

**INCIDENCIA DE LA SELECCIÓN DEL PAQUETE TERMODINÁMICO EN LA  
SIMULACIÓN PARA EL DISEÑO DE PROCESOS EN LA PRODUCCIÓN DEL  
FORMALDEHÍDO Y ESTIRENO.**

**NATALIA ANDREA CADAVID HERNÁNDEZ.**

**Estudiante de ingeniería de procesos.**

**Asesor:**

**Luis Fernando Cardona, M.Sc (c)**

**Profesor de ingeniería química UPB.**

**Co Asesor:**

**Diego Andrés Acosta, Ph.D**

**Profesor de ingeniería de procesos.**

**Juan David Ortega, M.Sc**

**Profesor de ingeniería de procesos.**

**UNIVERSIDAD EAFIT  
FACULTAD DE INGENIERÍAS  
DEPARTAMENTO DE PROCESOS  
MEDELLÍN**

**2013**

Nota de aceptación:

---

---

---

---

---

Presidente del jurado

---

Jurado

---

Jurado

Octubre, 2013

## Tabla de contenido

1.1.	Marco teórico .....	10
1.1.1.	Diseño de procesos.....	10
1.1.2.	Simulación de procesos .....	10
1.1.3.	Ecuaciones de estado .....	11
1.1.4.	Regla de mezclado .....	13
1.1.5.	Simuladores comerciales .....	14
1.2.	Estado del arte .....	16
1.2.1.	Influencia del paquete termodinámico en la simulación de procesos.....	16
1.2.2.	Casos de estudio .....	19
1.2.3.	Conclusiones de la revisión del estado del arte y contribuciones del trabajo de investigación .....	19
1.3.	Descripción del problema.....	20
1.3.1.	Preguntas de investigación .....	20
1.3.2.	Hipótesis.....	20
1.4.	Objetivos .....	21
1.4.1.	Objetivo general: .....	21
1.4.2.	Objetivos específicos .....	21
1.4.3.	Alcance .....	21
1.5.	Metodología .....	21
1.5.1.	Búsqueda bibliográfica .....	21
1.5.2.	Simulación en Aspen Hysys.....	22
1.5.3.	Diseño conceptual .....	22
2.	Caso de estudio 1: Formaldehído .....	23
2.1.	Descripción del proceso .....	23
2.2.	Simulación de procesos.....	26
2.3.	Block flow diagram (BFD) .....	32
2.3.1.	Paquete termodinámico 1: Peng Robinson (PR).....	32
2.3.2.	Paquete termodinámico 2: Non random two liquids (NRTL) .....	33
2.3.3.	Paquete termodinámico 3: Peng Robinson-Soave (PRSV) .....	34
2.4.	Process flow diagram (PFD) .....	35
2.5.	Costos del proceso .....	37

2.5.1.	Costos de capital.....	41
2.5.2.	Costos de operación .....	46
2.5.3.	Análisis financiero.....	49
2.6.	Análisis y discusión. ....	53
3.	Caso de estudio 2: Estireno .....	57
3.1.	Descripción del proceso .....	57
3.2.	Simulación de procesos .....	59
3.3.	Block flow diagram (BFD) .....	65
3.3.1.	Paquete termodinámico 1: Peng Robinson (PR) .....	65
3.3.2.	Paquete termodinámico 2: Non random two liquids (NRTL) .....	66
3.3.3.	Paquete termodinámico 3: Peng Robinson-Soave (PRSV) .....	67
3.4.	Process flow diagram (PFD) .....	68
3.5.	Costos del proceso .....	70
3.5.1.	Costos de capital.....	74
3.5.2.	Costos de operación .....	78
3.5.3.	Análisis financiero.....	82
3.6.	Análisis y discusión .....	86
4.	Conclusiones y recomendaciones .....	89
4.1.	Conclusiones.....	89
4.2.	Recomendaciones .....	90
5.	Bibliografía .....	91
6.	Anexos.....	94

## Lista de tablas

Tabla 1. Características del catalizador Mo/Fe .....	23
Tabla 2. Cinética de la reacción del formaldehído.....	25
Tabla 3. Conversión del formaldehído.....	31
Tabla 4. Tabla de corrientes para el PFD del formaldehído.....	36
Tabla 5. Intercambiadores de calor y servicios industriales para Peng Robinson (PR) .....	38
Tabla 6. Intercambiadores de calor y servicios industriales para Non Random Two Liquids (NRTL) .....	38
Tabla 7. Intercambiadores de calor y servicios industriales para Peng Robinson-Soave (PRSV).....	39
Tabla 8. Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de formaldehído con el paquete termodinámico de Peng Robinson (PR).....	39
Tabla 9. Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico.....	40
Tabla 10. Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de formaldehído simulada con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico .....	41
Tabla 11. Costos de capital de una planta de formaldehído con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico .....	43
Tabla 12. Costos de capital de una planta de formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico .....	44
Tabla 13. Costos de capital para una planta de formaldehído con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico .....	45
Tabla 14. Costos de operación para la producción de formaldehído con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico .....	47
Tabla 15. Costos operativos en la producción de formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico .....	48
Tabla 16. Costos operativos en la producción de formaldehído con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico .....	49
Tabla 17. Tabla de amortización para la producción de formaldehído con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico .....	50
Tabla 18. Tabla de amortización para la producción de formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico .....	51
Tabla 19. Tabla de amortización para la producción de formaldehído con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico .....	52
Tabla 20. Características del catalizador compuesto.....	57
Tabla 21. Cinética de las reacciones del estireno .....	58
Tabla 22. %Conversión en el proceso del estireno .....	62
Tabla 23. Tabla de corrientes del PFD del estireno .....	69
Tabla 24. Servicios industriales utilizados para la producción de estireno con Peng Robinson como paquete termodinámico.....	70

Tabla 25. Servicios industriales utilizados para la producción de estireno con Non Random Two Liquids como paquete termodinámico .....	70
Tabla 26. Servicios industriales utilizados para la producción de estireno con Peng Robinson-Soave como paquete termodinámico .....	71
Tabla 27. Equipo principales, entradas y salidas para la producción de estireno con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico.....	72
Tabla 28. Equipos principales, entradas y salidas para la producción de estireno con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico .....	73
Tabla 29. Equipos principales, entradas y salidas para la producción de estireno con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico.....	74
Tabla 30. Costos de capital para la producción de estireno con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico .....	75
Tabla 31. Costos de capital para la producción de estireno con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico .....	76
Tabla 32. Costos de capital para la producción de estireno con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico .....	77
Tabla 33. Costos de operación del proceso de producción del estireno con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico .....	79
Tabla 34. Costos operativos para la producción de estireno con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico .....	80
Tabla 35. Costos de operación en la producción de estireno con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico .....	81
Tabla 36. Tabla de amortización para la producción de estireno con Peng Robinson como paquete termodinámico .....	83
Tabla 37. Tabla de amortización para la producción de estireno con Non Random Two Liquids como paquete termodinámico .....	84
Tabla 38. Tabla de amortización para la producción de estireno con Peng Robinson-Soave como paquete termodinámico .....	85

## Lista de Ilustraciones

Ilustración 1. Producción de formaldehído.....	24
Ilustración 2 Simulación de procesos con paquete termodinámico de Peng Robinson (PR) y Non Random Two Liquids (NRTL) .....	28
Ilustración 3 Simulación de proceso con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico .....	28
Ilustración 4 BFD del formaldehído con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico .....	32
Ilustración 5 BFD del formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico .....	33
Ilustración 6 BFD del formaldehído con PRSV como paquete termodinámico.....	34
Ilustración 7 PFD para el formaldehído.....	35
Ilustración 8 Corrección en el PFD de formaldehído para PRSV como paquete termodinámico .....	37
Ilustración 9 Producción de estireno a partir de la deshidrogenación del etil benceno.....	59
Ilustración 10 Simulación del proceso de producción del estireno con Peng Robinson (PR), Non Random Two Liquids (NRTL) y Peng Robinson – Soave (PRSV) como paquetes termodinámicos .....	61
Ilustración 11 BFD del estireno con PR como paquete termodinámico.....	65
Ilustración 12 BFD del estireno con NRTL como paquete termodinámico.....	66
Ilustración 13 BFD del estireno con PRSV como paquete termodinámico .....	67
Ilustración 14 PFD para la producción de estireno.....	68

## Lista de gráficas

Gráfica 1. Conversión de metanol a formaldehído vs paquete termodinámico .....	29
Gráfica 2 Producción de formaldehído vs paquete termodinámico utilizado .....	30
Gráfica 3 Comportamiento del metanol y formaldehído en el reactor vs paquete termodinámico .....	31
Gráfica 4. Comportamiento del etilbenceno en el proceso de producción del estireno .....	63
Gráfica 5. Producción de estireno dependiendo del paquete termodinámico utilizado .....	64

## Introducción

Este proyecto de grado investiga la dependencia de los resultados de una simulación de procesos con el paquete termodinámico que se escoge. Para el cual no se han realizado estudios parecidos de acuerdo con la revisión bibliográfica respecto a dicha dependencia.

Se selecciona Aspen Hysys v.8.0 como simulador de procesos, por su completa base de datos que permite tener simulaciones de procesos más veraces. En donde el proceso de producción del formaldehído y estireno son los procesos base para el estudio. Estos dos procesos productivos se han seleccionado debido a la buena información que se puede encontrar de estos en la literatura y sus diferencias en la naturaleza química que permitirá comparar entre sustancias polares y apolares, ya sea por las materias primas empleadas o por los compuestos producidos.

En la simulación se evalúa el porcentaje de conversión que alcanza las reacciones con tres paquetes termodinámicos diferentes (Peng Robinson (PR), Non Random Two Liquids (NRTL) y Peng Robinson-Soave(PRSV)); y a su vez se analiza el cambio en el sistema, es decir, la variabilidad en el proceso con la cantidad y tipo de equipos utilizados en cada proceso y paquete termodinámico.

Con los resultados obtenidos de la simulación de Aspen Hysys v.8.0 se realiza un análisis financiero de los procesos para determinar la viabilidad económica de estos, por medio del cálculo de los costos de capital y operación de cada proceso, permitiendo elaborar una tabla de amortización para ver en qué momento se recupera la inversión inicial.

Por último se realizan las conclusiones de la investigación donde se determina cual paquete termodinámico es más apropiado para cada uno de los procesos dependiendo de la conversión obtenida del producto de interés y el valor presente neto (VPN).

## **1.1.Marco teórico**

### **1.1.1. Diseño de procesos**

El área de diseño de procesos es una de las que más ha cambiado a nivel mundial en la enseñanza de la ingeniería química y de procesos en los últimos años. Esto es reflejo de los resultados científicos, soportados por simuladores cada vez más exactos. El enfoque provocado por los conceptos esenciales a la síntesis de procesos ha sido otro de los factores que han contribuido a este aspecto. Ahora, el diseño de procesos integra los conocimientos de varias disciplinas y proporciona una visión global (Jiménez Gutiérrez, 2003)

El paquete de diseño conceptual de procesos son todos los documentos que definen y describen un proceso específico, establecido por la ingeniería básica y de detalle; donde la ingeniería básica es desarrollada generalmente el ingeniero de planta, definiendo aspectos centrales como: la descripción del proceso con el alcance del mismo, la opción de plan de ejecución del proyecto, el diagrama de entrada y salidas, los diagramas de bloques genéricos, los diagrama de flujo en bloques (BFD), los diagramas de flujo de procesos (PFD). Mientras la ingeniería de detalle es definida por un grupo interdisciplinario de ingenieros, generando la documentación para la construcción física de la planta con base a los diagramas de tuberías o instrumentación del proceso (PI&D), y las hojas de especificación de los equipos (Aristizábal, 2007).

### **1.1.2. Simulación de procesos**

La simulación de procesos es la evaluación numérica de las condiciones específicas de un modelo, que ya ha pasado por el diseño de la ingeniería básica, con ayuda de un software (Aristizábal, 2007).

El simulador de procesos por medio de las variables conocidas y sus bases de datos, calcula las variables desconocidas o parámetros del proceso deseado, de manera confiable dependiendo de los datos de origen (Aristizábal, 2007).

La simulación permite ahorrar tiempo en el proceso de control de la planta, permitiendo realizar análisis profundos de operación, creando procesos optimizados en periodos de tiempo cortos. Además, permite complementar el análisis obtenido con la heurística para la toma de decisiones en momentos críticos de producción, al poder realizar rápidamente y de forma confiable pruebas en el proceso sin crear mayores traumatismos (Dimitratos, et al., 2006).

### **1.1.3. Ecuaciones de estado**

Los paquetes termodinámicos se derivan de ecuaciones de estado útiles para describir las propiedades de los fluidos, mezclas ó sólidos. Cada sustancia o sistema hidrostático tiene una ecuación de estado característica dependiente de los niveles de energía moleculares y sus energías relativas, tal como se deduce de la mecánica estadística (Smith, et al., 1996).

Los paquetes termodinámicos son empleados en la simulación con base en el estado termodinámico y permiten predecir el comportamiento físico de las propiedades de los componentes. Las más empleados en la simulación son:

#### **1.1.3.1. *Van der Waals***

La ecuación fue creada en 1873 por el físico alemán Johannes Diderik van der Waals, quien recibió el premio nobel en 1910 por su trabajo en la determinación de la ecuación de estado para los gases y líquidos, la cual se basa en una modificación de la ecuación de gases ideales para aproximarse al comportamiento de los gases reales al tener en cuenta su tamaño y la atracción entre sus partículas. Esta ecuación se puede utilizar para modelar líquidos y gases que tengan tamaño no despreciable y con fuerzas moleculares como las también llamadas fuerzas de Van der Waals (Smith, et al., 1996).

La ecuación puede ser empleada por encima de la temperatura crítica, siendo una mejora de la ley del gas ideal, y para temperaturas más bajas, la ecuación es cualitativamente razonable también para el estado líquido y estado gaseoso a baja presión. Sin embargo, el modelo Van der Waals no es adecuado para los cálculos cuantitativos rigurosos, y solo es útil para fines educativos (Smith, et al., 1996).

#### **1.1.3.2. *Redlich Kwong (RK)***

La ecuación de Redlich Kwong es una ecuación constitutiva para sistemas hidrostáticos que describe el estado de agregación de la materia como una relación matemática entre la temperatura, la presión, el volumen, la densidad, la energía interna y posiblemente otras funciones de estado asociadas con la materia (Smith, et al., 1996).

Esta ecuación es una mejora de la ecuación de Van der Waals, pero no da buenos resultados en la fase líquida y por ello no puede usarse para calcular precisamente los equilibrios líquido-vapor. No obstante, es adecuada para calcular las propiedades de la fase gaseosa cuando el cociente entre la presión y la presión crítica es menor que la mitad del cociente entre la temperatura y la temperatura crítica (Smith, et al., 1996)

#### **1.1.3.3. Soave Redlich Kwong (SRK)**

En 1972 Soave modifico la ecuación de Redlich Kwong en un término, por una expresión en función de la temperatura y el factor acéntrico. Esta modificación se realizó con el fin de ajustar los datos de la presiones de vapor de los hidrocarburos prediciendo de forma correcta el comportamiento de estas sustancias. Por ello, es una ecuación útil para predecir de manera correcta los equilibrios líquido vapor, que no lo logra realizar la ecuación de Redlich Kwong (Smith, et al., 1996)

#### **1.1.3.4. Peng Robinson (PR)**

Es una ecuación muy similar a la de Soave Redlich Kwong (SRK), pero con la diferencia que se expresa en términos de las propiedades críticas y el factor acéntrico para ser precisa cerca del punto crítico de las sustancias. Esta ecuación es particularmente útil para el cálculo de los equilibrios líquido vapor, las densidades líquidas y el factor de compresibilidad, pero solo pueden tener interacciones binarias independientes de la presión, la temperatura y la composición (Smith, et al., 1996).

Por ser una derivación de la ecuación de Soave Redlich Kwong (SRK), presenta unos resultados similares, aunque es mejor para predecir las propiedades de compuestos en fase líquida, especialmente los apolares, y a su vez, predecir el equilibrio líquido vapor de las sustancias, propósito que no puede realizar la ecuación de Redlich Kwong (RK) de la cual se deriva la ecuación de Soave Redlich Kwong (SRK) (Smith, et al., 1996).

#### **1.1.3.5. Patel Teja (PT)**

Es una ecuación propuesta en 1982 por Patel y Teja, es una variación de la ecuación de estado de Van der Waals introduciendo un nuevo término C, con el cual, se permite el ajuste de un factor de compresibilidad crítico en vez de un valor fijo, mejorando de esta manera la predicción de propiedades de saturación para los fluidos polares (Huang, 1990).

