (atm)
 K_i : coeficientes de adsorción (atm⁻¹)

Estos valores están dados por las siguientes ecuaciones:

$$K_e = 11.820 - 6189.1/T \quad (3)$$

$$k = 17.900 - 5810.5/T \quad (4)$$

$$K_A = -1.175 + 1166.6/T \quad (5)$$

$$K_{RS} = 1.057 - 690.2/T \quad (6)$$

Los subíndices A, R y S se refieren a los compuestos etanol, hidrógeno y acetaldehído, respectivamente.

2.2. Catalizador

Las características del catalizador de cromita de cobre no soportado se especifican en la Tabla 1 [25].

*Acá va la Tabla 1 que aparece al final del artículo *

2.3. Condiciones de proceso

El reactor se operó a 285.00 °C y 451.26 kPa, valores reportados en la literatura como adecuados para el catalizador y condiciones en las cuales puede asumirse que sólo ocurre la reacción principal (Ec. 1) [17], [21], [25], [26], [28]

La presión de la salida del reactor y la temperatura a la entrada del flash se fijaron de tal forma que se tuviera una relación de compresión máxima de 4 y que se alcanzara una pureza de mínimo 99% mol-g/mol-g tanto para el acetaldehído como para el hidrógeno.

3. Simulación del proceso

3.1. Generalidades

Se utilizó Aspen Hysys® V8.4 para la simulación en estado estacionario. El modelo termodinámico empleado fue NRTL con fase vapor ideal y la estimación de los coeficientes fue con UNIFAQ VLE tanto para la corriente de proceso como para el refrigerante R717. El fluido térmico Dowtherm J se simuló con el modelo Peng Robinson.

3.2. Simulación

En la Figura 1 se presenta el diagrama de flujo del proceso. La alimentación líquida *F1* de etanol anhidro con composición de 98.41% mol-g/mol-g a 25.00°C y 101.32 kPa, entró a la bomba *P-100* y luego al intercambiador de calor de coraza y tubos

E-100 que utilizó Dowtherm J como fluido térmico, alcanzando finalmente las condiciones de reacción necesarias (285.00 °C, 451.26 kPa).

Aquí va la Figura 1 que se encuentra al final del artículo

Luego se envió al reactor isotérmico de lecho empacado fijo *R-100* con cromita de cobre como catalizador. Las dimensiones de este equipo se fijaron según el procedimiento descrito en Henao (2006) [30] para un volumen del reactor definido en 5 m³, un espesor de los tubos en 1.6 cm y un espaciado entre los tubos de 2 cm con disposición triangular, obteniéndose 9.33 m como longitud del reactor, 4.66 m como diámetro y 557 tubos. La longitud de estos fue 5 m, su diámetro 4.8x10⁻² m, su espesor 5x10⁻³ m y la fracción vacía fue de 0.5.

La salida del reactor *F4* ingresó al compresor *K-100* para alcanzar una presión de 1525.00 kPa y posteriormente al intercambiador de calor de coraza y tubos *E-101* con refrigerante R717 donde disminuyó su temperatura hasta -30 °C.

Posteriormente la corriente de proceso *F6* entró al separador gas-líquido *F-100*, cuyo diámetro y longitud correspondieron a los calculados con el método reportado por Henao (2006) [30] y sus valores fueron 0.53 m y 2.54 m, respectivamente.

La corriente *F7* que salió del separador gas-líquido ingresó a un tren de compresión y enfriamiento en los equipos *K-101*, *E-102*, *K102*, *E-103* y *E-108*, donde alcanzó una presión de 13828.82 kPa y una temperatura de 25.00 °C. En los intercambiadores de calor *E-102* y *E-103* se utilizó agua de enfriamiento y en el *E-108* refrigerante R717.

La corriente líquida *F8* proveniente del separador gas-líquido *F-100* ingresó al plato 13 de la torre de destilación *T-100* que tenía 26 platos perforados y

condensador parcial. Las corrientes de destilado $F10$ y $F11$, se comprimieron hasta 1069.50 kPa con el compresor $K-103$ y la bomba $P-101$, respectivamente.

La corriente $F14$ se enfrió en el intercambiador de calor $E-104$ con agua de enfriamiento hasta $35.13 \text{ }^\circ\text{C}$ y la corriente $F15$ se enfrió en $E-105$ hasta $35.08 \text{ }^\circ\text{C}$. Luego utilizando el refrigerante $R717$ en los intercambiadores de calor $E-106$ y $E-107$, ambas corrientes de destilado alcanzaron una temperatura de $10 \text{ }^\circ\text{C}$ y posteriormente se mezclaron obteniéndose la corriente de acetaldehído como producto.

Todos los intercambiadores de calor nombrados previamente fueron de coraza y tubos con cabezal flotante y una caída de presión de 62.05 kPa , tanto por la coraza como por los tubos

4. Costos Y Evaluación Financiera [30]

El proceso de producción de acetaldehído por deshidrogenación de etanol cuya simulación se describió en la sección anterior, fue evaluado económicamente según el método reportado por (Henao, 2006) [30]. En este a partir de las características de los equipos se calculó el costo de capital, el de operación y se realizó el flujo de caja. La información de los equipos necesaria para aplicar este procedimiento se encuentra en la Tabla 2, donde SS es acero inoxidable y CS acero al carbón.

*Acá va la Tabla 2 que aparece al final del artículo *

4.1. Costo de capital

Para calcular el costo de capital o inversión de capital fijo (ICF) se extrajeron del Apéndice B [30] los valores de los parámetros correspondientes a las características presentadas en la Tabla 2.

El ICF para la construcción de esta planta completamente nueva se determinó a partir de (Ec. 7).

$$ICF = C_{MT} + 0.35 \cdot \sum_k^{NEq} C_{M(k)}^0 \quad (7)$$

Donde el costo modular total (C_{MT}) nuevas se halló mediante la ecuación:

$$C_{MT} = 1.18 \cdot \sum_{k=1}^{NEq} C_{M(k)} \quad (8)$$

El costo modular para cada equipo ($C_{M(k)}$) se calculó así:

$$C_{M(k)} = F_{CM(k)} C_{Eq(k)}^0 \quad (9)$$

El costo de adquisición de referencia de cada equipo (C_{Eq}^0) se determinó con la siguiente ecuación:

$$\log_{10}(C_{Eq(k)}^0) = K_{1(k)} + K_{2(k)} \cdot \log_{10}(A_k) + K_{3(k)} \cdot (\log_{10}(A_k))^2 \quad (10)$$

Siendo A_k la capacidad o atributo del equipo.

Las constantes $K_{1(k)}$, $K_{2(k)}$ y $K_{3(k)}$ se tomaron del Apéndice A [30].