Además de ser útil para fluidos polares, también predice entalpías y entropías de salida y otras propiedades de cada sustancia, como de sustancias apolares (Huang, 1990).

#### **1.1.4. Regla de mezclado**

Estas reglas ayudan a predecir las propiedades en exceso y el comportamiento de las mismas en equilibrio líquido-vapor, a partir de tres parámetros de interacción binarios ajustables, excepto por la regla cuadrática, la cual únicamente ofrece dos parámetros de interacción para un sistema binario. El parámetro de interacción binario es usado para ajustar el parámetro de mezcla  $\beta$ , los otros parámetros son usados para ajustar el parámetro de mezcla  $\alpha$  (Huapaya Sánchez, 2009)

Existen varias reglas de mezclado, donde es importante resaltar que las reglas de mezclado Adachi-Sugie, Panagiotopoulos-Reid, Melhem y Stryjeck-Vera sufren del síndrome de Michelsen-Kistenmacher, el cual presentan una desviación considerable a la hora de modelar un sistema real. Para evitar esto se recomienda usar el modelo de Mathias Klotz Prausnitz, el cual se asemeja a una regla de mezcla de un sistema binario (Huapaya Sánchez, 2009)

##### ***1.1.4.1. Regla de mezcla de Van der Waals:***

Esta fue la primera regla de mezcla en utilizarse, y aun con su nuevo parámetro de interacción  $K_{ij}$  (dependiente de la temperatura) tiene una desviación considerable de los resultados apropiados para la predicción de propiedades en exceso de la mezcla y equilibrio líquido-vapor, especialmente en sistemas complejos (Valderrama, et al., 2000)

##### ***1.1.4.2. Regla de mezcla de Mathias-Klotz-Prausnitz***

Es una variación de la regla de mezclado de Van der Waals obteniendo una mejora en la representación del equilibrio de fases de mezclas binarias altamente no ideales, agregando un factor de polaridad característico para cada sustancia y una mejor función de temperatura para el parámetro "a". (Barragán Aroche, et al., 2004)

Este modelo logra reproducir con errores inferiores al 1% la presión de vapor de compuestos como el agua, acetona o metanol en todo el intervalo de temperatura. (Sandoval, et al., 1991)

##### ***1.1.4.3. Regla de mezcla de Panagiotopoulos y Reid***

Es una regla de mezcla cuadrática que propone una regla lineal que corrige la media geométrica clásica, siendo los primeros en incluir dos parámetros de interacción binaria empírica ( $K_{ij}$  y  $K_{ji}$ ) dentro de la regla de mezclado. (Sandoval, et al., 1991)

### **1.1.5. Simuladores comerciales**

El sector petroquímico y químico es uno de los preferidos por las empresas de simuladores de procesos. Donde los modelos de simulación comienzan a hacer parte del Know-how de las compañías, creándose la necesidad de tener simuladores privados desarrollados por las compañías y académicos que pueden superar muchas veces a los comerciales (Aristizábal, 2007).

A continuación se enuncian algunos simuladores de procesos:

#### **1.1.5.1. CHEMCAD:**

CHEMCAD y Chemstations tiene sus orígenes hace más de 40 años, sufriendo varios cambios a lo largo de los años, evolucionando con el diseño y la ingeniería química a la vez que se desea presentar herramientas que ayuden a avanzar en el campo (Chemstation, 2012).

En 1968 se construyó CHEMCAD-CHESS (ingeniería química de sistemas de simulación) con una beca de la marina de U.S.A en la universidad de Houston, donde en 1983 CHESS es llevado hacia los computadores y se convierte en MicroCHESS; pero, en 1985 se cambia el nombre de Micro CHESS a CHEMCAD (Chemstation, 2012).

En 1988 CHEMCAD adquiere los derechos de las Chemstations convirtiéndose en su proveedor y promotor (Chemstation, 2012).

El creciente uso de CHEMCAD hizo necesario en 1989 de un lanzamiento de CHEMCAD II, con nuevos modelos de cálculo. Posteriormente, se realizó el lanzamiento de las nuevas versiones de CHEMCAD, la tercera en 1993, en la cual la escritura estaba integrada con la interfaz gráfica de usuario en lenguaje C; la cuarta en 1997, como una versión compatible con Windows; la quinta en 2000, es lanzada con rescritura en lenguaje Visual C++ y compatible con las herramientas de Microsoft; y la última en 2007, se lanza la versión seis con una interfaz gráfica de usuario (GUI) orientada al diseño cliente/usuario (Chemstation, 2012).

Las áreas que suelen utilizar CHEMCAD son: las de exploración y producción; refinerías; productos químicos genéricos, finos y de especialidad; productos farmacéuticos; consultoría en ingeniería; fabricación de equipos; y programas académicos. Los cuales suelen utilizar el software para: investigación y desarrollo; diseño de procesos; procesos de rediseño y optimización; mantenimiento; seguridad y análisis de riesgo; estudio y análisis ambientales; y educación (Chemstation, 2012).

### **1.1.5.2. Aspen Plus**

Aspen Plus es un simulador de proceso líder en el mercado de modelado conceptual para el diseño, optimización y supervisión del rendimiento para la industria química, la minería, la industria eléctrica y del carbón. Siendo un simulador fácil de usar con una interfaz para el usuario completamente rediseñada, permitiendo a los clientes diseñar nuevos procesos, ofrecer nuevos productos al mercado y optimizar la producción más rápido. Aspen Plus es un elemento central de aspenONE AspenTech para aplicaciones de ingeniería (Aspen Technology, 2012).

El nuevo Aspen One versión 8 combina una interfaz con el usuario fácil y rápida de aprender con la excelencia técnica, la profundidad y amplitud de un simulador líder en la industria química (Aspen Technology, 2012).

Conjuntamente incluye la mayor base de datos mundial de componentes puros y los datos de fase de equilibrio para los productos químicos convencionales, electrólitos sólidos y polímeros en las llamadas Propiedades Aspen. Accediendo a más de 4 millones de datos experimentales puntuales para más de 24.000 componentes puros y 30.000 sistemas binarios. Estos datos son actualizados periódicamente en el Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST) en U.S.A asegurando los mejores datos disponibles de propiedades experimentales, permitiendo a los ingenieros de procesos ahorrar meses de esfuerzo en el desarrollo de modelos de procesos químicos (Aspen Technology, 2012).

Además, permite a los usuarios realizar modelos de reactores y destilaciones batch de forma rigurosa; donde de manera conjunta, permite identificar azeótropos y curvas de residuo que pueden ayudar en el diseño y síntesis de las columnas de destilación no ideales, todo gracias a la amplia base de datos que tiene el simulador (Aspen Technology, 2012).

### **1.1.5.3. Aspen Hysys**

Hysys es un software especializado en la industria petroquímica. Parte de la empresa HYPROTECH, pero fue vendido en 2004 a Aspen Tech, donde sus principales características eran una interfaz amigable y una base de datos extensa de propiedades físico químicas que solo era superada por Aspen Plus, y utiliza datos experimentales para sus correlaciones (Aspen Technology, 2012).

Aspen HYSYS se convierte entonces en una herramienta de modelado y simulación de procesos, para el diseño conceptual, la optimización, planificación empresarial, gestión de activos, y la supervisión del rendimiento, procesamiento y refinación del petróleo y gas especialmente; y las industrias de separación de aire. El software tiene una variedad de características y aplicaciones sectorizadas. Algunas de las características incluyen: herramientas para el modelado de procesos de hidrocarburos, modelos para simulaciones dinámicas y estacionarias, excelentes propiedades físico químicas de diferentes componentes, equilibrios liquido vapor, y balances de materia y energía (Aspen Technology, 2012).

A su vez, este simulador es un elemento central de aspenONE AspenTech aplicaciones para ingeniería (Aspen technology, 2012).

## **1.2.Estado del arte**

Los simuladores de procesos han tenido cambios desde su creación en los años 60`s, donde básicamente se ha incrementado la base de datos de los compuestos químicos y sus propiedades, mejorando simultáneamente la interfaz con el usuario y la exactitud de los cálculos realizados, pudiendo así encontrar diferentes versiones y revisiones de la misma.

### **1.2.1. Influencia del paquete termodinámico en la simulación de procesos.**

El paquete termodinámico influye directamente en los resultados del simulador, debido a que cada modelo fue creado con base en ecuaciones matemáticas y resultados empíricos de procesos. Por ello, los modelos termodinámicos se emplean con unos u otros componentes dependiendo de la naturaleza química y estado de los mismos. En algunas ocasiones se escoge por la familiaridad con alguno de ellos, presentándose errores en la simulación por la deficiente interacción que puede ocurrir entre las constantes de cada sustancia calculadas con el modelo seleccionado.

Desde 1980 cuando los computadores pudieron ser accesibles la simulación de procesos químicos tomó importancia, siendo de interés el hecho de escoger un paquete termodinámico adecuado de forma que los resultados de las simulaciones fueran correctos, realizándose estudios sobre el tipo de modelo o paquete termodinámico que se debe emplear teniendo en cuenta que muchas personas no tienen ni el conocimiento ni la experiencia para hacerlo. Por consiguiente, se plantea la necesidad de

crear “una especie de programa” que ayude a seleccionar de manera adecuada el modelo termodinámico, donde inicialmente funcionara de manera independiente y mirando hacia el futuro la posibilidad de integrarlo a un simulador de procesos químicos (Gani, et al., 1989). En la actualidad existen un software que calcula los parámetros de algunas ecuaciones de estado y reglas de mezclas con base a compuestos que se vayan a estudiar en un equilibrio líquido-vapor o una destilación flash, donde dependiendo de la ecuación de estado que se elija se sugiera una regla de mezcla y un modelo actividad para la predicción de los parámetros (Dortmund data bank software & separation technology, 2009)

Pensando en que la programación se hiciera simple se parte de tablas con constantes, modelos termodinámicos y ecuaciones diferenciales ordinarias. Definiendo en las tablas la interacción entre los componentes en las operaciones químicas de transferencia de masa. Los modelos termodinámicos delimitan el tipo de estado termodinámico con el cual operan; y las ecuaciones diferenciales son obtenidas por balances de masa y energía. Presentándose como resultado una matriz que cumple todas las reglas termodinámicas necesarias de interacción y estado de los componentes de manera lógica, flexible y aplicable (Gani, et al., 1986) (Gani, et al., 1989).

En los procesos petroquímicos se encuentra que los modelos termodinámicos existentes son poco confiables para la modelación del gas natural, realizándose un estudio para crear un nuevo modelo que les permita realizar cálculos más precisos para esta mezcla en particular, creando una nueva ecuación de estado que puede modelar el comportamiento de hasta 21 compuestos que se derivan de él de forma directa, beneficiándose de manera particular la región Europea, ya que la simulación de la licuefacción del gas natural se estudia a profundidad allí, mostrando mejoras en la precisión de la simulación al utilizar este nuevo modelo termodinámico (Dauber, et al., 2012).

En otros estudios, se ha determinado la conveniencia de utilizar uno u otro paquete termodinámico en una simulación con la ayuda contenida en simuladores como Hysys, haciendo las veces de experto a la mano. Específicamente en la descomposición de ácido sulfúrico para la obtención de oxígeno en Aspen Hysys versión 3.01, de ahí se extraen todos los valores para la simulación de manera veraz y no idealizar ningún parámetro, notándose de manera instantánea la rapidez con la cual se puede realizar el estudio de un proceso comparado con la forma preliminar

de realizar cálculo por cálculo basado en tablas termodinámicas (Raissi, et al., 2005).

Además, es importante mostrar la necesidad de cambiar los paradigmas en el diseño de procesos con base en el control de estos, al utilizar simulaciones dinámicas de los procesos para tener todo integrado con una velocidad de respuesta apropiada, al permitir realizar cambios en problemas específicos; sustituyendo tareas tediosas y la comprensión de la heurística de plantas dinámicas para la toma de decisiones propias del control, por el análisis exhaustivo del proceso y pruebas que permitan una puesta en marcha de una manera más rápida involucrando menos costos y trabajo. Una empresa pionera en la simulación de sus procesos para el control es Dupont (Dimitratos, et al., 2006).

Los estudios en simuladores de procesos están dispersos en incomparables temas y simuladores con diferentes versiones, de forma que no se cuenta con un historial confiable del efecto del cambio de versiones del simulador de procesos, haciendo tedioso el estudio de un proceso en los simuladores del mercado. Como respuesta a esto se decidió organizar los cambios de las simulaciones de un proceso o las versiones de simulación, mediante el lenguaje de programación llamado XML, donde por medio de una estructura jerárquica se organizan los cambios en las simulaciones de un mismo proceso (Lam, 2007).

Después de demostrar la importancia de los simuladores de procesos en la industria, es necesario escoger el mejor simulador, para ello se han realizado un mismo estudio en dos simuladores diferentes con los mismos paquetes termodinámicos, de forma que se puedan comparar los resultados obtenidos, su cercanía y por consiguiente la idoneidad del simulador para un proceso determinado. Los simuladores más utilizados en este momento en la industria química son: Aspen Hysys y Aspen plus, por ello la mayoría de las comparaciones son entre estos dos aunque poseen pequeñas diferencias entre ellos al utilizar casi la misma base de datos. Ahora bien, para la absorción de CO<sub>2</sub> en monoetanolamina se calculó la eficiencia de remoción y los perfiles de temperatura del proceso, para comparar los resultados entre ambos simuladores (Aspen Hysys y Aspen Plus), pero se puede decir que ambos cumplen con el objetivo si lo que se quiere son los valores de absorción de CO<sub>2</sub> en función de la velocidad de circulación del fluido, pero de ahí la importancia de conocer la diferencia entre ambos y el lugar de donde provienen los valores sobre los cuales trabaja cada simulador, ya que de ahí se puede concluir cual es más adecuado para uno u otro proceso (Smejkal, 2002) (Øi, 2012).

### **1.2.2. Casos de estudio**

Para un análisis profundo de la influencia de los paquetes termodinámicos en los resultados de la simulación y consecuentemente en el diseño de procesos, se tomaron dos casos de estudio: producción de formaldehído a partir de la oxidación del metanol; y producción de estireno a partir de la deshidrogenación del etil benceno. (Speight, 2002)

Donde con base a la revisión bibliográfica previa, no se cuenta con estudios similares previamente realizados, con el propósito de servir de base a la nueva investigación.

### **1.2.3. Conclusiones de la revisión del estado del arte y contribuciones del trabajo de investigación**

La simulación se ha convertido en una herramienta poderosa que permite disminuir los tiempos de diseño e implementación de nuevos procesos, y costos de estudio al solucionar posibles dificultades antes de que se presenten.

En la industria química la simulación de procesos se convierte en una herramienta útil para el control y optimización de procesos, de manera que se reduzca el tiempo en la toma de decisiones al disminuir la dependencia de la heurística para esto, permitiendo utilizar el tiempo en análisis de procesos y pruebas para la implementación de algunos (Dimitratos, et al., 2006)

Inicialmente se comenzaron a desarrollar modelos matemáticos basados en balances de energía y masa, con el fin de desarrollar nuevos modelos para una simulación dinámica sin pensarse en ningún software específico (Gani, et al., 1986). Al mismo tiempo se encontró que las ecuaciones de estado existentes eran insuficientes para el modelamiento de algunos procesos específicos derivados de la licuefacción del petróleo (Valderrama, et al., 2000) (Dauber, et al., 2012)

Uno de los procesos más estudiados es la destilación, donde la destilación azeotrópica juega un papel importante debido a su gran aplicabilidad en las industrias química, logrando separaciones difíciles de componentes, que luego han sido validados en la realidad (Vasconcelos, et al., 2000) (Markos, et al., 2003).

En la revisión bibliográfica realizada, no se encontró ningún documento que valide la investigación previa sobre la dependencia de los resultados con el cambio de paquete termodinámico en una simulación de procesos, con base a realizar un diseño conceptual con dichos valores.

### **1.3.Descripción del problema**

En la actualidad la simulación de procesos ha ayudado a las empresas manufactureras a solucionar problemas que se presentan en la implementación de un nuevo proceso, o simplemente para verificar cómo se comportará la producción al realizar modificaciones en un proceso existente. Por ello, es necesario ver la dependencia de los resultados con la selección del paquete termodinámico; ya que cada simulación requiere utilizar un paquete termodinámico basado en ecuaciones de estado donde, dependiendo del estado de las materias primas y las interacciones moleculares en la reacción del proceso de producción se hace adecuado uno u otro.

Por medio de una simulación en Aspen Hysys con paquetes termodinámicos diferentes para dos casos de estudio como lo son: la producción de formaldehído y estireno ambos con suficiente información reportada en la literatura, se quiere saber de qué magnitud es la diferencia en los resultados del diseño conceptual de procesos.