Para calcular el costo de adquisición actualizado ($C_{Eq(k)}^0(2)$) que permite corregir por inflación cualquier estimativo del costo de adquisición de un equipo, se utilizó el índice de precios llamado Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI) como se aprecia a continuación:

$$C_{Eq(k)}^0(2) = C_{Eq(k)}^0(1) \cdot \frac{IP_{(2)}}{IP_{(1)}} \quad (11)$$

En donde $IP_{(1)}$ es el índice de precios para el año 1996 con un valor de 381.7 y $IP_{(2)}$ es el índice de precios actual correspondiente al año 2013 igual a 567.3 [31], [32].

El factor de costo modular ($F_{CM(k)}$) presente en (Ec. 9) se halló a partir de la siguiente ecuación:

$$F_{CM(k)} = B_{1(k)} + B_{2(k)} \cdot F_{P(k)} \cdot F_{M(k)} \quad (12)$$

Las constantes $B_{1(k)}$, $B_{2(k)}$ para diferentes equipos se extrajeron del Apéndice A [30].

El factor de material ($F_{M(k)}$) para los diferentes materiales reportados en la Tabla 2 se encontró en el Apéndice A [30].

El factor de presión ($F_{P(k)}$) se determinó de las ecuaciones presentadas a continuación para cada tipo de equipo.

Para bombas y compresores se utilizó:

$$F_{R(k)} = \frac{C_{1(k)} + C_{2(k)} \times \log_{10}(P_k)^{\frac{5}{\sigma}}}{\frac{C_{1(k)}}{\sigma} + C_{3(k)} \times (\log_{10}(P_k))^2} \quad (13)$$

Para intercambiadores de calor se empleó:

$$\log_{10}(F_{P(k)}) = \left(\frac{C_{1(k)} + C_{2(k)} \cdot \log_{10}(P_k)}{C_{3(k)} \cdot (\log_{10}(P_k))^2} \right) \quad (14)$$

Y para tanques de proceso se calculó con esta expresión:

$$F_{R(k)} = \frac{0.5146 + 0.6838 \times \log_{10}(P_k)^{\frac{5}{\sigma}}}{\frac{C_{1(k)}}{\sigma} + 0.2970 \times (\log_{10}(P_k))^2} \quad (15)$$

$$\frac{C_{1(k)}}{\sigma} + 0.0235 \times (\log_{10}(P_k))^6$$

$$\frac{C_{1(k)}}{\sigma} + 0.0020 \times (\log_{10}(P_k))^8$$

Las constantes $C_{1(k)}$, $C_{2(k)}$ y $C_{3(k)}$ se tomaron del Apéndice A [30].

Para determinar el costo modular de referencia ($C_{M(k)}^0$) involucrado en (Ec. 7) se utilizó la siguiente ecuación:

$$C_{M(k)}^0 = F_{CM(k)}^0 \cdot C_{Eq(k)}^0 \quad (16)$$

Donde el costo modular de referencia ($F_{CM(k)}^0$) se calculó a partir de los parámetros determinados anteriormente, así:

$$F_{CM(k)}^0 = B_{1(k)} + B_{2(k)} \quad (17)$$

4.2. Costos operativos

El costo operativo total sin incluir la depreciación (COT_d) se calculó a partir de la suma de los costos variables, los costos fijos y los gastos generales mediante la siguiente ecuación:

$$COT_d = \left(\frac{2.73 \cdot (C_{MOO}) + 0.18 \cdot (ICF)}{+ 1.23 \cdot (C_{MP} + C_{TR} + C_{SI})} \right) \quad (18)$$

El costo de las materias primas (C_{MP}) se determinó de la siguiente manera:

$$C_{MP} = \sum_K F_{MP(k)} \cdot P_{MP(k)} \quad (19)$$

Donde para cada materia prima alimentada a la planta, $F_{MP(k)}$ corresponde al flujo anual y $P_{MP(k)}$ al precio por unidad.

Se asumió que el catalizador cromita de cobre debe reemplazarse a los 5 años de operación.

El costo de tratamiento de residuos (C_{TR}) se calculó así:

$$C_{TR} = \sum_K F_{R(k)} \cdot P_{TR(k)} \quad (20)$$

Siendo $F_{R(k)}$ el flujo anual de cada residuo, el decir el flujo de la corriente F_{12} y $P_{TR(k)}$ el precio de tratar este residuo.

El costo de los servicios industriales se halló con la fórmula a continuación:

$$C_{SI} = \sum_K Q_{SI(k)} \cdot P_{SI(k)} \quad (21)$$

Donde para cada servicio industrial, $Q_{SI(k)}$ corresponde a la cantidad anual y $P_{SI(k)}$ al precio por unidad.

Se asumió que el los servicios Dowtherm J y el refrigerantes R717 se deben reemplazar cada 6 años y el agua de enfriamiento a los 10 años.

El costo de mano de obra operativa (C_{MOO}) se determinó así:

$$C_{MOO} = N_{OP} \cdot S_{OF} \quad (22)$$

Siendo N_{OP} el número de operadores que trabajan de tiempo completo para mantener la planta operando y S_{OP} el salario anual promedio por operador.

N_{OP} se calculó de la siguiente manera:

$$N_{OP} = \frac{L_Y}{L_{Y(OP)}} \quad (23)$$

Donde $L_{Y(OP)}$ es la cantidad de trabajo operativo que un operador realiza durante un año y se asumió como 300, es decir, 6 turnos por semana durante 50 semanas.

La cantidad de trabajo operativo para mantener en funcionamiento un equipo del tipo "k" durante un año (L_Y) se calculó a partir de la ecuación presentada a continuación:

$$L_Y = \tau_Y \cdot L_s \quad (24)$$

El número de turnos de operación de la planta durante un año (τ_s) se asumió como 1041, valor correspondiente a tres turnos diarios.

Para cuantificar la cantidad total de trabajo necesario para operar la planta (L_s) se utilizó la siguiente ecuación:

$$L_s = \sum_K L_{s(k)} \cdot N_k \quad (25)$$

En donde $L_{s(k)}$ es la cantidad de trabajo operativo para mantener en funcionamiento un equipo del tipo "k"

durante un turno y se extrajo de la Tabla 5-7 (Hena, 2006) para cada equipo.

N_k es el número de equipos del tipo "k" que existen en la planta.

4.3. Evaluación financiera

Se realizó el estudio de la rentabilidad de la planta a partir de los parámetros valor presente neto (VPN) y la tasa interna de retorno (TIR) calculados con los flujos de caja, para un período de operación (N_{op}) de 12 años y un período pre-operativo (N_{pre}) de 2 años.

Inicialmente se halló la inversión de capital de la planta sin incluir el terreno (ICF_L) y el costo del terreno (L), así:

$$ICF_L = C_{MT} + 0.25 \cdot \sum_K C^0_{M(k)} \quad (26)$$

$$L = 0.1 \cdot \sum_K C^0_{M(k)} \quad (27)$$

El valor de C_{MT} corresponde a la (Ec. 8) y $C^0_{M(k)}$ se calculó de manera análoga a (Ec. 10).

Posteriormente se determinó la inversión de capital fijo por período o año $ICF_{(n)}$ para el N_{pre} de la siguiente forma:

$$ICF_{(0)} = L \quad (28)$$

$$ICF_{(1)} = 0.6 \cdot ICF_L \quad (29)$$

$$ICF_{(2)} = 0.4 \cdot ICF_L \quad (20)$$

Luego se determinó el salvamento para el último año ($S_{(N_{pre} + N_{op})}$) como se expresa a continuación:

$$S_{(N_{pre} + N_{op})} = 0.1 \cdot ICF_L \quad (31)$$

El valor que se recuperará por la venta la de la planta (L_n) en el último período se calculó de manera análoga a (Ec.27), así:

$$L_{(n)} = L_{(N_{pre} + N_{op})} = 0.1 \cdot \sum_K C^0 M(k) \quad (32)$$

Con la información obtenida se calculó para cada año el costo operativo total de la planta sin incluir depreciación ($COT_{d(n)}$) y el costo por depreciación de (C_{Dep}) con la siguiente expresión:

$$COT_{d(n)} = COT_d \quad (33)$$

$$C_{Dep(n)} = \frac{ICFL - S}{N_{PV}} \quad (34)$$

Con $n = (N_{pre} + 1), \dots, (N_{pre} + N_{op})$ y un número de años de vida del proyecto igual a 10 (N_{PV}).

Adicionalmente se halló el ingreso por ventas ($V_{(n)}$) suponiendo que era posible vender toda la producción de la siguiente manera:

$$V_{(n)} = \sum_K F_{Prod(k)(n)} \cdot P_{Prod(k)} \quad (35)$$

Donde:

$F_{prod(k)(n)}$: flujo anual de cada uno de los productos, es decir, del acetaldehído y del hidrógeno y $P_{prod(k)}$ su precio.

Luego se calculó el pago de impuestos a la renta para cada período ($C_{imp(n)}$) excluyendo los períodos pre-operativos, como se expresa a continuación:

$$C_{imp(n)} = (V_{(n)} - COT_{d(n)} - D_{Dep(n)}) \cdot TI \quad (35)$$

$$\text{para } V_{(n)} > (COT_{d(n)} + C_{Dep(n)})$$

Con una tasa de impuestos (TI) del 35% para $V_{(n)} > (COT_{d(n)} + C_{Dep(n)})$ con $n = (N_{pre} + 1), \dots, (N_{pre} + N_{op})$.

Se procedió después a determinar el capital de trabajo requerido ($WC_{Req(n)}$) y el recuperado ($WC_{Rec(n)}$) con las ecuaciones que se presentan a continuación:

$$WC_{Req(N_{pre})} = 0.2 \cdot ICF_L \quad (36)$$

$$WC_{Rec(N_{pre} + N_{op})} = 0.2 \cdot ICF_L \quad (37)$$

Luego se totalizó el efecto de $V_{(n)}$, $COT_{d(n)}$, $C_{imp(n)}$, $ICF_{(n)}$, $S_{(n)}$, $L_{(n)}$, $WC_{Req(n)}$ y $WC_{Rec(n)}$, obteniéndose el flujo de caja ($FC_{(n)}$) para cada período con la siguiente ecuación:

$$FC_{(n)} = \begin{pmatrix} V_{(n)} - COT_{d(n)} - C_{imp(n)} \\ -ICF_{L(n)} + S_{(n)} + L_{(n)} \\ -WC_{Req(n)} + WC_{Rec(n)} \end{pmatrix} \quad (38)$$

Posteriormente se procedió a calcular el VPN así:

$$VPN = \sum_{n=0}^{(N_{pre} + N_{op})} FC_n \cdot (1+i)^{-n} \quad (39)$$

Donde i es la tasa de descuento que se asumió igual a 29%.

Finalmente se calculó la tasa interna de retorno (TIR) que condujo a que la siguiente ecuación fuera igual a cero.

$$0 = \sum_{n=0}^{(N_{pre} + N_{op})} FC_n \cdot (1+TIR)^{-n} \quad (40)$$

5. Resultados y discusión

Las condiciones de las corrientes del proceso de producción de acetaldehído por deshidrogenación de etanol, simulado en estado estacionario en *Aspen Hysys*® V8.4, se presentan en la Tabla 3. Aquí se aprecia que se obtuvo 334.36 Kgmol/h al 99.36% mol-g/mol-g de acetaldehído a 945.40 kPa y 10.03 °C como producto principal y 336.03 Kgmol/h al 99.34% mol-g/mol-g de hidrógeno a 13828.82 kPa y 25.00 °C como subproducto. Lo que indica que se cumplió los requerimientos de pureza que eran de 99% mol-g/mol-g para cada producto.

Acá va la Tabla 3 que se encuentra al final del artículo

El efluente de la planta que corresponde a la corriente F12. Cumplió la regulación ambiental del proyecto de normas de vertimientos referente a los decretos 1494 de 1994 y 3930 de 2010, para la máxima carga contaminante permitida en descarga de las aguas residuales de las industrias manufactureras cuyo valor es de 20ppm [33].

La conversión global y de un solo paso (X), se determinó con (Ec.40) y su resultado fue de 99.95%, valor bastante alto y superior a los encontrados en la literatura consultada, como es el caso de la Universidad West Virginia que reportó 60.8% [23] y de Carotenuto (2012) con máximo 70.63% [8] para la producción de acetaldehído por deshidrogenación de etanol.

$$X(\%) = \frac{(F3_{\text{etanol}} - F4_{\text{etanol}})}{F3_{\text{etanol}}} \cdot 100 \quad (40)$$

El rendimiento para el acetaldehído fue de 99.28% y para el hidrógeno de 99.76%. Los resultados de la Universidad West Virginia fueron 76.69% y 87.08%, respectivamente[23] y según Eliasson (2010) el rendimiento para el acetaldehído producido por oxidación de etanol fue de 93%. Valores inferiores a los obtenidos con el presente estudio [34].

En la Tabla 4 se reportan las condiciones del servicio de calentamiento y los de enfriamiento. El 16.20% del consumo total de estos servicios fue para calentar la corriente de entrada al reactor y el resto para enfriar las corrientes de proceso en las etapas posteriores.

Acá va la Tabla 4 que se encuentra al final del artículo

Luego de aplicar el procedimiento descrito previamente realizar la evaluación económica y financiera se determinó el costo de capital (ICF), que tuvo un valor

de 26,556,842.95 USD y se presenta en la Tabla 5.

Acá va la Tabla 5 que se encuentra al final del artículo

Se prosiguió con el cálculo del costo operativo de la planta sin depreciación (COT_d) obteniéndose un monto de 249,894,338.62 USD, una depreciación (C_{Dep}) de 2,316,419.09 USD y unos ingresos por ventas de los productos (V) de 203,908,237.02 USD. Estos valores pueden apreciarse en la Tabla 6.

Acá va la Tabla 6 que se encuentra al final del artículo

Al elaborar el flujo de caja se apreció que V fue inferior al COT_d en un 18.40%, obteniéndose un VPN negativo de 70,708,370 USD. Lo que indica que la planta no es rentable. En la Tabla 7 se encuentran este resultado.