En este caso las materias primas se encuentran en estado líquido pero las reacciones químicas se presentan tanto en estado líquido como gaseoso, es posible seleccionar a Peng Robinson, NRTL (non random two liquids) y PSRK (Predictive Soave Redlich Kwong) como paquetes termodinámicos, ya que estos son capaces de predecir equilibrios líquido vapor, trabajar con sustancias supercríticas y subcríticas, aunque algunos de ellos no presenten buenos resultados con sustancias polares (Smith, et al., 1996) (Huang, 1990)

#### **1.3.1. Preguntas de investigación**

- ¿Cómo afecta la selección del paquete termodinámico la estructura topológica del diagrama de flujo (PFD) de proceso del formaldehído y estireno?
- ¿Cómo afecta la selección del paquete termodinámico la convergencia del proceso en la simulación?
- ¿Cómo afecta la selección de un paquete termodinámico la predicción de los costos de capital y operación del proceso de formaldehído y estireno?

#### **1.3.2. Hipótesis**

El paquete termodinámico incide en el diseño de procesos del formaldehído y estireno, relativo a la ingeniería básica (costos de operación y capital, diseño de equipos, optimización y PFD)

## **1.4.Objetivos**

### **1.4.1. Objetivo general:**

Evaluar la variabilidad en la predicción de resultados de una simulación en Aspen Hysys de acuerdo con el paquete termodinámico utilizado para la producción de formaldehído y estireno.

### **1.4.2. Objetivos específicos**

- Comparar los resultados obtenidos en las simulaciones de Aspen HYSYS mediante gráficas y rendimientos globales, para determinar el mejor paquete termodinámico para cada proceso de producción (Formaldehído y estireno) respecto a los datos reportados en la literatura.
- Analizar los cambios en los equipos resultantes en el proceso respecto a la producción de formaldehído y estireno.
- Determinar los costos de operación y capital del proceso de producción del formaldehído y estireno con tres paquetes termodinámicos diferentes.

### **1.4.3. Alcance**

Este proyecto se realiza con el fin de establecer la dependencia y variabilidad de los resultados en una simulación de Aspen Hysys. Para lograr este objetivo se desarrollará la simulación de dos procesos productivos (formaldehído y estireno) con tres paquetes termodinámicos diferentes para cada uno; entregando documentada la información de los procesos con los paquetes de diseño conceptual de los mismos y las simulaciones de procesos con sus respectivos workbooks (tablas de resultados que entrega el simulador). Donde el paquete conceptual incluirá los diagramas de proceso (BFD y PFD), el análisis financiero, la descripción del proceso y las hojas de especificación de los equipos.

Además, con base a la investigación se va a presentar dos informes escritos, uno de manera concisa y concreta en un artículo científico para una revista; y la otra en un informe final completo para la universidad.

## **1.5.Metodología**

### **1.5.1. Búsqueda bibliográfica**

Búsqueda de información sobre otros procesos que hayan sido simulados tanto en Aspen Hysys como en otros software diferentes, todos estos con la característica de ser simuladores de procesos químicos y petroquímicos. La información aquí encontrada será depurada, para permitir tener a la mano

los procesos químicos simulados más estudiados y relacionados con los procesos productivos escogidos para esta investigación, de manera que sirvan como punto de partida de la investigación.

En esta búsqueda se selecciona de manera cuidadosa la información relevante de cada proceso de producción aquí estudiado (formaldehído y estireno), como lo es la cinética de la reacción, el catalizador utilizado y los datos de proceso para realizar comparaciones con los encontrados en la simulación de Aspen Hysys.

### **1.5.2. Simulación en Aspen Hysys**

Teniendo los valores y constantes propias para la producción de formaldehído y estireno después de la revisión bibliográfica, se ingresan los parámetros iniciales que permitan definir cada proceso productivo.

Permitiendo simular cada proceso con tres paquetes termodinámicos diferentes, obteniendo tres conjuntos de valores 'similares o diferentes' para cada simulación que serán comparados en magnitud entre ellos, para determinar cuál es el paquete termodinámico más apropiado para cada proceso de producción. Los paquetes termodinámicos que se emplean son: Peng Robinson, NRTL (non random two liquids) y PSRK (short for Predictive Soave Redlich Kwong) los cuales son escogidos por afinidad química (polares y no polares).

### **1.5.3. Diseño conceptual**

En el diseño conceptual se adiciona toda la información necesaria para obtener el producto deseado de cada proceso, teniendo en cuenta diagramas de flujo, ficha de técnica del producto, descripción del proceso, hoja de seguridad, capacidad de producción del proceso simulado, la conversión que alcanza el reactor, entre otros temas necesarios para completar los PDS (Project design specification) de los dos procesos.

Posterior a la terminación de la simulación y el diseño conceptual de los procesos es necesario hacer un análisis financiero para saber cuál es la inversión inicial que se debe hacer, y cuál es el periodo de retorno de la inversión.

Con base a este análisis financiero se tomará la decisión de viabilidad del proyecto, decidiendo cuál de las implementaciones es más rentable en el tiempo.

## 2. Caso de estudio 1: Formaldehído

### 2.1.Descripción del proceso

El formaldehído es un gas incoloro de olor penetrante que se utiliza en la fabricación de materiales para la construcción y en la elaboración de productos para el hogar, principalmente resinas adhesivas para tableros de madera aglomerada. (Consejo colombiano de seguridad; Ministerio de ambiente, vivienda y desarrollo territorial, 2003) (International Programme on Chemical Safety, 2006) (Speight, 2002) (Maloney, 2008)

El formaldehído es inflamable a temperatura ambiente. Puede causar una sensación de ardor en los ojos, la nariz y los pulmones en concentraciones elevadas. El formaldehído es también conocido como metanal, óxido de metileno, oximetileno, metilaldehído, y oxometano. Conocido por su alta reactividad, descomponiéndose en metanol (alcohol de madera), monóxido de carbono y agua. (Consejo colombiano de seguridad; Ministerio de ambiente, vivienda y desarrollo territorial, 2003)

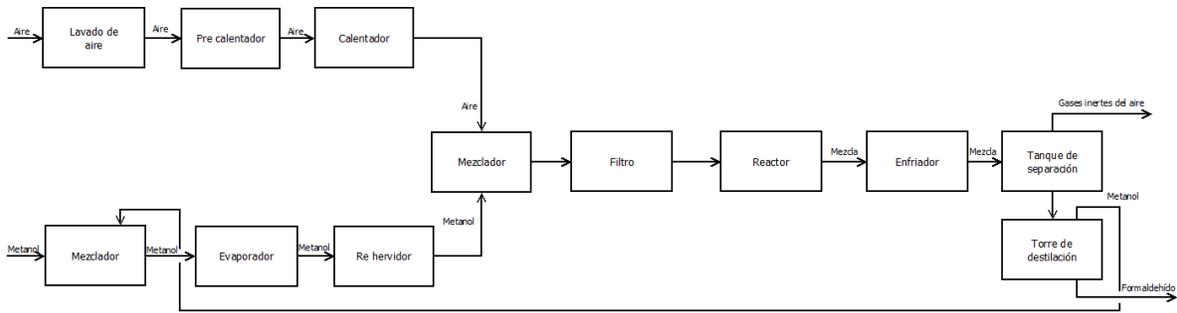
Tiene un punto de fusión y ebullición de  $-92^{\circ}\text{C}$  y  $-21^{\circ}\text{C}$  respectivamente; siendo producido generalmente a partir de la oxidación del metanol sobre un catalizador de plata o el óxido de un metal (Speight, 2002).

En este caso las materias primas empleadas para la obtención del formaldehído según el artículo base son: metanol, oxígeno (que se obtiene de la atmosfera) y un catalizador de molibdeno-hierro (Mo/Fe) que comercialmente lo produce en forma cilíndrica Euteco Company en Milan, Italia con las siguientes características: (Santacesaria, et al., 1981)

**Tabla 1. Características del catalizador Mo/Fe**

Variable	Valor
Proporción ( $\tau$ )	2.5
$\varnothing_{\text{interno}}$	0.15cm
$\varnothing_{\text{externo}}$	0.45cm
Area superficial (a)	60.000cm <sup>2</sup> /g
Porosidad ( $\theta$ )	0.236
Densidad ( $\rho_b$ )	1.982g/cm <sup>3</sup>
Conductividad térmica ( $K_p$ )	0.0075cal/cm seg K

La forma de producción de formaldehído de este trabajo se presenta y describe a continuación a partir del siguiente diagrama de proceso:



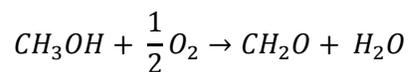
**Ilustración 1. Producción de formaldehído**

Al inicio del proceso, ingresa el metanol a la planta en forma líquida y se almacena en unos tanques, en los cuales se combina con el metanol reciclado del proceso que no alcanza a reaccionar.

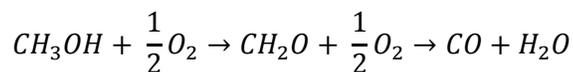
Para que el metanol ingrese a la etapa de producción del formaldehído, éste debe primero pasar por un proceso de evaporación, seguido por un sobrecalentamiento, con vapor de baja y media respectivamente; para luego ser ingresado al mezclador, donde se encuentra con el aire. Este aire es tomado del ambiente, y por tal motivo es necesario realizar una limpieza para eliminar impurezas, como los sulfuros, que pueden envenenar el catalizador de Mo/Fe, lo que impediría que el proceso se realice de manera óptima.

Luego de que el aire se encuentra limpio, se procede a calentarlo hasta alcanzar los 250°C, de forma que tenga las mismas condiciones de proceso que el metanol para que no ocurra ningún tipo de transferencia adversa en el mezclador.

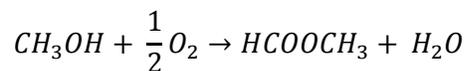
La reacción catalítica de oxidación ocurre a presión atmosférica y a una temperatura que ronda los 250°C y puede ser representada por tres reacciones que ocurren simultáneamente.



Ecuación 1



Ecuación 2



Ecuación 3

La cinética de la reacción principal es definida de la siguiente forma: (Santacesaria, et al., 1981)

Tabla 2. Cinética de la reacción del formaldehído

Reacción	Tipo	Producto	Velocidad de reacción		
			A (cal·h/mol·°C·atm)	E (cal/mol)	β
1	Catalítica heterogénea	Formaldehído y agua	$1.18 \times 10^{10}$	$1.5860 \times 10^5$	0

Donde la ecuación de cinética está representada por:

$$K = A * e^{-E/R \cdot T} * T^{\beta}$$

Ecuación 4

La corriente de salida está conformada por el formaldehído producido, los reactivos que no reaccionaron y los gases inertes del aire, siendo de estos el nitrógeno el más abundante. Donde las dos reacciones secundarias del proceso no se presentan debido a que estas necesitan condiciones de temperatura inferiores a los 250°C, y la reacción principal es altamente exotérmica alcanzando los 879°C, generando un ambiente no propicio para las reacciones secundarias. (Santacesaria, et al., 1981)

En el proceso hay pérdidas físicas y pequeñas cantidades de metanol en el producto final por lo que la conversión en el reactor varía entre un 32.87% y 53.73%, dependiendo del paquete termodinámico utilizado como más adelante se puede observar.

Como el objetivo del proceso es la formación de formaldehído, la corriente gaseosa que sale del reactor es alimentada a un intercambiador de calor para enfriar el fluido hasta los 40°C como se puede ver en la ilustración 1, para obtener una corriente en mezcla líquido-vapor que es llevada a un tanque de separación en dos fases, de manera que, en la fase vapor de este equipo elimine los gases inertes (nitrógeno) que interfieren en la purificación del formaldehído; y la corriente líquida del separador que es rica en metanol, formaldehído y agua sigue el proceso, siendo transportada a una torre de destilación que trabaja con los paquetes termodinámicos de Peng Robinson (PR) y Non random two liquids (NRTL) para separar, obteniendo en la fase líquida el formaldehído a una composición molar de 0.48% y 0.49% respectivamente, y en la fase vapor, el metanol que es recirculado con una composición molar de 0.99%

Para el proceso con el paquete termodinámico de Peng Robinson – Soave (PRSV) cambia un poco. Debido a que después de separar los gases inertes de la corriente rica en metanol, agua y formaldehído, esta también es dirigida hacia una torre de separación, pero se separa el metanol y el formaldehído del agua, ya que en este proceso se genera el doble de la cantidad de agua de los dos anteriores; saliendo así en la corriente de fondo agua en una composición molar de 0.99% y en la corriente de cima metanol y formaldehído en composiciones molares de 0.77% y 0.23% respectivamente. Esta nueva corriente rica en metanol y formaldehído hace necesario la utilización de una nueva torre de separación, donde en la corriente de fondo es extraído el formaldehído en una composición molar de 0.99% y en la corriente de cima se extrae el metanol que es recirculado con una composición molar de 0.99%.

## **2.2.Simulación de procesos.**

La simulación del proceso de la producción de formaldehído se realiza en Aspen Hysys v.8.0 bajo las mismas condiciones de entrada: presión atmosférica, 250°C, 170kmol/h de metanol, 340.5 kmol/h de aire, con un PFR de 0.252m de diámetro y 1m de longitud. De manera que al escoger tres paquetes termodinámicos diferentes (PR, NRTL, PRSV) se puedan comparar los resultados de conversión del metanol en formaldehído, a partir de las siguientes ilustraciones (Santacesaria, et al., 1981).

De acuerdo a las condiciones de proceso establecidas anteriormente tenemos que, los paquetes termodinámicos de Peng Robinson (PR) y Non Random Two Liquids (NRTL) se comportan de manera similar al tener los mismos equipos, aunque las condiciones de entrada al reactor son diferentes, teniendo un flujo molar de entrada de 627.302kmol/h para Peng Robinson (PR) y de 595.397 para Non Random Two Liquids (NRTL), los cuales a la salida del reactor alcanzan los 696.324kmol/h y 663.867kmol/h respectivamente como se muestra más adelante en la tabla 4. Obteniendo una conversión con el paquete termodinámico de Peng Robinson (PR) de 48.13% y 53.73% para Non Random Two Liquids (NRTL) como se indica en la tabla 3.

Para ambos paquetes termodinámicos el proceso sigue de la misma manera, ingresando a un intercambiador de calor para disminuir la temperatura hasta llegar a una mezcla líquido-vapor que permita separar los gases inertes del aire en un separador de dos fases, donde la corriente líquida de salida de este equipo es llevada a una torre de destilación con 17 platos para Peng Robinson (PR) y 9 platos para Non Random Two Liquids (NRTL), las cuales separan el formaldehído por fondo y el metanol por cima.

Por lo tanto la diferencia entre estos paquetes termodinámicos son: las fracciones molares de cada componente, la temperatura de servicios industriales y de corriente de proceso después del reactor y las dimensiones de cada equipo. Pero con el paquete termodinámico de Peng Robinson-Soave (PRSV) existen grandes diferencias a la salida del reactor aunque tiene las mismas condiciones iniciales que los otros dos paquetes termodinámicos.

La corriente a la salida del reactor simulado con este paquete termodinámico tiene una conversión de 32.87% y un flujo molar de 832.306kmol/h, de los cuales 138.995kmol/h son agua convirtiéndose este paquete termodinámico en el mayor productor de agua en comparación con los otros dos, motivo por el cual necesita dos torres de destilación para separar el metanol del formaldehído, tal y como se puede observar en la ilustración 3.

Antes de ingresar a las torres de destilación al igual que para los otros dos paquetes termodinámicos (PR y NRTL), necesita enfriarse hasta obtener una mezcla líquido-vapor que permita separar los gases inertes del aire de los productos de interés. Estos productos ingresan a la primera torre de destilación con 19 platos separando el agua por fondo y una mezcla de metanol - formaldehído por cima en una proporción de 80 a 20 respectivamente. Esta mezcla es transportada hasta la segunda torre de destilación con 5 platos que separa metanol por fondo y el formaldehído por cima ambos en una pureza de 99%.