Acá va la Tabla 7 que se encuentra al final del artículo

A partir de las Tablas 5, 6 y 7 se dedujo que el principal factor que influye para que la planta no sea rentable es el costo de la solución de etanol, puesto que corresponde a un 46.53 % del COT_d.

En caso que se disminuyera el costo de esta materia prima a 0.48 USD/kg, la planta sería rentable tal como se aprecia en las Tablas 8 y 9, obteniéndose un VPN de 9,506,968 USD/kg y una TIR de 42%.

Acá va las Tablas 8 y 9 que se encuentran al final del artículo

6. Conclusiones

Con la simulación en estado estacionario en Aspen Hysys ® V8.4 se obtuvo acetaldehído al 99.36% mol-g/mol-g e hidrógeno al 99.34% mol-g/mol-g, cumpliéndose el requerimiento de pureza para ambos productos de 99% mol-g/mol-g.

Se alcanzó una conversión del reactor de 99.95%. Los rendimientos para el acetaldehído y el hidrógeno fueron de 99.28% y 99.76%, respectivamente. Valores considerablemente altos y que incluso fueron superiores a los reportados en la literatura consultada. Esto indica que las condiciones de reacción tomadas de la literatura fueron adecuadas y que el catalizador no soportado de cromita de cobre tuvo un buen desempeño.

La producción de acetaldehído por deshidrogenación de etanol en Colombia sería rentable siempre y cuando el costo de adquisición del etanol anhidro lo permitiera, puesto que éste influye de manera significativa en los costos de operación. En el caso específico que se comprara el etanol anhidro a 0.48 USD/kg, la planta tendría una ganancia de 9,506,968 USD/kg y una TIR de 42%, mientras que si se adquiriera a 0.9 USD/kg la planta no sería rentable y se tendría una pérdida de 70,708,370 USD. La adquisición a un bajo costo de esta materia prima sería posible por ejemplo si el proceso productivo se integrara a la refinería de etanol.

A partir del estudio se puede afirmar que el proyecto tiene un buen potencial implementación, como planta productora de químicos a partir de biomasa, que además produce una fuente renovable de energía como es el hidrógeno. Situación que tendría un impacto positivo en el medio ambiente.

Referencias

- [1] P. Knox, J. Agnew, L. Angeles, and L. Mccarthy, *The geography of the world*, Sexta. Routledge, 2014, pp. 35, 40.
- [2] C. Haub and M. Yanagisita, "Population Reference Bureau," Washington DC, 2014.
- [3] M. Ni, D. Y. C. Leung, and M. K. H. Leung, "A review on reforming bio-ethanol for hydrogen production," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 32, no. 15, pp. 3238–3247, Oct. 2007.
- [4] P. D. Vaidya and A. E. Rodrigues, "Insight into steam reforming of ethanol to produce hydrogen for fuel cells," *Chem. Eng. J.*, vol. 117, no. 1, pp. 39–49, Mar. 2006.
- [5] Asocaña, "Sector Azucarero Colombiano asocaña," 2014.
- [6] J. M. Urbanchuk, "Contribution of biofuels to the global economy," pp. 1–24, 2012.
- [7] I. C. Freitas, S. Damyanova, D. C. Oliveira, C. M. P. Marques, and J. M. C. Bueno, "Effect of Cu content on the surface and catalytic properties of Cu/ZrO₂ catalyst for ethanol dehydrogenation," *J. Mol. Catal. A Chem.*, vol. 381, pp. 26–37, Jan. 2014.
- [8] G. Carotenuto, R. Tesser, M. Di Serio, and E. Santacesaria, "Kinetic study of ethanol dehydrogenation to ethyl acetate promoted by a copper/copper-chromite based catalyst," *Catal. Today*, vol. 203, pp. 202–210, Mar. 2013.
- [9] T. Takei, N. Iguchi, and M. Haruta, "Synthesis of Acetoaldehyde, Acetic Acid, and Others by the Dehydrogenation and Oxidation of Ethanol," *Catal. Surv. from Asia*, vol. 15, no. 2, pp. 80–88, Mar. 2011.
- [10] L. Landau, "Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Acetaldehyde," *Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki*. Wiley-VCH, pp. 1–17, 1937.
- [11] W. E. Luttrell, "Acetaldehyde," *J. Chem. Heal. Saf.*, vol. 16, no. 5, pp. 43–44, Sep. 2009.
- [12] T. M. Research., "Transparency Market Research. Acetaldehyde Market - Global Industry Analysis , Size , Share , Growth , Trends And Forecast , 2012," 2012. [Online]. Disponible:

- <http://www.transparencymarketresearch.com/acetaldehyde-market.html>. [Consultado: 12-Feb-2014].
- [13] W. W. Clark and J. Rifkin, "A green hydrogen economy," *Energy Policy*, vol. 34, no. 17, pp. 2630–2639, Nov. 2006.
- [14] S. Dunn, "Hydrogen futures: toward a sustainable energy system," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 27, pp. 235–264, 2002.
- [15] United States Department of Energy, "Report of the Hydrogen Production Expert Panel : A Subcommittee of the Hydrogen & Fuel Cell Technical Advisory Committee," Washington DC, 2013.
- [16] F.-W. Chang, W.-Y. Kuo, and K.-C. Lee, "Dehydrogenation of ethanol over copper catalysts on rice husk ash prepared by incipient wetness impregnation," *Appl. Catal. A Gen.*, vol. 246, no. 2, pp. 253–264, Jun. 2003.
- [17] J. Franckaerts and G. Froment, "Kinetic study of the dehydrogenation of ethanol," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 19, pp. 807–818, 1964.
- [18] Y. Matsumura, K. Hashimoto, and S. Yoshida, "Selective dehydrogenation of ethanol over highly dehydrated silica," *J. Catal.*, vol. 143, pp. 135–143, 1989.
- [19] Y. Matsumura, K. Hashimoto, and S. Yoshida, "Selective dehydrogenation of ethanol to acetaldehyde over silicalite-1," *J. Catal.*, vol. 361, pp. 352–361, 1990.
- [20] Y. Guan and E. J. M. Hensen, "Selective oxidation of ethanol to acetaldehyde by Au–Ir catalysts," *J. Catal.*, vol. 305, pp. 135–145, Sep. 2013.
- [21] K. Weissermel and H.-J. Arpe, *Industrial organic chemistry*, Tercera. Nueva York: VCH A Wiley Company, 1997, pp. 163–168.
- [22] T. Kobayashi, "Selective oxidation of light alkanes to aldehydes over silica catalysts supporting mononuclear active sites—acrolein formation from ethane," *Catal. today*, vol. 71, pp. 69–76, 2001.
- [23] West Virginia University, "Acetaldehyde Production by Ethanol Dehydrogenation." [Online]. Disponible: http://www.che.cemr.wvu.edu/publications/projects/large_proj/Acetaldehyde.PDF. [Consultado: 20-Sep-2014].
- [24] K. Takehira, T. Komatsu, N. Sakai, H. Kajioka, S. Hamakawa, T. Shishido, T. Kawabata, and K. Takaki, "Oxidation of C2–C4 hydrocarbons over MoO3 and V2O5 supported on a YSZ-aided membrane reactor," *Appl. Catal. A Gen.*, vol. 273, no. 1–2, pp. 133–141, Oct. 2004.
- [25] A. Peloso, M. Moresi, C. Mustachi, and B. Soracco, "Kinetics of the dehydrogenation of ethanol to acetaldehyde on unsupported catalysts," *Can. J. ...*, vol. 57, 1979.
- [26] J. P. Marcinkowsky, Arthur E; Henry S, "Catalytic dehydrogenation of ethanol for the production of acetaldehyde and acetic acid. U.S. Patent," 4,220,803.
- [27] H. Adkins and R. Connor, "The catalytic hydrogenation of organic compounds over copper chromite," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 1046, no. 1930, pp. 1091–1095, 1931.
- [28] F. Mariño, G. Baronetti, M. Jobbagy, and M. Laborde, "Cu-Ni-K / -Al2O3 supported catalysts for ethanol steam reforming Formation of hydrotalcite-type compounds as a result of metal – support interaction," *Appl Catal A Gen*, vol. 238, pp. 41–54, 2003.

- [29] R. Prasad, "Highly active copper chromite catalyst produced by thermal decomposition of ammoniac copper oxalate chromate," *Mater. Lett.*, vol. 59, no. 29–30, pp. 3945–3949, Dec. 2005.
- [30] C. Henao, *Simulación y evaluación de procesos químicos*, 1st ed. Medellín: Editorial Universidad Pontificia Bolivariana, 2006, pp. 4.5–4.13, 5.2–5.45, 1–13.
- [31] Norwegian University of Science and Technology, "Chemical Engineering Plant Cost Index," 2011. [Online]. Disponible: http://www.nt.ntnu.no/users//magn_ehi/cepci_2011_py.pdf. [Consultado: 29-Oct-2014].
- [32] P. Watch, "Economic Indicators," *Chem. Eng.*, vol. 112, no. 6, pp. 59–61, 2014.
- [33] J. G. U. Vegalara, C. A. Álvarez, and K. Romero, *Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible*. Colombia, 2012, p. 80.
- [34] J. Eliasson, "Design of an Plant for Manufacturing of Acetaldehyde," no. Marzo, p. 4, 2010.

Figura 1

Diagrama de flujo del proceso para la producción de acetaldehído e hidrógeno en estado estacionario simulado en Aspen Hysys®

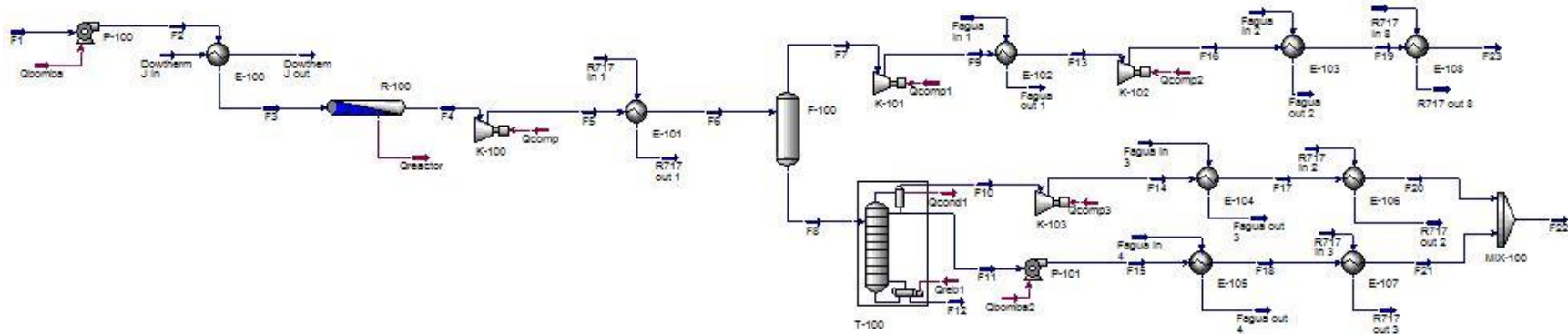


Tabla 1
Especificaciones del catalizador no soportado de cromita de cobre

Característica	Valor
Diámetro	$3.5 \times 10^{-3} \text{ m}$
Esfericidad	1
Densidad del sólido	4300 kg/m^3
Capacidad calorífica del sólido	$250 \text{ kJ/kg}^\circ\text{C}$

Tabla 2
Características de los equipos de la planta de producción de acetaldehído por
deshidrogenación de etanol.

Equipo	Tipo	Material	Cantidad	Atributo		Presión operativa (barg)	
				Capacidad			
Bomba P-100	Centrífuga	Hierro fundido	1	P (kW)	3.00	4.12	
Bomba P-101	Centrífuga	SS	1	P (kW)	1.92	9.68	
Compresor K-100	Centrífugo	SS	1	P (kW)	1780.00	14.24	
Compresor K-101	Centrífugo	SS	1	P (kW)	338.40	44.49	
Compresor K-102	Centrífugo	SS	1	P (kW)	428.10	138.52	
Compresor K-103	Centrífugo	SS	1	P (kW)	12.35	9.68	
Intercambiador E-100	Cabeza flotante	SS tubos/CS coraza	1	A (m ²)	60.32	4.12	
Intercambiador E-101	Cabeza flotante	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	60.32	14.24	
Intercambiador E-102	Cabeza flotante	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	60.32	44.49	
Intercambiador E-103	Cabeza flotante	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	60.32	138.52	
Intercambiador E-104	Cabeza flotante	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	60.32	9.68	
Intercambiador E-105	Cabeza flotante	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	60.32	9.68	
Intercambiador E-106	Cabeza flotante	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	60.32	9.06	
Intercambiador E-107	Cabeza flotante	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	60.32	9.06	
Intercambiador E-108	Cabeza flotante	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	60.32	137.90	
Rehervidor T-100	Kettle	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	8.94	6.99	
Condensador T-100	Cabeza flotante	CS tubos/SS coraza	1	A (m ²)	8.94	6.99	
Reactor R-100	PFR vertical	SS	1	L (m)	9.33	D (m) 4.66	3.50
Flash F-100	Vertical	SS	1	L (m)	2.64	D (m) 0.53	13.62
Torre destilación T-100	Platos	SS	1	L (m)	15.85	D (m) 1.52	13.62
Platos torre T-100	Perforados	SS	26	D (m)	1.52		----

Tabla 3

Condiciones de las corrientes del proceso de producción de acetaldehído por deshidrogenación de etanol simulado en estado estacionario en Aspen Hysys® V8.4