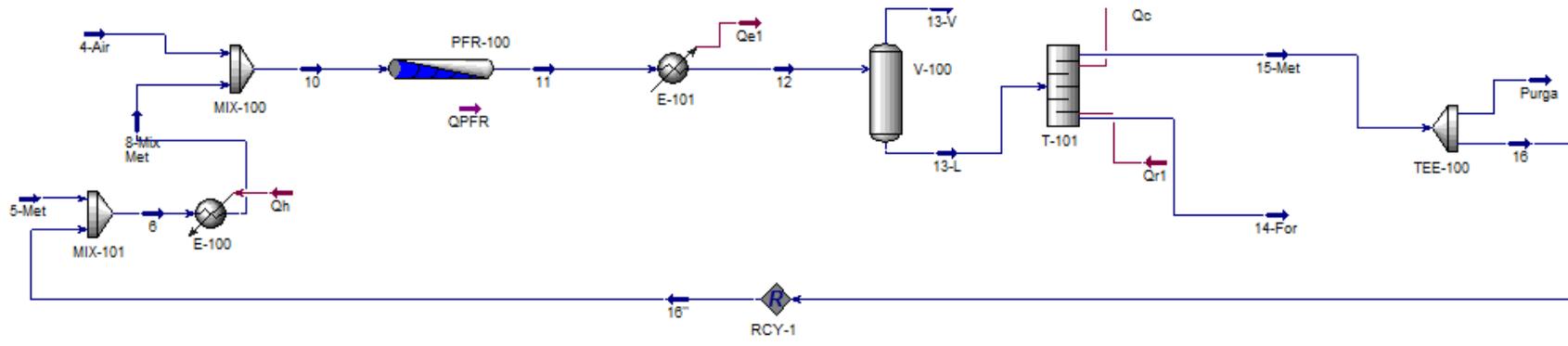


Ilustración 2 Simulación de procesos con paquete termodinámico de Peng Robinson (PR) y Non Random Two Liquids (NRTL)

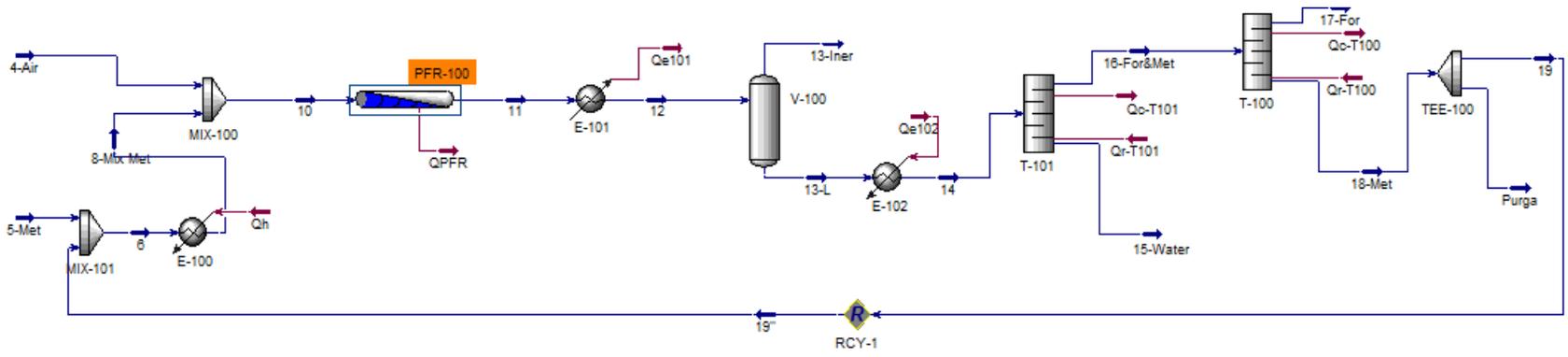
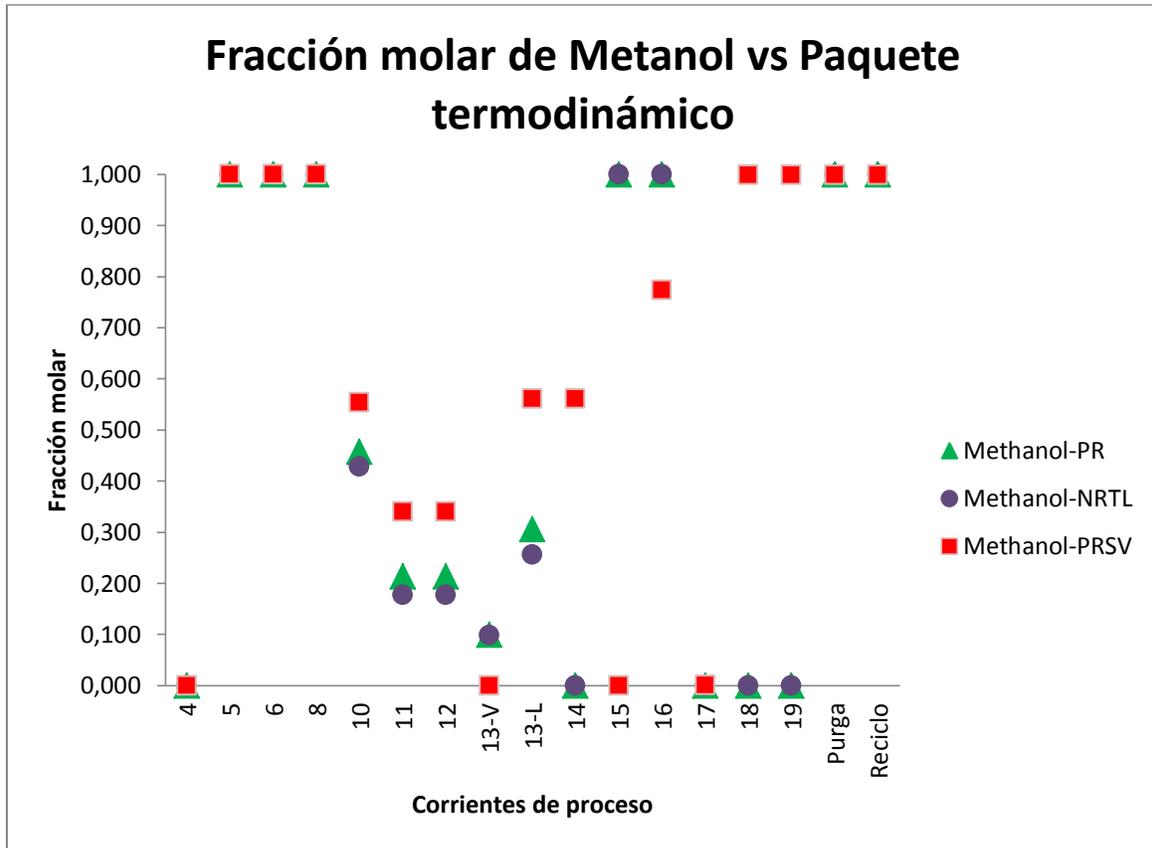


Ilustración 3 Simulación de proceso con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico

De las simulaciones se obtienen las fracciones molares de los componentes permitiendo realizar los siguientes gráficos:

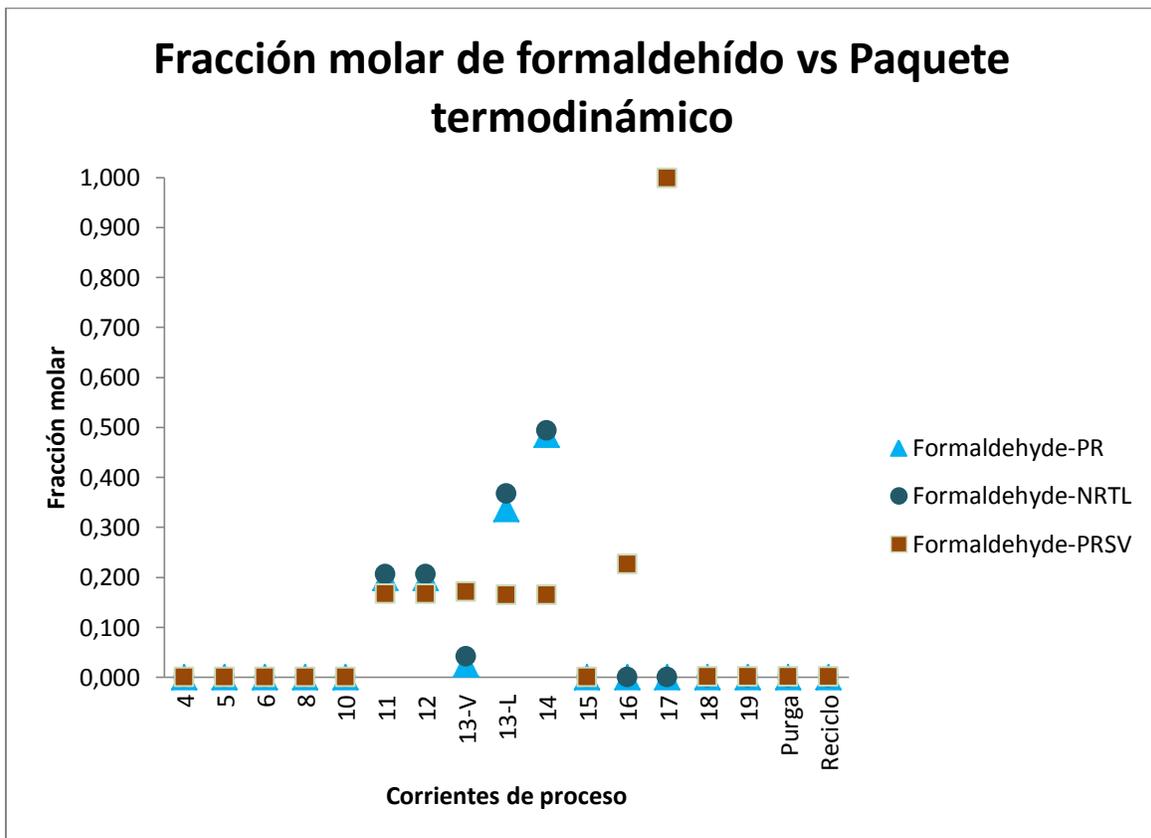


**Gráfica 1. Conversión de metanol a formaldehído vs paquete termodinámico**

Las mismas condiciones de entrada (corrientes 4 y 5) con iguales especificaciones para un PFR, muestra diferencias en las fracciones molares no reaccionantes de metanol para cada paquete termodinámico a la salida del reactor. En el que con Peng Robinson (PR) obtiene una fracción molar de 0.214, 0.178 con Non Random Two Liquids (NRTL) y 0.340 para Peng Robinson-Soave (PRSV) como lo muestra la gráfica 1, lo que indica que con estas condiciones de proceso el metanol está siendo alimentado en exceso, donde Peng Robinson-Soave (PRSV) y Peng Robinson (PR) presentan la mayor cantidad de metanol no reaccionante lo que es coherente ya que estos dos paquetes termodinámicos funcionan mejor con compuestos petroquímicos y no polares.

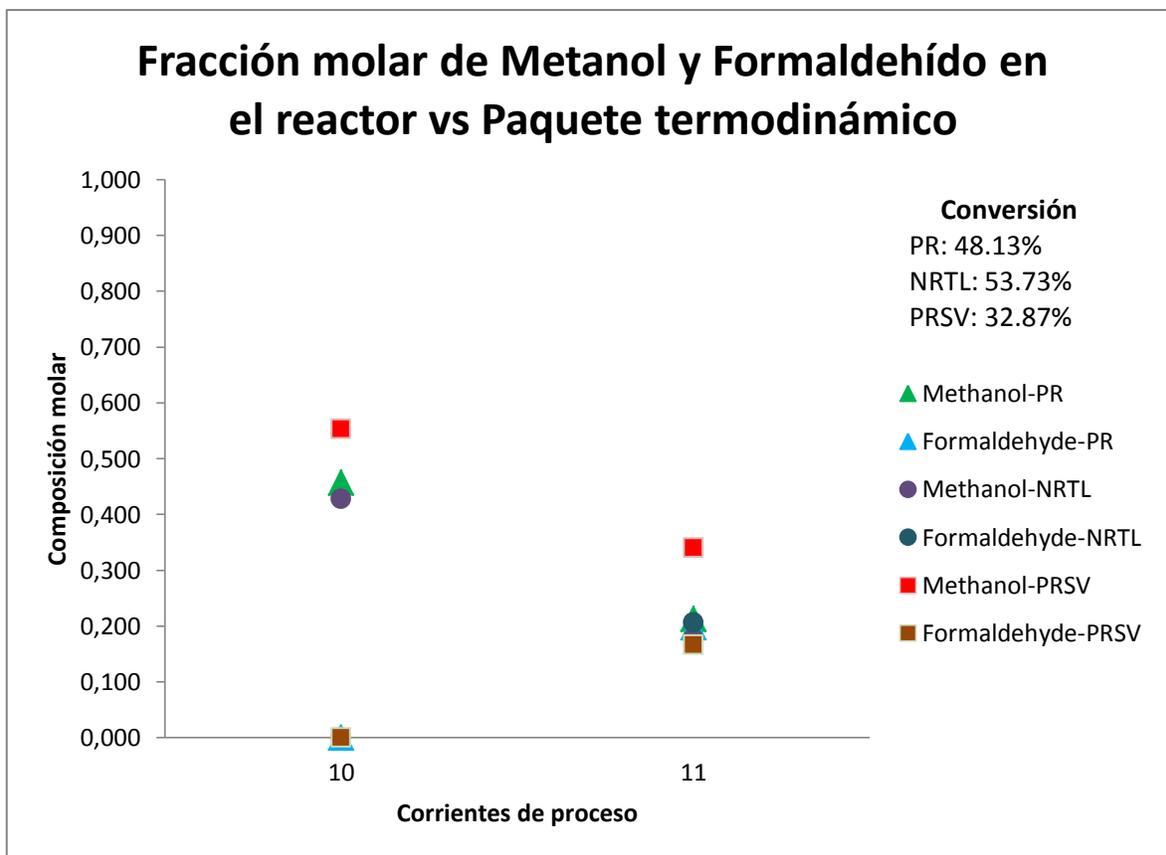
Ahora en la siguiente gráfica se puede ver de manera particular cual es el valor o fracción molar producida de formaldehído con cada paquete termodinámico, donde se muestra concentraciones cercanas con los tres paquetes termodinámicos, donde el paquete termodinámico de Non Random Two

Liquids(NRTL) tiene la mayor concentración con un 0.206, seguido por Peng Robinson (PR) con un 0.198 y por último se encuentra Peng Robinson – Soave (PRSV) con un 0.167 . De acuerdo con esto PR se alej  un 30% de la concentraci n mayor producida, es decir de NRTL, y PRSV un 40%, tal y como se muestra a continuaci n.



Gr fica 2 Producci n de formaldeh do vs paquete termodin mico utilizado

Ahora, en la siguiente gr fica se muestra el comportamiento conjunto de la conversi n de metanol a formaldeh do en todo el proceso productivo con los tres paquetes termodin micos a la vez.



Gráfica 3 Comportamiento del metanol y formaldehído en el reactor vs paquete termodinámico

En las simulaciones de procesos con cada paquete termodinámico la reacción principal de formaldehído alcanzó diferentes conversiones, se tienen diferencias significativas entre las conversiones de la reacción de acuerdo con el paquete termodinámico y lo reportado en la literatura, haciendo la salvedad que lo reportado en la literatura corresponde a condiciones diferentes, como se muestra a continuación: (Speight, 2002)

Tabla 3. Conversión del formaldehído

Paquete termodinámico	% Conversión alcanzada	Reactor
Peng Robinson	48.13	PFR catalítico heterogéneo
Non Random Two Liquids	53.73	PFR catalítico heterogéneo
Peng Robinson-Soave	32.87	PFR catalítico heterogéneo
<b>No especificado, reportado en la literatura</b>	<b>86</b>	<b>Conversión</b>

## 2.3. Block flow diagram (BFD)

### 2.3.1. Paquete termodinámico 1: Peng Robinson (PR)

PRODUCCIÓN DE FORMALDEHÍDO A PARTIR DE LA OXIDACIÓN DEL METANOL UTILIZANDO PENG ROBINSON COMO PAQUETE TERMODINÁMICO Y CATALIZADOR DE Mo/Fe

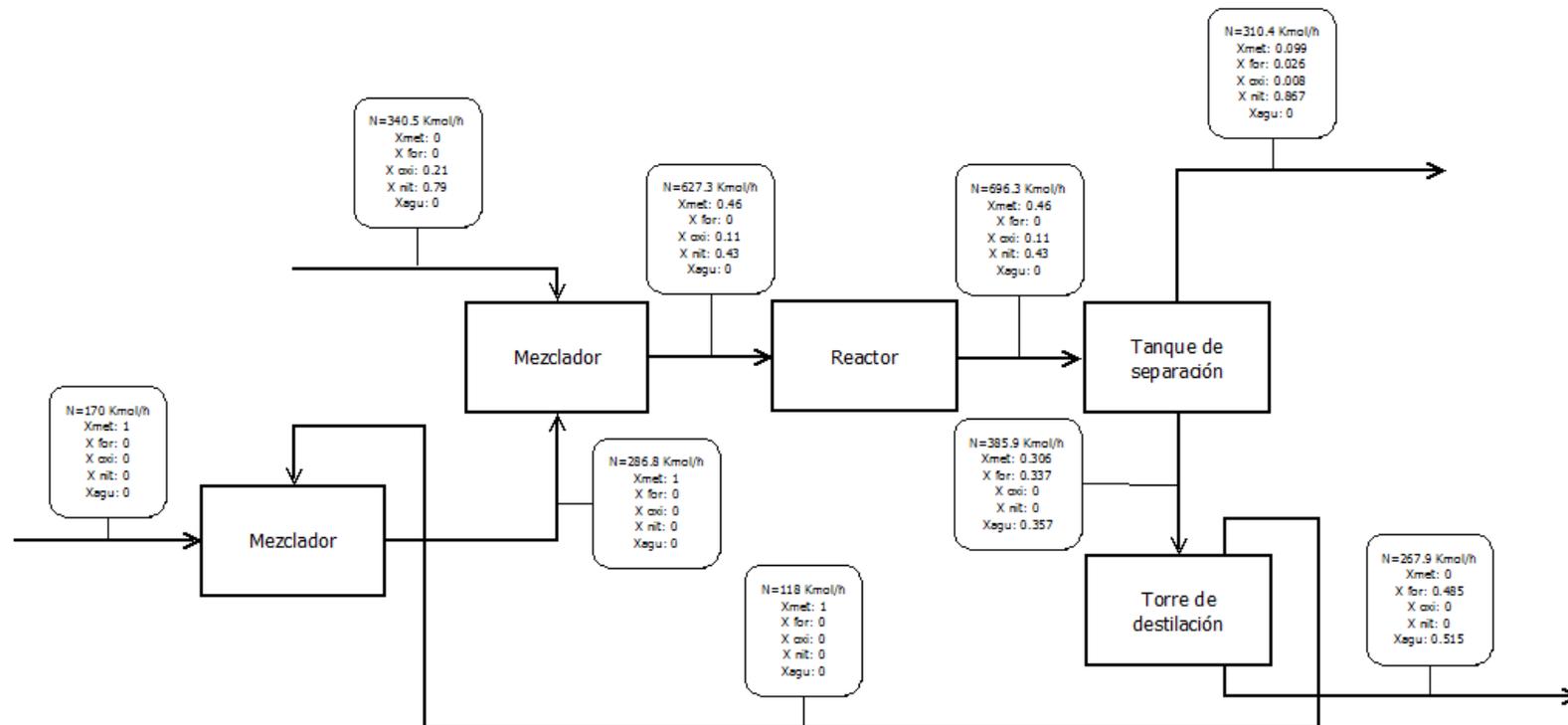


Ilustración 4 BFD del formaldehído con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico

## 2.3.2. Paquete termodinámico 2: Non random two liquids (NRTL)

PRODUCCIÓN DE FORMALDEHÍDO A PARTIR DE LA OXIDACIÓN DEL METANOL UTILIZANDO PRSV COMO PAQUETE TERMODINÁMICO Y CATALIZADOR DE Mo/Fe

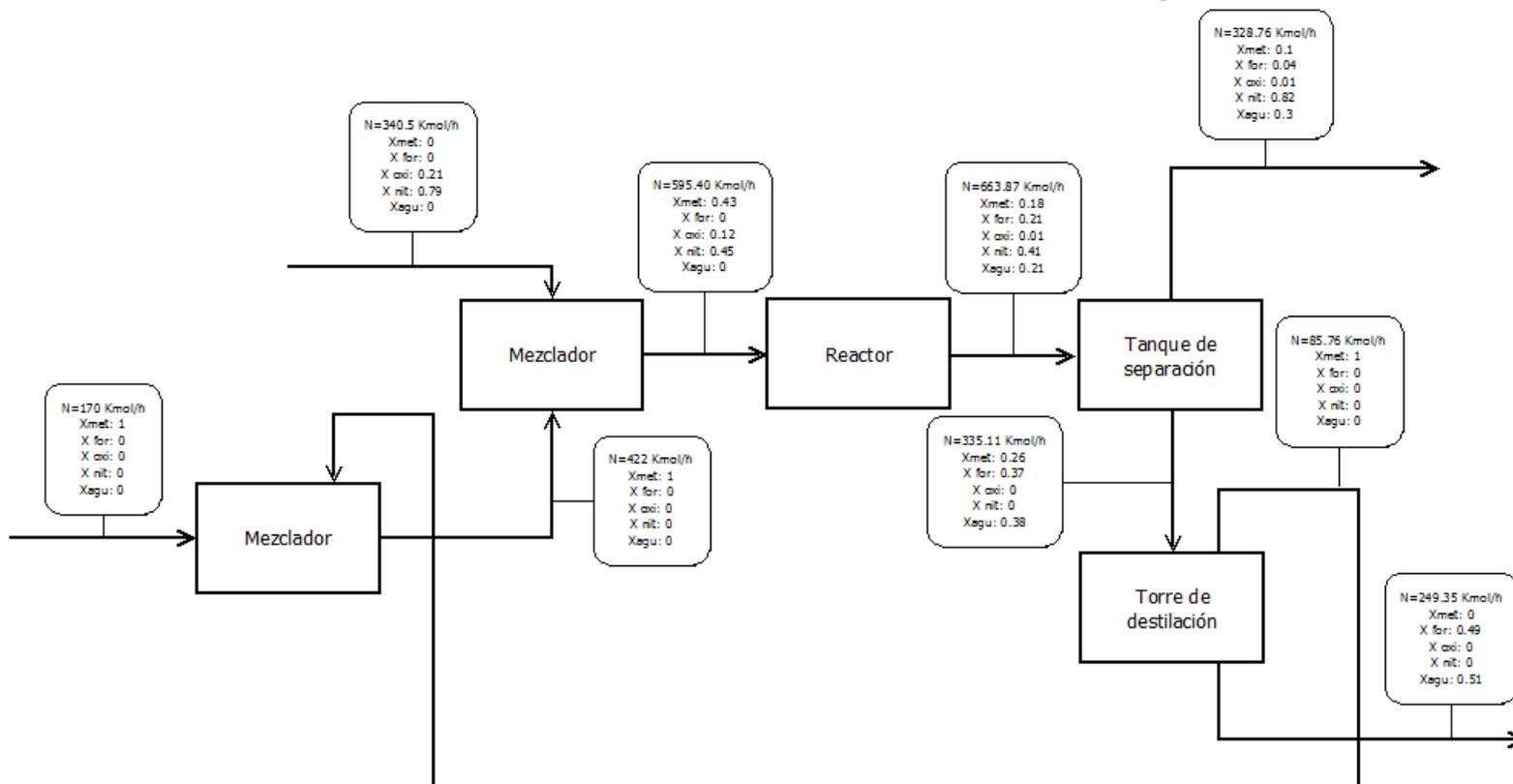


Ilustración 5 BFD del formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico

### 2.3.3. Paquete termodinámico 3: Peng Robinson-Soave (PRSV)

PRODUCCIÓN DE FORMALDEHÍDO A PARTIR DE LA OXIDACIÓN DEL METANOL UTILIZANDO PRSV COMO PAQUETE TERMODINÁMICO Y CATALIZADOR DE Mo/Fe

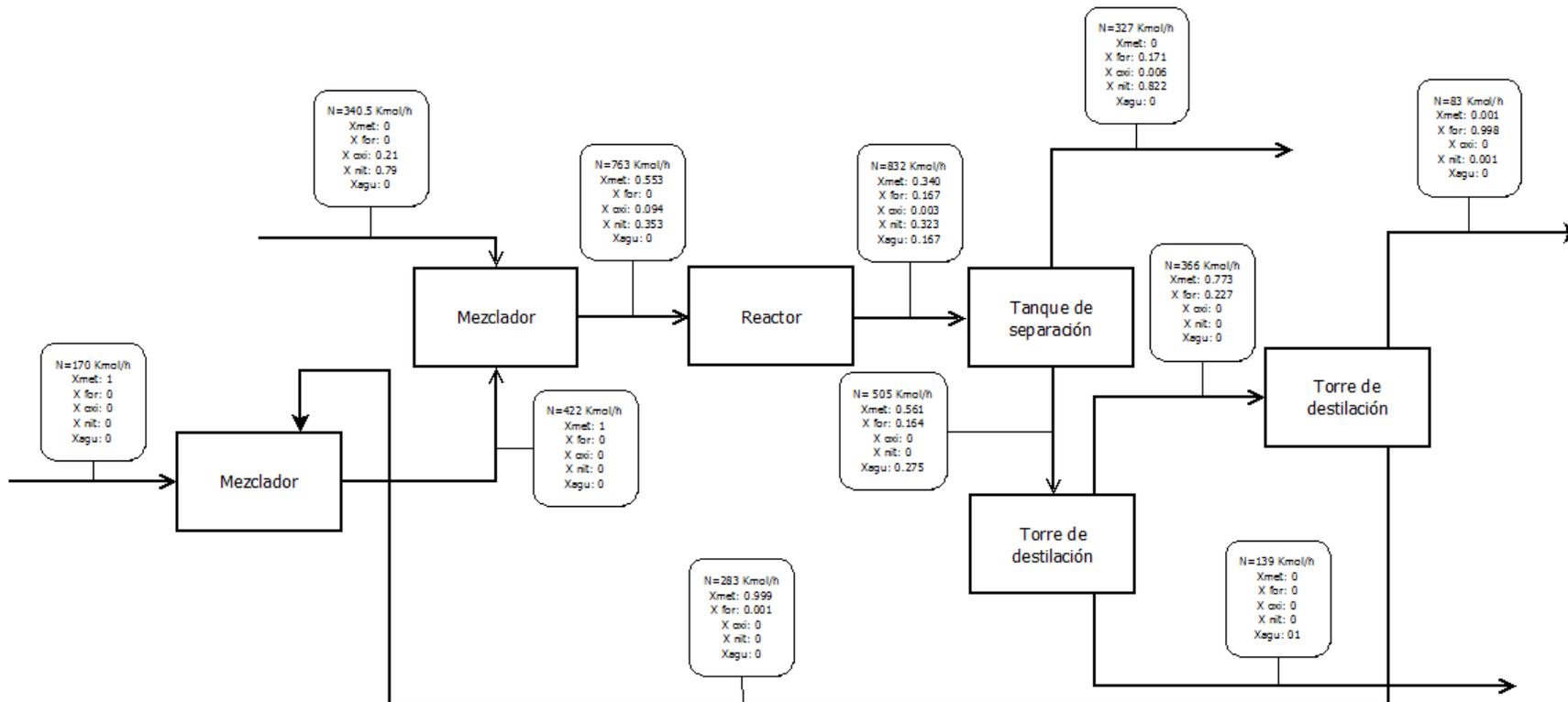


Ilustración 6 BFD del formaldehído con PRSV como paquete termodinámico

## 2.4.Process flow diagram (PFD)

Producción de formaldehído a partir de la oxidación de metanol sobre catalizador Mo/Fe

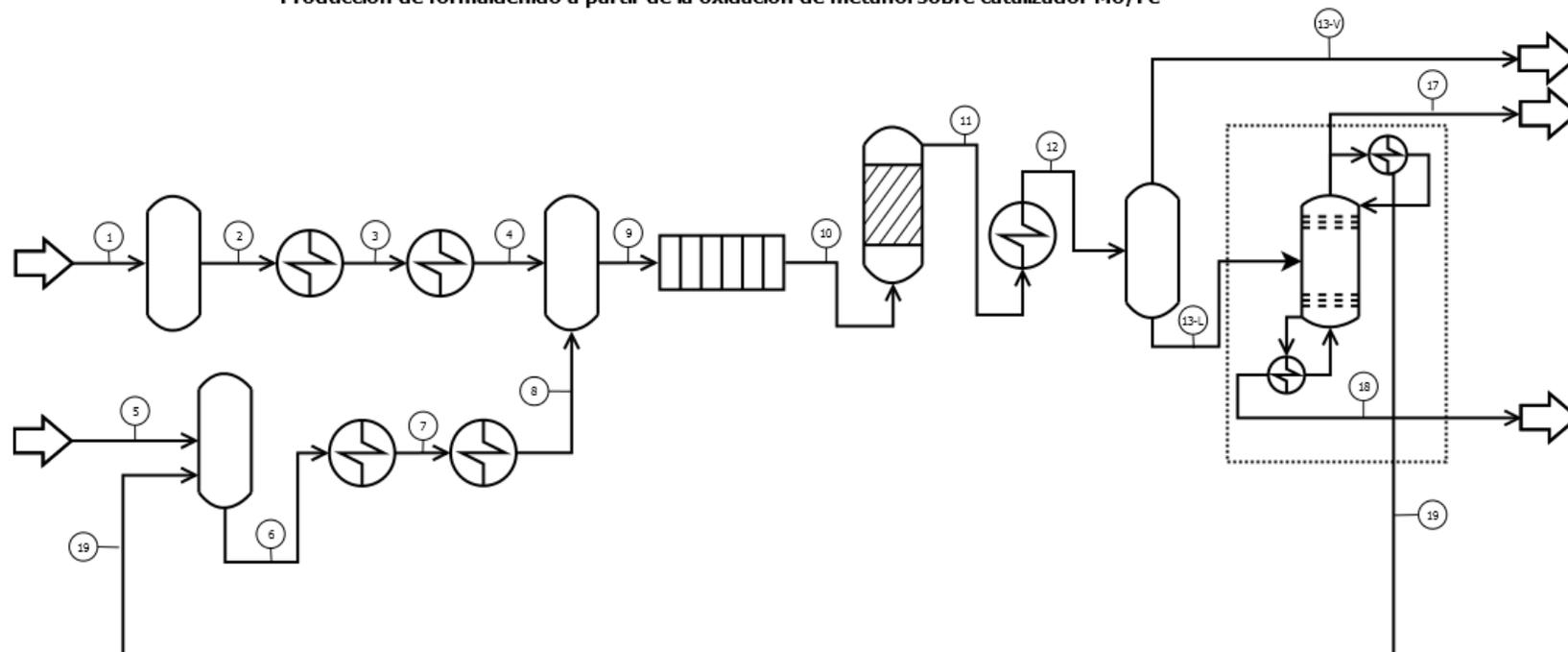


Ilustración 7 PFD para el formaldehído

Tabla 4. Tabla de corrientes para el PFD del formaldehído

	4	5	6	8	10	11	12	13-V	13-L	14	15	16	17	18	19	Purga	Reciclo		
PR	Temperature (°C)	250.000	25.000	64.479	250.000	250.000	878.947	40.000	40.000	40.000	20.626	64.489	64.489	0.000	0.000	0.000	64.489	64.489	
	Pressure (Kpa)	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	151.987	101.325	101.325	0.000	0.000	0.000	101.325	101.325	
	Molar Flow (Kmol/h)	340.500	170.000	286.802	286.802	627.302	696.324	696.324	310.403	385.920	267.932	117.989	116.809	0.000	0.000	0.000	1.180	116.802	
	Mass Flow (Kg/h)	9823.517	5447.123	9189.575	9189.575	19013.092	19013.092	19013.092	8844.711	10168.381	6387.901	3780.480	3742.675	0.000	0.000	0.000	37.805	3742.452	
	Fracción molar	Methanol-PR	0.000	1.000	1.000	1.000	0.457	0.214	0.214	0.099	0.306	0.000	1.000	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000	
		Formaldehyde-PR	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.198	0.198	0.026	0.337	0.485	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
		Oxygen-PR	0.210	0.000	0.000	0.000	0.114	0.004	0.004	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
		Nitrogen-PR	0.790	0.000	0.000	0.000	0.429	0.386	0.386	0.867	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
		H2O-PR	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.198	0.198	0.000	0.357	0.515	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	NRTL	Temperature (°C)	250.000	25.000	64.481	250.000	250.000	920.303	40.000	40.000	40.000	113.378	64.497	64.497	0.000	0.000	0.000	64.497	64.497
Pressure (Kpa)		101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	151.987	101.325	101.325	0.000	0.000	0.000	101.325	101.325		
Molar Flow (Kmol/h)		340.500	170.000	254.897	254.897	595.397	663.867	663.867	328.763	335.105	249.350	85.755	84.897	0.000	0.000	0.000	0.858	84.897	
Mass Flow (Kg/h)		9823.517	5447.123	8166.944	8166.944	17990.461	17990.461	17990.461	9271.125	8719.336	5972.042	2747.294	2719.821	0.000	0.000	0.000	27.473	2719.821	
Fracción molar		Methanol-NRTL	0.000	1.000	1.000	1.000	0.428	0.178	0.178	0.098	0.256	0.000	0.999	0.999	0.000	0.000	0.999	0.999	
		Formaldehyde-NRTL	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.206	0.206	0.042	0.368	0.494	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
		Oxygen-NRTL	0.210	0.000	0.000	0.000	0.120	0.005	0.005	0.009	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
		Nitrogen-NRTL	0.790	0.000	0.000	0.000	0.452	0.405	0.405	0.818	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
		H2O-NRTL	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.206	0.206	0.033	0.376	0.506	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
PRSV		Temperature (°C)	251.000	25.000	56.595	250.000	250.081	711.505	-50.000	-50.000	-50.000	60.000	111.583	62.522	-70.700	77.577	77.577	77.577	77.578
	Pressure (Kpa)	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	101.325	151.987	101.325	101.325	151.987	151.987	151.987	151.987	151.987	
	Molar Flow (Kmol/h)	340.500	170.000	422.417	422.417	762.917	832.306	832.306	327.065	505.241	505.241	138.779	366.463	82.888	283.574	280.739	2.836	252.417	
	Mass Flow (Kg/h)	9823.517	5447.123	13534.064	13534.064	23357.582	23357.582	23357.582	9283.265	14074.316	14074.316	2500.305	11574.011	2488.832	9085.179	8994.327	90.852	8086.941	
	Fracción molar	Methanol-PRSV	0.000	1.000	0.999	0.999	0.553	0.340	0.340	0.000	0.561	0.561	0.000	0.773	0.999	0.999	0.999	0.999	
		Formaldehyde-PRSV	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000	0.167	0.167	0.171	0.164	0.164	0.000	0.227	0.998	0.001	0.001	0.001	
		Oxygen-PRSV	0.210	0.000	0.000	0.000	0.094	0.003	0.003	0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
		Nitrogen-PRSV	0.790	0.000	0.000	0.000	0.353	0.323	0.323	0.822	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	
		H2O-PRSV	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.167	0.167	0.000	0.275	0.275	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	