Corriente	Fracción de vapor	Temperatura (°C)	Presión (kPa)	Flujo molar	Flujo másico (kg/h)	Composición (fracción molar)			
						Hidrógeno	Acetaldehído	Etanol	Agua
F1	0.00000	25.00	101.32	340.00	15512.52	0.00000	0.00000	0.98414	0.01586
F2	0.00000	25.21	513.76	340.00	15512.52	0.00000	0.00000	0.98414	0.01586
F3	1.00000	285.00	451.26	340.00	15512.52	0.00000	0.00000	0.98414	0.01586
F4	1.00000	285.00	381.26	674.44	15512.55	0.49588	0.49588	0.00025	0.00799
F5	1.00000	445.73	1525.00	674.44	15512.55	0.49588	0.49588	0.00025	0.00799
F6	0.49823	-30.00	1462.95	674.44	15512.55	0.49588	0.49588	0.00025	0.00799
F7	1.00000	-30.00	1462.95	336.03	771.06	0.99337	0.00662	0.00000	0.00001
F8	0.00000	-30.00	1462.95	338.41	14741.49	0.00189	0.98169	0.00050	0.01592
F9	1.00000	96.69	4550.54	336.03	771.06	0.99337	0.00662	0.00000	0.00001
F10	1.00000	87.13	800.00	37.60	1626.85	0.01660	0.98019	0.00000	0.00321
F11	0.00000	87.13	800.00	296.77	13036.80	0.00006	0.99525	0.00000	0.00469
F12	0.00000	161.30	820.00	4.05	77.84	0.00000	0.00398	0.09905	0.89697
F13	1.00000	35.03	4488.49	336.03	771.06	0.99337	0.00662	0.00000	0.00001
F14	1.00000	106.22	1069.50	37.60	1626.85	0.01660	0.98019	0.00000	0.00321
F15	0.00000	87.33	1069.50	296.77	13036.80	0.00006	0.99525	0.00000	0.00469
F16	1.00000	193.85	13952.92	336.03	771.06	0.99337	0.00662	0.00000	0.00001
F17	0.01722	35.13	1007.45	37.60	1626.85	0.01660	0.98019	0.00000	0.00321
F18	0.00000	35.08	1007.45	296.77	13036.80	0.00006	0.99525	0.00000	0.00469
F19	1.00000	35.04	13890.87	336.03	771.06	0.99337	0.00662	0.00000	0.00001
F20	0.01583	10.00	945.40	37.60	1626.85	0.01660	0.98019	0.00000	0.00321
F21	0.00000	10.00	945.40	296.77	13036.80	0.00006	0.99525	0.00000	0.00469
F22	0.00000	10.03	945.40	334.36	14663.65	0.00192	0.99356	0.00000	0.00452
F23	1.00000	25.00	13828.82	336.03	771.06	0.99337	0.00662	0.00000	0.00001

Tabla 4

Condiciones de las corrientes de servicios industriales del proceso de producción de acetaldehído por deshidrogenación de etanol simulado en estado estacionario en Aspen Hysys® V8.4

Corriente	Fracción de vapor	Temperatura (°C)	Presión (kPa)	Flujo molar (kgmol/h)	Flujo másico (kg/h)	Composición (fracción molar)		
						R717	Dowtherm J	Agua
Fagua in 1	0.00000	25.00	101.32	782.00	14087.81	0.0000	0.0000	1.0000
Fagua in 2	0.00000	25.00	101.33	2025.00	36480.58	0.0000	0.0000	1.0000
Fagua in 3	0.00000	25.00	101.33	1423.90	25651.70	0.0000	0.0000	1.0000
Fagua in 4	0.00000	25.00	101.33	2206.00	39741.31	0.0000	0.0000	1.0000
Fagua out 1	0.00000	35.00	39.27	782.00	14087.81	0.0000	0.0000	1.0000
Fagua out 2	0.00000	35.00	39.28	2025.00	36480.58	0.0000	0.0000	1.0000
Fagua out 3	0.00000	35.00	39.27	1423.90	25651.70	0.0000	0.0000	1.0000
Fagua out 4	0.00000	35.00	39.27	2206.00	39741.31	0.0000	0.0000	1.0000
R717 in 1	0.00000	-40.11	71.02	988.50	16834.45	1.0000	0.0000	0.0000
R717 in 2	0.00000	-40.11	71.02	4.00	68.13	1.0000	0.0000	0.0000
R717 in 3	0.00000	-40.11	71.02	31.33	533.56	1.0000	0.0000	0.0000
R717 in 8	0.00000	-40.11	71.02	4.05	68.97	1.0000	0.0000	0.0000
R717 out 1	1.00000	92.44	8.96	988.50	16834.45	1.0000	0.0000	0.0000
R717 out 2	1.00000	25.06	8.97	4.00	68.13	1.0000	0.0000	0.0000
R717 out 3	1.00000	24.99	8.97	31.33	533.56	1.0000	0.0000	0.0000
R717 out 8	1.00000	24.97	8.97	4.05	68.97	1.0000	0.0000	0.0000
Dowtherm J out	0	35.37	38.82	178.30	25810.71	0.0000	1.0000	0.0000
Dowtherm J in	1.00000	315.00	101.32	178.30	25810.71	0.0000	1.0000	0.0000

Tabla 5

Costos de capital de la planta de producción de acetaldehído por deshidrogenación de etanol.

Bombas																						
	FM	$F_P=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2$						$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$				
		C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅	P [barg]	F _P	B ₁	B ₂	F _{CM}	F _{CM} ⁰	K ₁	K ₂	K ₃	A	IP _{Ref}	IP _{Act}	C _{Eq} ⁰	C _M	C _M ⁰	
Bomba P-100	1	0.1682	0.3477	0.4841	--	--	4.124	0.565	1.8	1.51	2.654	3.310	3.5793	0.3208	0.0285	3.00	381.7	567.3	8,144.95 USD	21,615.60 USD	26,959.80 USD	
Bomba P-101	2.4	0.1682	0.3477	0.4841	--	--	9.682	0.982	1.8	1.51	5.357	3.310	3.5793	0.3208	0.0285	1.92	381.7	567.3	6,995.03 USD	37,474.91 USD	23,153.55 USD	
Compresor K-100	2.52	--	--	--	--	--	14.237	1.000	0	2.5	6.300	2.500	2.9945	0.9542	0	1780.00	381.7	567.3	1,854,135.16 USD	11,681,051.52 USD	4,635,337.90 USD	
Compresor K-101	2.52	--	--	--	--	--	44.492	1.000	0	2.5	6.300	2.500	2.9945	0.9542	0	338.40	381.7	567.3	380,340.93 USD	2,396,147.88 USD	950,852.33 USD	
Compresor K-102	2.52	--	--	--	--	--	138.516	1.000	0	2.5	6.300	2.500	2.9945	0.9542	0	428.10	381.7	567.3	476,004.52 USD	2,998,828.50 USD	1,190,011.31 USD	
Compresor K-103	2.52	--	--	--	--	--	9.682	1.000	0	2.5	6.300	2.500	2.9945	0.9542	0	12.35	381.7	567.3	16,153.22 USD	101,765.32 USD	40,383.06 USD	
Intercambiadores de calor																						
	FM	$F_P=\log_{10}(F_P)=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2$						$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$				
		C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅	P [barg]	F _P	B ₁	B ₂	F _{CM}	F _{CM} ⁰	K ₁	K ₂	K ₃	A	IP _{Ref}	IP _{Act}	C _{Eq} ⁰	C _M	C _M ⁰	
Intercambiador E-100	1	0	0	0	--	--	4.124	1.000	1.8	1.5	3.300	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	60.32	381.7	567.3	16,040.39 USD	52,933.28 USD	52,933.28 USD	
Intercambiador E-101	1.7	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	14.237	1.029	1.8	1.5	4.425	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	60.32	381.7	567.3	16,040.39 USD	70,977.67 USD	52,933.28 USD	
Intercambiador E-102	1.7	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	44.492	1.143	1.8	1.5	4.714	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	60.32	381.7	567.3	16,040.39 USD	75,607.19 USD	52,933.28 USD	
Intercambiador E-103	1.7	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	138.516	1.289	1.8	1.5	5.087	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	60.32	381.7	567.3	16,040.39 USD	81,592.45 USD	52,933.28 USD	
Intercambiador E-104	1.7	0	0	0	--	--	9.682	1.000	1.8	1.5	4.350	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	60.32	381.7	567.3	16,040.39 USD	69,775.69 USD	52,933.28 USD	
Intercambiador E-105	1.7	0	0	0	--	--	9.682	1.000	1.8	1.5	4.350	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	60.32	381.7	567.3	16,040.39 USD	69,775.69 USD	52,933.28 USD	
Intercambiador E-106	1.7	0	0	0	--	--	9.061	1.000	1.8	1.5	4.350	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	60.32	381.7	567.3	16,040.39 USD	69,775.69 USD	52,933.28 USD	
Intercambiador E-107	1.7	0	0	0	--	--	9.061	1.000	1.8	1.5	4.350	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	60.32	381.7	567.3	16,040.39 USD	69,775.69 USD	52,933.28 USD	
Intercambiador E-108	1.7	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	137.895	1.288	1.8	1.5	5.085	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	60.32	381.7	567.3	16,040.39 USD	81,565.63 USD	52,933.28 USD	
Rehervidor T-100	3	0	0	0	--	--	6.987	1.000	1.8	1.5	6.300	3.300	3.5638	0.1906	0.1107	8.94	381.7	567.3	10,409.60 USD	65,580.46 USD	34,351.67 USD	
Condensador T-100	3	0	0	0	--	--	6.987	1.000	1.8	1.5	1.800	3.300	3.4338	0.1445	0.1079	8.94	381.7	567.3	6,934.88 USD	12,482.79 USD	22,885.12 USD	
Recipientes a presión																						
	FM	$F_P=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2+C_4 \cdot (\log_{10}(P))^3+C_5 \cdot (\log_{10}(P))^4$						$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$				
		C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅	P [barg]	F _P	B ₁	B ₂	F _{CM}	F _{CM} ⁰	K ₁	K ₂	K ₃	A	IP _{Ref}	IP _{Act}	C _{Eq} ⁰	C _M	C _M ⁰	
Reactor	4	--	--	--	--	--	3.499	1.000	2.5	1.72	9.380	4.220	4.3919	0.2859	0.1842	9.33	381.7	567.3	103,381.43 USD	969,717.85 USD	436,269.65 USD	
Flash	4	--	--	--	--	--	13.616	1.727	2.5	1.72	14.385	4.220	3.4746	0.5893	0.2053	2.64	381.7	567.3	8,538.53 USD	122,828.17 USD	36,032.58 USD	
Torre destilación T-100	4	--	--	--	--	--	13.616	1.727	2.5	1.72	14.385	4.220	3.7559	0.6361	0.1069	15.85	381.7	567.3	70,026.59 USD	1,007,344.40 USD	295,512.20 USD	
Internos (Platos)																						
	FM	$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M$						$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot N \cdot Fq \cdot (K_1+K_2 \cdot A+K_3 \cdot A^2)$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$								
		C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅	P [barg]	F _P	B ₁	B ₂	F _{CM}	F _{CM} ⁰	Fq	N	K ₁	K ₂	K ₃	A	IP _{Ref}	IP _{Act}	C _{Eq} ⁰	C _M
Platos torre T-100	1	--	--	--	--	--	1	0	1.2	1.200	1.200	1	26	235	19.80	75.07	1.52	381.7	567.3	16,984.53 USD		
Costos totales																						
C_{MT}		23,690,857.41 USD																				
ICF		26,556,842.95 USD																				
L		818,853.01 USD																				
ICF_L		25,737,989.94 USD																				
										C_M=F_{CM}·C_{Eq}⁰												
										C_M⁰												
										20,381.43 USD												
										8,188,530.14 USD												

Tabla 6

Costos operativos de la planta de producción de acetaldehído por deshidrogenación de etanol con un costo de 0.9 USD/Kg de etanol anhidro

Costos de materias primas (C_{MP})			
Descripción	Consumo anual $F_{MP(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{MP(k)}$ [USD/kg]	$C_{MP(k)}$ [USD/año]
Solución etanol	129,188,238	0.90	116,269,413.98 USD
Catalizador	2,167	90	195,033.19 USD
Total C_{MP} [\$/año]			116,464,447.16 USD
Costos de tratamiento de residuos industriales (C_{TR})			
Tipo	Consumo anual $F_{R(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{TR(k)}$ [USD/kg]	$C_{TR(k)}$ [USD/año]
Aguas residuales	64,829	0.04088	2,650.08 USD
Total C_{TR} [\$/año]			2,650.08 USD
Costos de servicios industriales (C_{SI})			
Tipo	Consumo anual $F_{SI(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{SI(k)}$ [USD/kg]	$C_{SI(k)}$ [USD/año]
Dowtherm J	35,825,261	1.78	63,768,965.19 USD
Refrigerante R717	24,297,097	0.62	15,064,200.41 USD
Agua de enfriamiento	96,572,654	7.60791E-06	734.72 USD
Tipo	Consumo anual $F_{SI(k)}$ [kW.h/año]	Precio $P_{SI(k)}$ [USD/kW.h]	$C_{SI(k)}$ [USD/año]
Energía eléctrica	21,346,232	0.15	3,201,934.87 USD
Total C_{SI} [\$/año]			82,035,835.18 USD
Costos de mano de obra operativa (C_{MOO})			
Equipo	N_k	$L_{S(k)}$	$L_{S(k)} \cdot N_k$
Bombas	2	0.00	0.00
Intercambiadores	11	0.10	1.10
Compresor	4	0.00	0.00
Torre	1	0.35	0.35
Flash	1	0.00	0.00
Reactores	1	0.50	0.50
$L_S = SL_{S(k)} \cdot N_k$	1.9500	t_Y	1041
S_{Op}	50,000 USD	$L_{Y(Op)}$	300
N_{Op}	7	C_{MOO} [USD/año]	350,000 USD
Costos operativos sin depreciación y costo por depreciación			
COT_d	249,894,338.62 USD	C_{Dep}	2,316,419.09 USD
Ingreso por venta de productos (V)			
Tipo	Producción $F_{Prod(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{Prod(k)}$ [USD/kg]	$V_{(k)}$ [USD/año]
Hidrógeno	6754482.525	2.61	17,650,600.09 USD
Acetaldehído	128453542.7	1.45	186,257,636.93 USD
Total V [USD/año]			203,908,237.02 USD