La ilustración 7 corresponde al diagrama de flujo de proceso (PFD) para el formaldehído con los paquetes termodinámicos Peng Robinson (PR) y Non Random Two Liquids (NRTL), pero en esta ilustración también puede verse un recuadro punteado que corresponde a un cambio en el diagrama para el paquete termodinámico Peng Robinson-Soave (PRSV), el cual se amplía a continuación:

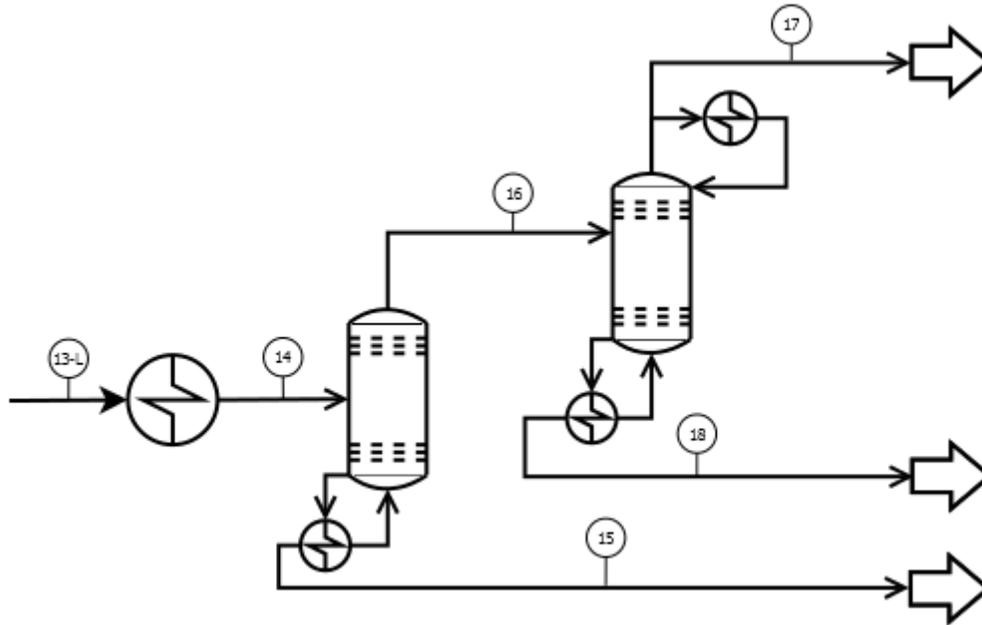


Ilustración 8 Corrección en el PFD de formaldehído para PRSV como paquete termodinámico

Este cambio en el diagrama de flujo de procesos para el paquete termodinámico Peng Robinson-Soave (PRSV) se debe a la cantidad de agua producida en este proceso, lo que hace necesario separar esta antes de purificar los productos de interés, metanol para recircularlo y formaldehído como objetivo del proceso.

## 2.5. Costos del proceso

Para determinar el costo de proceso es necesario conocer datos claves de los equipos que se van a costear, es decir, para una bomba la potencia requerida, para un intercambiador de calor el área de transferencia, para un tanque el volumen, para un reactor el diámetro y la longitud, y así sucesivamente para el resto de los equipos.

En la simulación de procesos realizada en Aspen Hysys v.8.0 se utilizan unos intercambiadores de calor definidos como *coolers* y *heaters* dependiendo de su función, donde es necesario calcular el cambio en la temperatura del servicio

utilizado por medio de heurística ya que para la simulación de estos equipos no es necesario especificarlas. Teniendo estas variables identificadas se puede calcular el área de transferencia del intercambiador, variable característica de este equipo con la cual se puede determinar qué tipo de intercambiador tiene las características necesarias para este proceso específico, todo esto con base a valores heurísticos (Walas, 1990) (Henao, 2006). Cada intercambiador de calor tiene un servicio industrial que cede o recibe el calor del fluido de proceso, el cual es seleccionado dependiendo de la temperatura que necesite alcanzar, escogiendo desde gas natural para hornos hasta agua de proceso (Henao, 2006) (EPM, 2013) (Geankoplis, 1998) (Kakac, et al., 2002)

Los servicios industriales utilizados para cada paquete termodinámico e intercambiador de calor son:

**Tabla 5. Intercambiadores de calor y servicios industriales para Peng Robinson (PR)**

Equipo	Calor (W)	U (W/m <sup>2</sup> ·K)	T <sub>inicial</sub> (°C)	T <sub>final</sub> (°C)	ΔT <sub>LM</sub> (°C)	A (m <sup>2</sup> )	t <sub>inicial</sub> (°C)	t <sub>final</sub> (°C)	Servicio
E-100 (Qh)	5191511.98	680.900	64.479	250.000	20.533	371.330	410.000	74.000	Aceite térmico
E-101 (Qe1)	9595536.978	340.500	878.947	40.000	90.765	310.481	30.000	50.000	Agua de enfriamiento
R1 (T-101)	6360895.856	680.900	40.000	20.626	23.723	393.784	280.000	80.000	Vapor de alta
C (T-101)	5851320.954	680.900	40.000	64.489	23.322	368.479	250.000	50.000	Vapor de media

**Tabla 6. Intercambiadores de calor y servicios industriales para Non Random Two Liquids (NRTL)**

Equipo	Calor (W)	U (W/m <sup>2</sup> ·K)	T <sub>inicial</sub> (°C)	T <sub>final</sub> (°C)	ΔT <sub>LM</sub> (°C)	A (m <sup>2</sup> )	t <sub>inicial</sub> (°C)	t <sub>final</sub> (°C)	Servicio
E-100 (Qh)	33670487.53	680.90	64.48	250.00	18.55	2666.21	450.00	100.00	Aceite térmico
E-101 (Qe1)	134619984.01	340.50	920.30	40.00	79.97	4943.93	30.00	200.00	Agua de proceso
R1 (T-101)	39615411.04	680.90	40.00	113.38	11.30	5148.33	220.00	60.00	Vapor de media
C (T-101)	21788852.15	680.90	40.00	64.95	20.09	1592.97	250.00	60.00	Vapor de media

**Tabla 7. Intercambiadores de calor y servicios industriales para Peng Robinson-Soave (PRSV)**

Equipo	Calor (W)	U (W/m <sup>2</sup> K)	T <sub>inicial</sub> (°C)	T <sub>final</sub> (°C)	ΔT <sub>LM</sub> (°C)	A (m <sup>2</sup> )	t <sub>inicial</sub> (°C)	t <sub>final</sub> (°C)	Servicio
E-100 (Qh)	6182882.61	680.900	56.595	250.00	18.916	480.04	450.00	90.00	Aceite térmico
E-101 (Qe1)	15104841.9	340.500	711.51	-50.00	51.354	863.83	500.00	750.00	Gas natural
R1 (T-101)	11249991.1	680.900	60.000	111.58	17.755	930.59	250.00	70.00	Vapor de media
C (T-101)	8439053.79	680.900	60.000	62.522	14.835	835.48	200.00	80.00	Vapor de baja
PFR	456215.014	680.900	250.08	711.51	3.764	178.02	900	400	Gas natural
E-102	3198685.25	340.500	-50.00	60.000	10.630	883.74	300	80	Vapor de alta
R (T-100)	2572894.40	680.900	62.522	77.577	10.075	375.05	200.00	100.00	Vapor de baja
C (T-100)	1184813.05	680.900	62.522	-70.70	11.124	156.42	20	75	Agua de enfriamiento

Los equipos de proceso que son costeados a partir de sus valores característicos y flujos de producción por año, tanto materias primas como productos y servicios industriales se muestran a continuación para cada paquete termodinámico:

**Tabla 8. Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de formaldehído con el paquete termodinámico de Peng Robinson (PR)**

Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de Formaldehído							
EQUIPOS							
	Descripción	Tipo	Cantidad	Capacidad		Material de construcción	Presión operativa (barg)
E-100	Intercambiador Líquido-Vapor	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	371.330	S.S	1.013
PFR-100	Reactor PFR	Recipiente empacado	1	D[m] , L[m]	0.252   1.000	S.S	1.013
E-101	Intercambiador Vapor-Equilibrio	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	310.481	S.S	1.013
V-100	Tanque separados 2 fases	Recipiente	1	D[m] , L[m]	1.330   3.989	S.S	1.013
T-101	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.186   0.742	S.S	1.520
R1 (T-101)	Re hervidor de la T-101	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	393.784	S.S	1.520
PT-101	Platos de la T-101	Perforados	17	D[m]	0.186	C.S	1.013
C (T-101)	Condensador de la T-101	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	368.479	S.S	1.013
ENTRADAS Y SALIDAS							
	Tipo	Flujos [kg/año]					
Metanol	Materia prima	47,063,144					
Nitrógeno	Materia prima	67,051,398.086					
Oxígeno	Materia prima	17,823,789.365					
Formaldehído	Producto	32,565,831					
Agua	Producto	32,564,845					
Agua de enfriamiento	Servicio Industrial	1,427,353,334,131					
Vapor de media presión (MPS)	Servicio Industrial	7,307,748,923,748					
Vapor de alta presión (HPS)	Servicio Industrial	7,933,011,416,075					
Aceite térmico	Servicio Industrial	8,643,651,581,709					

**Tabla 9. Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico**

Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de Formaldehído								
EQUIPOS								
	Descripción	Tipo	Cantidad	Capacidad		Material de construcción	Presión operativa (barg)	
E-100	Intercambiador Líquido-Vapor	Enfriador de aire	1	A[m <sup>2</sup> ]	2666.213		S.S	1.013
PFR-100	Reactor PFR	Recipiente empacado	1	D[m] , L[m]	0.252	1.000	S.S	1.013
E-101	Intercambiador Vapor-Equilibrio	Enfriador de aire	1	A[m <sup>2</sup> ]	4943.926		S.S	1.013
V-100	Tanque separados 2 fases	Recipiente	1	D[m] , L[m]	1.2787	3.8362	S.S	1.013
T-101	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.1680	0.6719	S.S	1.520
R1 (T-101)	Re hervidor de la T-101	Enfriador de aire	1	A[m <sup>2</sup> ]	5148.326		S.S	1.520
PT-101	Platos de la T-101	Perforados	9	D[m]	0.1680		C.S	1.013
C (T-101)	Condensador de la T-101	Enfriador de aire	1	A[m <sup>2</sup> ]	1592.971		S.S	1.013
ENTRADAS Y SALIDAS								
	Tipo		Flujos [kg/año]					
Metanol	Materia prima		47,063,144					
Nitrógeno	Materia prima		67,051,398					
Oxígeno	Materia prima		17,823,789					
Formaldehído	Producto		32,061,644					
Agua	Producto		32,067,706					
Agua de proceso	Servicio Industrial		1,900,517,421					
Vapor de media presión (MPS)	Servicio Industrial		869,458,772					
Aceite térmico	Servicio Industrial		230,883,343					

**Tabla 10. Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de formaldehído simulada con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico**

Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de Formaldehído							
EQUIPOS							
	Descripción	Tipo	Cantidad	Capacidad		Material de construcción	Presión operativa (barg)
E-100	Intercambiador Líquido-Vapor	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	480.039	S.S	1.013
PFR-100	Reactor PFR	Recipiente empacado	1	D[m] , L[m]	0.2523   1.0	S.S	1.013
E-101	Horno	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	863.829	S.S	1.013
V-100	Tanque separados 2 fases	Recipiente	1	D[m] , L[m]	0.901   2.704	S.S	1.013
T-101	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.198   0.792	S.S	1.520
R1 (T-101)	Re hervidor de la T-101	Enfriador de aire	1	A[m <sup>2</sup> ]	930.588	S.S	1.520
PT-101	Platos de la T-101	Perforados	19	D[m]	0.198	C.S	1.013
C (T-101)	Condensador de la T-101	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	835.5	S.S	1.013
E - 102	Intercambiador Líquido -Equilibrio	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	883.7	S.S	1.013
T - 100	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.525   3.000	S.S	1.52
R (T-100)	Re hervidor de la T-100	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	375.1	S.S	1.52
C (T-100)	Condensador de la T-100	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	156.418	S.S	1.013
PT - 100	Platos de la T-100	Perforados	5	D[m]	0.525	C.S	1.013
ENTRADAS Y SALIDAS							
	Tipo	Flujos [kg/año]					
Metanol	Materia prima	47,063,144					
Nitrógeno	Materia prima	67,051,398					
Oxígeno	Materia prima	17,823,789					
Formaldehído	Producto	33,707,232					
Agua	Producto	33,655,973					
Agua de enfriamiento	Servicio Industrial	484,320,996,794					
Vapor de baja presión (LPS)	Servicio Industrial	8,572,285,989,066					
Vapor de media presión (MPS)	Servicio Industrial	12,645,161,588,105					
Vapor de alta presión (HPS)	Servicio Industrial	3,466,067,988,049					
Aceite térmico	Servicio Industrial	29,586,520,113,172					
Gas natural	Servicio Industrial	15,365,199,442,916					

### 2.5.1. Costos de capital

Los costos de capital de una planta de producción de formaldehído con una capacidad entre 33.000 y 32.061 toneladas/año, está determinado por la cantidad, tipo de equipos de proceso y la adecuación de la planta necesaria para llevar a cabo la producción. Siendo proporcionales al tamaño y material del cual estén construidos los equipos principales, dependiendo directamente del nivel de conversión del reactor (Henao, 2006)

Además son considerados costos de inversión ya que los equipos de procesos de la planta se convierten en activos de esta, los cuales pueden ser vendidos o permutados en el tiempo para conseguir dinero por fuera de su objeto comercial, para capitalizar, optimizar o liquidar el proceso de producción.

A continuación se muestra cual es el comportamiento de los costos de capital para una planta de producción de formaldehído dependiendo de su paquete termodinámico. (Henaó, 2006)

Tabla 11. Costos de capital de una planta de formaldehído con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico

Cálculo del costos de capital de la planta de formaldehído																					
Intercambiadores de calor																					
	FM	$\log_{10}(F_P)=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2$						$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$			
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
E-100 (Qh)	2.3	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	1.013	0.862	1.8	1.5	4.772	3.300	3.2138	0.2688	0.07961	371.3	382	400	\$ 28,201	\$ 134,588	\$ 93,064
E-101 (Qe1)	2.3	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	1.013	0.862	1.8	1.5	4.772	3.300	3.2138	0.2688	0.07961	310.5	382	400	\$ 25,006	\$ 119,342	\$ 82,521
R1 (T-101)	2.3	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	1.52	0.880	1.8	1.5	4.837	3.300	3.2138	0.2688	0.07961	393.8	382	400	\$ 29,350	\$ 141,967	\$ 96,854
C (T-101)	2.3	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	1.013	1.000	1.8	1.5	5.250	3.300	3.2138	0.2688	0.07961	368.5	382	400	\$ 28,054	\$ 147,285	\$ 92,579
Recipientes de proceso																					
	FM	$F_P=0.5146+0.6838 \cdot \log_{10}(P)+0.2970 \cdot (\log_{10}(P))^2+0.0235 \cdot (\log_{10}(P))^6+0.0020 \cdot (\log_{10}(P))^8$						$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$			
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
PFR-100	4	----	----	----	----	----	1.013	1.000	1.62	1.47	7.500	3.090	3.1032	0.5782	0.0632	0.0500	382	400	\$ 301	\$ 2,254	\$ 929
V-100	4	----	----	----	----	----	1.013	1.000	1.62	1.47	7.500	3.090	3.4204	0.8141	-0.0046	1.3887	382	400	\$ 3,601	\$ 27,006	\$ 11,126
Recipientes a presión																					
	FM	$F_P=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2+C_4 \cdot (\log_{10}(P))^6+C_5 \cdot (\log_{10}(P))^8$						$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$			
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
T-101	1	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	1.52	0.649	2.5	1.72	3.616	4.220	3.6237	0.5262	0.2146	0.027	382	400	\$ 2,219	\$ 8,025	\$ 9,366
Internos (Platos)																					
	FM											$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot N \cdot Fq \cdot (K_1+K_2 \cdot A+K_3 \cdot A^2)$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$			
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	Fq	N	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
PT-101	1	--	--	--	--	--	--	1	1.200	1.200	1.5	17	235	19.8	75.07	0.027	382	400	\$ 6,291	\$ 7,549	\$ 7,549
																			Σ	\$ 588,014	\$ 393,987
Costos totales																					
$C_{MT}=1.18(\Sigma C_{M(k)})$		\$ 693,856		$ICF=C_{MG}=C_{MT}+0.35(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 831,752		$L=0.1(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 39,399		$ICF_L=C_{MT}+0.25(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 792,353							

Tabla 12. Costos de capital de una planta de formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico

Cálculo del costos de capital de la planta de formaldehído																					
Intercambiadores de calor																					
	FM	$\log_{10}(F_p)=C_1+C_2\log_{10}(P)+C_3(\log_{10}(P))^2$						$F_{CM}=B_1+B_2.F_p.F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}).10^{(K_1+K_2\log_{10}(A)+K_3(\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM}.C_{Eq}^0$			
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>p</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
E-100 (Qh)	3	-0.06154	0.0473	0	--	--	1.013	0.868	1.53	1.27	4.839	2.800	3.6418	0.4053	0	2666.2	382	400	\$112,282	\$ 543,295	\$ 314,391
E-101 (Qe1)	3	-0.06154	0.0473	0	--	--	1.013	0.868	1.53	1.27	4.839	2.800	3.6418	0.4053	0	4943.9	382	400	\$144,213	\$ 697,795	\$ 403,796
R1 (T-101)	3	-0.06154	0.0473	0	--	--	1.52	0.885	1.8	1.5	5.784	3.300	3.2138	0.2688	0.07961	5148.3	382	400	\$212,930	\$1,231,498	\$ 702,669
C (T-101)	3	-0.06154	0.0473	0	--	--	1.013	1.000	1.8	1.5	6.300	3.300	3.2138	0.2688	0.07961	1593.0	382	400	\$ 81,448	\$ 513,124	\$ 268,779
Recipientes de proceso																					
	FM	$FP=0.5146+0.6838.\log_{10}(P)+0.2970.(\log_{10}(P))^2+0.0235.(\log_{10}(P))^6+0.0020.(\log_{10}(P))^8$						$FCM=B_1+B_2.FP.FM, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}).10^{(K_1+K_2\log_{10}(A)+K_3(\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=FCM.C_{Eq}^0$			
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	FP	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
PFR-100	4	---	---	---	---	---	1.013	0.518	2.5	1.72	6.067	4.220	2.9201	0.5056	0.1261	0.0500	382	400	\$ 313	\$ 1,900	\$ 1,321
V-100	4	---	---	---	---	---	1.013	0.518	2.5	1.72	6.067	4.220	3.4204	0.8141	-0.0046	1.2843	382	400	\$ 3,379	\$ 20,501	\$ 14,260
Recipientes a presión																					
	FM	$F_p=C_1+C_2.\log_{10}(P)+C_3.(\log_{10}(P))^2+C_4.(\log_{10}(P))^6+C_5.(\log_{10}(P))^8$						$F_{CM}=B_1+B_2.F_p.F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}).10^{(K_1+K_2\log_{10}(A)+K_3(\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM}.C_{Eq}^0$			
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>p</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
T-101	1	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	1.52	0.649	2.5	1.72	3.616	4.220	3.6237	0.5262	0.2146	0.0222	382	400	\$ 2,294	\$ 8,294	\$ 9,679
Internos (Platos)																					
	FM											$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}).N.Fq.(K_1+K_2.A+K_3.A^2)$						$C_M=F_{CM}.C_{Eq}^0$			
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>p</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	F <sub>q</sub>	N	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
PT-101	1	--	--	--	--	--	--	1	1.200	1.200	1.5	9	235	19.8	75.07	0.0222	382	400	\$ 3,329	\$ 3,994	\$ 3,994
Costos totales																					
$C_{MT}=1.18(\Sigma C_{M(k)})$		\$ 3,564,072		$ICF=C_{MG}=C_{MT}+0.35(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 4,165,684		$L=0.1(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 171,889		$ICF_L=C_{MT}+0.25(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 3,993,795							

Tabla 13. Costos de capital para una planta de formaldehído con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico

Cálculo del costos de capital de la planta de formaldehído																					
Intercambiadores de calor																					
	FM	$\log_{10}(F_P)=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2$							$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$		
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
E-100 (Qh)	2.3	0	0	0	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	480.0	382	400	\$ 102,375	\$ 455,671	\$ 286,650
E-101 (Qe1)	2.3	0	0	0	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	863.8	382	400	\$ 131,350	\$ 584,638	\$ 367,779
R1 (T-101)	2.3	0	0	0	--	--	1.52	1.000	1.8	1.27	4.721	3.070	3.2138	0.2688	0.07961	930.6	382	400	\$ 54,131	\$ 255,551	\$ 166,181
C (T-101)	2.3	0	0	0	--	--	1.013	0.000	1.53	0.27	1.530	1.800	3.8528	0.4242	0	835.5	382	400	\$ 129,503	\$ 198,140	\$ 233,106
E - 102	2.3	0	0	0	--	--	1.013	1.000	1.8	1.27	4.721	3.070	3.2138	0.2688	0.07961	883.7	382	400	\$ 52,101	\$ 245,971	\$ 159,952
R (T-100)	3.3	0	0	0	--	--	0	2.000	1.53	2.27	16.512	3.800	3.8528	0.4242	0	375.1	382	400	\$ 92,199	\$ 1,522,394	\$ 350,357
C (T-100)	4.3	0	0	0	--	--	0	3.000	1.8	3.27	43.983	5.070	3.2138	0.2688	0.07961	156.4	382	400	\$ 16,104	\$ 708,304	\$ 81,647
Recipientes de proceso																					
	FM	$F_P=0.5146+0.6838 \cdot \log_{10}(P)+0.2970 \cdot (\log_{10}(P))^2+0.0235 \cdot (\log_{10}(P))^3+0.0020 \cdot (\log_{10}(P))^4$							$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$		
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
PFR-100	4	---	---	---	---	---	1.013	1.000	1.62	1.47	7.500	3.090	2.9202	0.5056	0.1261	0.0500	382	400	\$ 313	\$ 2,349	\$ 968
V-100	4	---	---	---	---	---	1.013	1.000	1.62	1.47	7.500	3.090	3.3592	0.5905	0.1106	0.6381	382	400	\$ 1,854	\$ 13,907	\$ 5,730
Recipientes a presión																					
	FM	$F_P=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2+C_4 \cdot (\log_{10}(P))^3+C_5 \cdot (\log_{10}(P))^4$							$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$		
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
T-101	1	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	1.52	0.649	2.5	1.72	3.616	4.220	3.3392	0.5538	0.2851	0.0308	382	400	\$ 1,491	\$ 5,390	\$ 6,291
T-100	1	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	1.52	0.649	2.5	1.72	3.616	4.220	3.4746	0.5893	0.2053	0.2169	382	400	\$ 1,563	\$ 5,651	\$ 6,595
Internos (Platos)																					
	FM												$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot N \cdot Fq \cdot (K_1+K_2 \cdot A+K_3 \cdot A^2)$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$		
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	Fq	N	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
PT-101	1	--	--	--	--	--	1.013	1	1.200	1.200	1.5	19	235	19.8	75.07	0.0308	382	400	\$ 7,033	\$ 8,440	\$ 8,440
PT-100	1	--	--	--	--	--	1.013	1	1.200	1.200	2	5	235	19.8	75.07	0.2169	382	400	\$ 2,543	\$ 3,051	\$ 3,051
																			<b>Σ</b>	\$ 4,009,458	\$ 1,676,747
Costos totales																					
$C_{MT}=1.18(\Sigma C_{M(k)})$		\$ 4,731,160		$ICF=C_{MG}=C_{MT}+0.35(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 5,318,022		$L=0.1(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 167,675		$ICFL=C_{MT}+0.25(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 5,150,347							

### **2.5.2. Costos de operación**

Los costos de operación de una planta de producción de formaldehído están determinados por los gastos necesarios para cumplir con la razón social de la misma como lo son: el consumo de materias primas, los cuales dependen de la selectividad operativa del reactor; la cantidad y tipo de servicio industrial utilizado; la mano de obra y los costos de los tratamientos de los residuos industriales generados.

Por lo tanto, los costos de operación de una planta de producción de formaldehído se dividen de acuerdo al paquete termodinámico utilizado, así: (EPM, 2013) (Reed business information limited, 2013) (Turton, et al., 2009)

Tabla 14. Costos de operación para la producción de formaldehído con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico

<b>Cálculo del costos operativos de una planta de producción de Formaldehído</b>				
<b>Costos de materias primas (C<sub>MP</sub>)</b>				
Descripción		Consumo anual F <sub>MP(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>MP(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>MP(k)</sub> [\$/año]
Metanol		47,063,143.65	4.64	\$ 218,467,112.84
Nitrógeno		67,051,398.09	0.00	\$ -
Oxígeno		17,823,789.36	0.00	\$ -
<b>Total C<sub>MP</sub> [\$/año]</b>				<b>\$ 218,467,112.84</b>
<b>Costos de tratamiento de residuos industriales (C<sub>TR</sub>)</b>				
Tipo		Consumo anual F <sub>R(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>TR(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>TR(k)</sub> [\$/año]
Agua de enfriamiento	(Residuo no peligroso)	1,427,353,334,130.81	0.36	\$ 513,847,200,287.09
Vapor de media presión (MPS)	(Residuo no peligroso)	7,307,748,923,747.54	0.36	\$ 2,630,789,612,549.11
Vapor de alta presión (HPS)	(Residuo no peligroso)	7,933,011,416,075.43	0.36	\$ 2,855,884,109,787.16
<b>Total C<sub>TR</sub> [\$/año]</b>				<b>\$ 6,000,520,922,623.36</b>
<b>Costos de servicios industriales (C<sub>SI</sub>)</b>				
Tipo		Consumo anual F <sub>SI(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>SI(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>SI(k)</sub> [\$/año]
Agua de enfriamiento		1,427,353,334,130.81	0.0148	\$ 21,124,829,345.14
Vapor de media presión (MPS)		7,307,748,923,747.54	0.0283	\$ 206,809,294,542.06
Vapor de alta presión (HPS)		7,933,011,416,075.43	0.0299	\$ 237,197,041,340.66
Aceite térmico		8,643,651,581,709.02	0.5490	\$ 4,745,364,718,358.25
<b>Total CSI [\$/año]</b>				<b>\$ 5,210,495,883,586.10</b>
<b>Costos de mano de obra operativa (C<sub>MOO</sub>)</b>				
Equipo		N <sub>k</sub>	L <sub>s(k)</sub>	L <sub>s(k).N<sub>k</sub></sub>
Intercambiadores		4.00	0.10	0.40
Torres		1.00	0.35	0.35
Reactores		1.00	0.50	0.50
$L_s = \sum L_{s(k)} \cdot N_k$	1.25	$\tau_Y$	1,095.00	
S <sub>Op</sub>	17,000.00	L <sub>Y(Op)</sub>	245.00	
N <sub>Op</sub>	5.59	<b>C<sub>MOO</sub> [\$/año]</b>	<b>94,974.49</b>	
<b>Costos operativos sin depreciación y costo por depreciación</b>				
COT <sub>d</sub>	13,789,819,795,182.20	C <sub>Dep</sub>	71,311.80	
<b>Ingreso por venta de productos (V)</b>				
Tipo		Producción F <sub>Prod(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>Prod(k)</sub> [\$/kg]	V <sub>(k)</sub> [\$/año]
Formaldehído		32,565,830.94	1.34	43,703,345.12
Agua		32,564,845.30	1.70	55,360,237.01
<b>Total V [\$/año]</b>				<b>99,063,582.12</b>

Tabla 15. Costos operativos en la producción de formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico

<b>Cálculo del costos operativos de una planta de producción de Formaldehído</b>			
<b>Costos de materias primas (<math>C_{MP}</math>)</b>			
Descripción	Consumo anual $F_{MP(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{MP(k)}$ [\$/kg]	$C_{MP(k)}$ [\$/año]
Metanol	47,063,144	4.642	\$ 218,467,113
Nitrógeno	67,051,398	0	\$ -
Oxígeno	17,823,789	0	\$ -
<b>Total <math>C_{MP}</math> [\$/año]</b>			<b>\$ 218,467,113</b>
<b>Costos de tratamiento de residuos industriales (<math>C_{TR}</math>)</b>			
Tipo	Consumo anual $F_{R(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{TR(k)}$ [\$/kg]	$C_{TR(k)}$ [\$/año]
Agua de proceso (Residuo no peligroso)	1,900,517,421	0.036	\$ 68,418,627
Vapor de media presión (MPS) (Residuo no peligroso)	869,458,772	0.036	\$ 31,300,516
<b>Total <math>C_{TR}</math> [\$/año]</b>			<b>\$ 99,719,143</b>
<b>Costos de servicios industriales (<math>C_{SI}</math>)</b>			
Tipo	Consumo anual $F_{SI(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{SI(k)}$ [\$/kg]	$C_{SI(k)}$ [\$/año]
Agua de proceso	1,900,517,421	0.0148	\$ 28,127,657.84
Vapor de media presión (MPS)	869,458,772	0.0283	\$ 24,605,683
Aceite termico	230,883,343	0.5490	\$ 126,754,955.35
<b>Total <math>C_{SI}</math> [\$/año]</b>			<b>\$ 179,488,296</b>
<b>Costos de mano de obra operativa (<math>C_{MOO}</math>)</b>			
Equipo	$N_k$	$L_{s(k)}$	$L_{s(k)} \cdot N_k$
Intercambiadores	4	0.10	0.4000
Torres	1	0.35	0.3500
Reactores	1	0.50	0.5000
$L_s = \sum L_{s(k)} \cdot N_k$	1.2500	$\tau_Y$	1095
$S_{Op}$	\$ 17,000	$L_{Y(Op)}$	245
$N_{Op}$	5.5867	$C_{MOO}$ [\$/año]	\$ 94,974
<b>Costos operativos sin depreciación y costo por depreciación</b>			
$COT_d$	\$ 613,148,803	$C_{Dep}$	\$ 359,442
<b>Ingreso por venta de productos (V)</b>			
Tipo	Producción $F_{Prod(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{Prod(k)}$ [\$/kg]	$V_{(k)}$ [\$/año]
Formaldehído	32,061,644	1.342	
Agua	32,067,706	1.700	\$ 54,517,025
<b>Total V [\$/año]</b>			<b>\$ 54,517,025</b>

Tabla 16. Costos operativos en la producción de formaldehído con Peng Robinson-Soave (PRS) como paquete termodinámico