Tabla 7

Cálculo de los flujos de caja, flujos de caja descontados y VPN de la planta de producción de acetaldehído con un costo de 0.9 USD/Kg de etanol anhidro

(n)	V _(n)	COT _{d(n)}	C _{Dep(n)}	C _{imp(n)}	ICF _(n)	S _(n) =0.1(ICF _L)	L _(n)	WC _{Req(n)}	WC _{Rec(n)}	FC _(n)	FC _(n) ·(1+i) ⁻ⁿ
0					\$ 818,853					\$ (818,853)	\$ (818,853)
1					\$15,442,794					\$ (15,442,794)	\$ (11,971,158)
2					\$ 5,147,598			\$ 5,147,598		\$ (10,295,196)	\$ (6,186,645)
3	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)						\$ (29,080,219)	\$ (13,546,545)
4	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)						\$ (29,080,219)	\$ (10,501,198)
5	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)						\$ (29,080,219)	\$ (8,140,463)
6	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)						\$ (29,080,219)	\$ (6,310,437)
7	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)						\$ (29,080,219)	\$ (4,891,811)
8	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)						\$ (29,080,219)	\$ (3,792,102)
9	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)						\$ (29,080,219)	\$ (2,939,614)
10	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)						\$ (20,539,969)	\$ (1,609,543)
11	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)						\$ (29,080,219)	\$ (1,766,489)
12	\$ 203,908,237	\$ 249,894,339	\$ 2,316,419	\$ (16,905,882)		\$ 2,573,799	\$ 818,853		\$ 5,147,598	\$ (20,539,969)	\$ (967,216)
										VPN	\$ (70,708,370)

Tasa de impuestos TI	35%
Tasa de descuento "i"	29%

Tabla 8

Costos operativos de la planta de producción de acetaldehído con un costo de 0.48 USD/Kg de etanol anhidro

Cálculo del costos operativos de la planta			
Costos de materias primas (C_{MP})			
Descripción	Consumo anual $F_{MP(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{MP(k)}$ [USD/kg]	$C_{MP(k)}$ [USD/año]
Solución etanol	129,188,238	0.48	61,943,164.05 USD
Catalizador	2,167	90	195,033.19 USD
Total C_{MP} [\$ /año]			62,138,197.24 USD
Costos de tratamiento de residuos industriales (C_{TR})			
Tipo	Consumo anual $F_{R(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{TR(k)}$ [USD/kg]	$C_{TR(k)}$ [USD/año]
Aguas residuales	64,829	0.04088	2,650.08 USD
Total C_{TR} [\$ /año]			2,650.08 USD
Costos de servicios industriales (C_{SI})			
Tipo	Consumo anual $F_{SI(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{SI(k)}$ [USD/kg]	$C_{SI(k)}$ [USD/año]
Dowtherm J	35,825,261	1.78	63,768,965.19 USD
Refrigerante R717	24,297,097	0.62	15,064,200.41 USD
Agua de enfriamiento	96,572,654	7.60791E-06	734.72 USD
Tipo	Consumo anual $F_{SI(k)}$ [kW.h/año]	Precio $P_{SI(k)}$ [USD/kW.h]	$C_{SI(k)}$ [USD/año]
Energía eléctrica	21,346,232	0.15	3,201,934.87 USD
Total C_{SI} [\$ /año]			82,035,835.18 USD
Costos de mano de obra operativa (C_{MOO})			
Equipo	N_k	$L_{S(k)}$	$L_{S(k)} \cdot N_k$
Bombas	2	0.00	0.00
Intercambiadores	11	0.10	1.10
Compresor	4	0.00	0.00
Torre	1	0.35	0.35
Flash	1	0.00	0.00
Reactores	1	0.50	0.50
$L_S = S L_{S(k)} \cdot N_k$	1.9500	t_y	1041
S_{Op}	50,000 USD	$L_{Y(Op)}$	300
N_{Op}	7	C_{MOO} [USD/año]	350,000 USD
Costos operativos sin depreciación y costo por depreciación			
COT_d	183,073,051.20 USD	C_{Dep}	2,316,419.09 USD
Ingreso por venta de productos (V)			
Tipo	Producción $F_{Prod(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{Prod(k)}$ [USD/kg]	$V_{(k)}$ [USD/año]
Hidrógeno	6754482.525	2.61	17,650,600.09 USD
Acetaldehído	128453542.7	1.45	186,257,636.93 USD
Total V [USD/año]			203,908,237.02 USD

Tabla 9

Cálculo de los flujos de caja, flujos de caja descontados y VPN de la planta de producción de acetaldehído con un costo de 0.48 USD/Kg de etanol anhidro

(n)	V _(n)	COT _{d(n)}	C _{Dep(n)}	C _{Imp(n)}	ICF _(n)	S _(n) =0.1(ICF _L)	L _(n)	WC _{Req(n)}	WC _{Rec(n)}	FC _(n)	FC _{(n),(1+i)⁻ⁿ}	FC _{(n),(1+TIR)⁻ⁿ}
0					\$ 818,853					\$ (818,853)	\$ (818,853)	\$ (818,853)
1					\$15,442,794					\$ (15,442,794)	\$ (11,971,158)	\$ (10,871,323)
2					\$ 5,147,598			\$ 5,147,598		\$ (10,295,196)	\$ (6,186,645)	\$ (5,102,084)
3	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568						\$ 14,353,617	\$ 6,686,398	\$ 5,007,615
4	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568						\$ 14,353,617	\$ 5,183,254	\$ 3,525,230
5	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568						\$ 14,353,617	\$ 4,018,027	\$ 2,481,669
6	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568						\$ 14,353,617	\$ 3,114,749	\$ 1,747,030
7	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568						\$ 14,353,617	\$ 2,414,534	\$ 1,229,864
8	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568						\$ 14,353,617	\$ 1,871,732	\$ 865,792
9	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568						\$ 14,353,617	\$ 1,450,955	\$ 609,495
10	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568						\$ 22,893,867	\$ 1,793,998	\$ 684,359
11	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568						\$ 14,353,617	\$ 871,916	\$ 302,053
12	\$ 203,908,237	\$ 183,073,051	\$ 2,316,419	\$ 6,481,568		\$ 2,573,799	\$ 818,853		\$ 5,147,598	\$ 22,893,867	\$ 1,078,059	\$ 339,154
										VPN	\$ 9,506,968	\$ (0)

Tasa de impuestos TI	35%
Tasa de descuento "i"	29%
Tasa Interna de retorno TIR	42%