<b>Cálculo del costos operativos de una planta de producción de Formaldehído</b>				
<b>Costos de materias primas (<math>C_{MP}</math>)</b>				
Descripción		Consumo anual $F_{MP(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{MP(k)}$ [\$/kg]	$C_{MP(k)}$ [\$/año]
Metanol		47,063,144	4.6420	\$ 218,467,113
Nitrógeno		67,051,398	0	\$ -
Oxígeno		17,823,789	0	\$ -
<b>Total <math>C_{MP}</math> [\$/año]</b>				<b>\$ 218,467,113</b>
<b>Costos de tratamiento de residuos industriales (<math>C_{TR}</math>)</b>				
Tipo		Consumo anual $F_{R(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{TR(k)}$ [\$/kg]	$C_{TR(k)}$ [\$/año]
Agua de enfriamiento	(Residuo no peligroso)	484,320,996,794	0.036	\$ 17,435,555,885
Vapor de baja presión (LPS)	(Residuo no peligroso)	8,572,285,989,066	0.036	\$308,602,295,606.39
Vapor de media presión (MPS)	(Residuo no peligroso)	12,645,161,588,105	0.036	\$455,225,817,171.79
Vapor de alta presión (HPS)	(Residuo no peligroso)	3,466,067,988,049	0.036	\$ 124,778,447,570
<b>Total <math>C_{TR}</math> [\$/año]</b>				<b>\$ 906,042,116,233</b>
<b>Costos de servicios industriales (<math>C_{SI}</math>)</b>				
Tipo		Consumo anual $F_{SI(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{SI(k)}$ [\$/kg]	$C_{SI(k)}$ [\$/año]
Agua de enfriamiento		484,320,996,794	0.0148	\$ 7,167,950,752.55
Vapor de baja presión (LPS)		8,572,285,989,066	0.0277	\$237,452,321,897.14
Vapor de media presión (MPS)		12,645,161,588,105	0.0283	\$ 357,858,072,943
Vapor de alta presión (HPS)		3,466,067,988,049	0.0299	\$ 103,635,432,843
Aceite térmico		29,586,520,113,172	0.549	\$16,242,999,542,132
Gas natural		15,365,199,442,916	1.003	\$15,411,295,041,245
<b>Total <math>C_{SI}</math> [\$/año]</b>				<b>\$32,360,408,361,812</b>
<b>Costos de mano de obra operativa (<math>C_{MOO}</math>)</b>				
Equipo		$N_k$	$L_{s(k)}$	$L_{s(k)} \cdot N_k$
Intercambiadores		7	0.10	0.7000
Torres		2	0.35	0.7000
Reactores		1	0.50	0.5000
$L_s = \sum L_{s(k)} \cdot N_k$	1.9000	$\tau_Y$	1095	
$S_{Op}$	\$ 17,000	$L_{Y(Op)}$	245	
$N_{Op}$	8.4918	$C_{MOO}$ [\$/año]	\$ 144,361	
<b>Costos operativos sin depreciación y costo por depreciación</b>				
$COT_d$	\$40,918,004,153,894	$C_{Dep}$	\$ 463,531	
<b>Ingreso por venta de productos (<math>V</math>)</b>				
Tipo		Producción $F_{Prod(k)}$ [kg/año]	Precio $P_{Prod(k)}$ [\$/kg]	$V_{(k)}$ [\$/año]
Formaldehído		33,707,232	1.342	\$ 45,235,106
Agua		33,655,973	1.7	\$ 57,215,154
<b>Total <math>V</math> [\$/año]</b>				<b>\$ 102,450,260</b>

### 2.5.3. Análisis financiero

El análisis financiero de un proceso consiste en saber si el proceso es rentable o no, y en cuanto tiempo se recupera la inversión inicial (costos de capital), para ello se realiza un tabla de amortización en un periodo de 12 años, como se muestra a continuación (Henao, 2006).

Tabla 17. Tabla de amortización para la producción de formaldehído con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico

Cálculo de los flujos de caja, flujos de caja descontados, VNP y TIR para una planta de producción de Formaldehído												
(n)	V <sub>(n)</sub>	COT <sub>d(n)</sub>	C <sub>Dep(n)</sub>	C <sub>Imp(n)</sub>	ICF <sub>(n)</sub>	S <sub>(n)</sub> =0.1(ICF <sub>L</sub> )	L <sub>(n)</sub>	WC <sub>Req(n)</sub>	WC <sub>Rec(n)</sub>	FC <sub>(n)</sub>	FC <sub>(n),(1+i)<sup>n</sup></sub>	FC <sub>(n),(1+TIR)<sup>n</sup></sub>
0					\$ 39,399					\$ (39,399)	\$ (39,399)	\$ (39,399)
1					\$475,412					\$ (475,412)	\$ (368,536)	\$ (0)
2					\$316,941			\$158,471		\$ (475,412)	\$ (285,687)	\$ (0)
3	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)						\$(8,963,318,450,581)	\$ (4,175,415,465,669)	\$ (0)
4	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)						\$(8,963,318,450,581)	\$ (3,236,756,174,937)	\$ (0)
5	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)						\$(8,963,318,450,581)	\$ (2,509,113,313,905)	\$ (0)
6	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)						\$(8,963,318,450,581)	\$ (1,945,049,080,546)	\$ (0)
7	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)						\$(8,963,318,450,581)	\$ (1,507,789,984,920)	\$ (0)
8	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)						\$(8,963,318,450,581)	\$ (1,168,829,445,674)	\$ (0)
9	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)						\$(8,963,318,450,581)	\$ (906,069,337,732)	\$ (0)
10	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)						\$(8,963,318,450,581)	\$ (702,379,331,575)	\$ (0)
11	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)						\$(8,963,318,450,581)	\$ (544,480,101,996)	\$ (0)
12	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)		\$ 79,235	\$ 39,399		\$158,471	\$(8,963,318,173,476)	\$ (422,077,585,398)	\$ (0)
13	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)		\$ -	\$475,412		\$ -	\$(8,963,317,975,169)	\$ (327,191,919,426)	\$ (0)
14	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)		\$ -	\$316,941		\$ -	\$(8,963,318,133,640)	\$ (253,637,151,326)	\$ (0)
15	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(8,963,318,450,581)	\$ (196,617,953,717)	\$ (0)
16	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(8,963,318,450,581)	\$ (152,417,018,385)	\$ (0)
17	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(8,963,318,450,581)	\$ (118,152,727,430)	\$ (0)
18	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(8,963,318,450,581)	\$ (91,591,261,574)	\$ (0)
19	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(8,963,318,450,581)	\$ (71,000,977,964)	\$ (0)
20	\$99,063,582	\$13,789,819,795,182	\$ 71,312	\$(4,826,402,281,019)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(8,963,318,450,581)	\$ (55,039,517,802)	\$ (0)
										<b>VPN</b>	<b>\$(18,383,609,043,599)</b>	<b>\$ (39,399)</b>
	Tasa de impuestos TI		35%									
	Tasa de descuento "i"		29%									
	Tasa Interna de retorno TIR		5368709130%									

Tabla 18. Tabla de amortización para la producción de formaldehído con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico

Cálculo de los flujos de caja, flujos de caja descontados, VNP y TIR para una planta de producción de Formaldehído												
(n)	V <sub>(n)</sub>	COT <sub>d(n)</sub>	C <sub>Dep(n)</sub>	C <sub>Imp(n)</sub>	ICF <sub>(n)</sub>	S <sub>(n)</sub> =0.1(ICF <sub>L</sub> )	L <sub>(n)</sub>	WC <sub>Req(n)</sub>	WC <sub>Rec(n)</sub>	FC <sub>(n)</sub>	FC <sub>(n).(1+i)<sup>n</sup></sub>	FC <sub>(n).(1+TIR)<sup>n</sup></sub>
0					\$ 171,889					\$ (171,889)	\$ (171,889)	\$ (171,889)
1					\$2,396,277					\$ (2,396,277)	\$ (1,857,579)	\$ (0)
2					\$1,597,518			\$798,759		\$ (2,396,277)	\$ (1,439,984)	\$ (0)
3	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)						\$(335,017,479)	\$(156,062,419)	\$ (0)
4	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)						\$(335,017,479)	\$(120,978,620)	\$ (0)
5	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)						\$(335,017,479)	\$ (93,781,876)	\$ (0)
6	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)						\$(335,017,479)	\$ (72,699,128)	\$ (0)
7	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)						\$(335,017,479)	\$ (56,355,914)	\$ (0)
8	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)						\$(335,017,479)	\$ (43,686,755)	\$ (0)
9	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)						\$(335,017,479)	\$ (33,865,701)	\$ (0)
10	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)						\$(335,017,479)	\$ (26,252,482)	\$ (0)
11	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)						\$(335,017,479)	\$ (20,350,761)	\$ (0)
12	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)		\$399,379	\$ 171,889		\$798,759	\$(333,647,451)	\$ (15,711,270)	\$ (0)
13	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)		\$ -	\$2,396,277		\$ -	\$(332,621,202)	\$ (12,141,817)	\$ (0)
14	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)		\$ -	\$1,597,518		\$ -	\$(333,419,961)	\$ (9,434,864)	\$ (0)
15	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(335,017,479)	\$ (7,348,891)	\$ (0)
16	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(335,017,479)	\$ (5,696,815)	\$ (0)
17	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(335,017,479)	\$ (4,416,136)	\$ (0)
18	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(335,017,479)	\$ (3,423,361)	\$ (0)
19	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(335,017,479)	\$ (2,653,768)	\$ (0)
20	\$97,543,751	\$613,148,803	\$ 359,442	\$(180,587,573)		\$ -	\$ -		\$ -	\$(335,017,479)	\$ (2,057,185)	\$ (0)
<b>VPN</b>											\$ (690,387,213)	\$ (171,889)

Tasa de impuestos TI	35%
Tasa de descuento "i"	29%
Tasa Interna de retorno TIR	5368709130%

**Tabla 19. Tabla de amortización para la producción de formaldehído con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico**

Cálculo de los flujos de caja, flujos de caja descontados, VNP y TIR para una planta de producción de Formaldehído												
(n)	V <sub>(n)</sub>	COT <sub>d(n)</sub>	C <sub>Dep(n)</sub>	C <sub>Imp(n)</sub>	ICF <sub>(n)</sub>	S <sub>(n)</sub> =0.1(ICF <sub>L</sub> )	L <sub>(n)</sub>	WC <sub>Req(n)</sub>	WC <sub>Rec(n)</sub>	FC <sub>(n)</sub>	FC <sub>(n),(1+i)<sup>-n</sup></sub>	FC <sub>(n),(1+TIR)<sup>-n</sup></sub>
0					\$ 167,675					\$ (167,675)	\$ (167,675)	\$ (167,675)
1					\$3,090,208					\$ (3,090,208)	\$ (2,395,510)	\$ (0)
2					\$2,060,139			\$1,030,069		\$ (3,090,208)	\$ (1,856,985)	\$ (0)
3	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)						\$(26,596,635,945,126)	\$(12,389,608,343,419)	\$ (0)
4	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)						\$(26,596,635,945,126)	\$(9,604,347,553,038)	\$ (0)
5	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)						\$(26,596,635,945,126)	\$(7,445,230,661,270)	\$ (0)
6	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)						\$(26,596,635,945,126)	\$(5,771,496,636,643)	\$ (0)
7	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)						\$(26,596,635,945,126)	\$(4,474,028,400,499)	\$ (0)
8	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)						\$(26,596,635,945,126)	\$(3,468,239,070,154)	\$ (0)
9	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)						\$(26,596,635,945,126)	\$(2,688,557,418,724)	\$ (0)
10	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)						\$(26,596,635,945,126)	\$(2,084,153,037,771)	\$ (0)
11	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)						\$(26,596,635,945,126)	\$(1,615,622,509,900)	\$ (0)
12	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)		\$515,035	\$ 167,675		\$1,030,069	\$(26,596,634,232,347)	\$(1,252,420,469,656)	\$ (0)
13	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)		\$515,035	\$3,090,208		\$ -	\$(26,596,632,339,883)	\$(970,868,512,047)	\$ (0)
14	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)		\$515,035	\$2,060,139		\$ -	\$(26,596,633,369,953)	\$(752,611,278,797)	\$ (0)
15	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)		\$515,035	\$ -		\$ -	\$(26,596,635,430,091)	\$(583,419,641,158)	\$ (0)
16	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)		\$515,035	\$ -		\$ -	\$(26,596,635,430,091)	\$(452,263,287,719)	\$ (0)
17	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)		\$515,035	\$ -		\$ -	\$(26,596,635,430,091)	\$(350,591,695,906)	\$ (0)
18	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)		\$515,035	\$ -		\$ -	\$(26,596,635,430,091)	\$(271,776,508,454)	\$ (0)
19	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)		\$515,035	\$ -		\$ -	\$(26,596,635,430,091)	\$(210,679,463,918)	\$ (0)
20	\$102,450,260	\$40,918,004,153,894	\$ 463,531	\$(14,321,265,758,508)		\$515,035	\$ -		\$ -	\$(26,596,635,430,091)	\$(163,317,413,890)	\$ (0)
										<b>VPN</b>	\$(54,549,236,323,133)	\$ (167,675)

Tasa de impuestos TI	35%
Tasa de descuento "i"	29%
Tasa Interna de retorno TIR	9848905329%

## 2.6. Análisis y discusión.

La producción del formaldehído tiene tres reacciones que ocurren de manera simultánea, donde la reacción principal es altamente exotérmica alcanzando los 920°C con el paquete termodinámico de NRTL como lo muestra la tabla 4, lo que no permite crear un ambiente propicio para que ocurran las otras dos reacciones que necesitan temperaturas inferiores a 250°C. Gracias a esto el reactor no necesita ser muy especificado para la selectividad de las reacciones, teniendo un mayor porcentaje de conversión del metanol a formaldehído como lo muestra la tabla 3.

En el proceso hay pérdidas físicas y pequeñas cantidades de metanol en el producto final por lo que la conversión en el reactor varía entre un 32.87% para PRSV, pasando por 48.13% de PR a un 53.73% con NRTL, donde este último paquete termodinámico no tiene problemas con sustancias polares como el formaldehído, inconveniente que presentó PR en la simulación.

Además, como el porcentaje de conversión de la reacción es directamente proporcional a la temperatura, entonces el paquete termodinámico que más incrementa la temperatura de proceso alcanza una mejor conversión de metanol, es decir, NRTL incrementa la temperatura de 250°C a 920°C entonces tiene la conversión más alta de metanol a formaldehído en comparación con los otros paquetes, tal y como lo muestran la tabla 3 y la tabla 4.

En la gráfica 1 se observa que el proceso inicia en la corriente número 4 con la ausencia del metanol debido a que en esta corriente entra el aire puro y consecuentemente el metanol ingresa puro en la corriente número 5, manteniéndose así hasta la corriente número 8, ya que en la 10 ingresa al reactor para ser transformado en formaldehído, pero en la corriente 11 salida del reactor se puede ver que el metanol no se transformó en su totalidad, quedando una mayor concentración de metanol con el paquete termodinámico PRSV lo que es consecuente con la baja conversión y temperatura de este paquete con respecto a los valores obtenidos con los paquetes termodinámicos de PR y NRTL.

La cantidad de metanol que no reacciona en el proceso es recirculado para obtener menos desperdicios y mayor ahorro de materias primas en el proceso; pero, para ser recirculado debe ser separado de los productos de interés y los gases inertes ( $N_2$ ) que genera el aire ya que estas impurezas en el reactivo puede causar envenenamiento del catalizador en el reactor y atrición en la torre de destilación. La separación de este comienza en la corriente 13-L, la

cual es la salida de un separador líquido de dos fases donde fue liberado los gases inertes del aire y se dirige hacia una torre de destilación donde con los paquetes termodinámicos de PR y NRTL es separado por cima del formaldehído que sale en fondos representado en la corriente 15 y 14 respectivamente. Pero para el paquete termodinámico de PRSV la situación en esta corriente 14 de entrada a la torre de destilación es diferente, debido a que en la cantidad molar de los componentes son mayores en comparación con los otros por lo que hace necesario separar primero el agua producida del metanol y formaldehído que salen por cima en la corriente 16, continuando el proceso de separación hacia una nueva torre de destilación, donde se separa definitivamente el metanol para ser recirculado por la corriente 18 de fondos del formaldehído para ser comercializado por la corriente 17 de cima, lo cual se puede observar en gráfica 1,2 y 3 y en las ilustraciones 1,2 y 3.

En la gráfica 2 se muestra la producción de formaldehído para cada paquete termodinámico, donde claramente se observa que con el paquete termodinámico PRSV la producción de este alcanza un fracción molar de 0.167, siendo la más baja de los tres paquetes termodinámicos, ya que la producción de formaldehído con los otros dos paquetes (PR y NRTL) es muy cercana, teniendo NRTL la más alta con una fracción molar de 0.206, seguida de 0.198 para PR. Sin embargo la separación del formaldehído de los otros componentes es más eficiente con el paquete termodinámico PRSV alcanzando una fracción molar de 0.998 y un flujo molar de 82.888Kmol/h, lo que es coherente ya que este paquete termodinámico necesita dos torres de destilación para ello, llevando al aumento en dos equipos en comparación con los otros dos procesos como se puede ver en las ilustraciones 1, 2 y 3,

La conversión del reactor aumenta directamente los costos de capital de este equipo debido al diseño de selectividad, pero al tener una conversión alta, el costo de capital de las torres de separación o purificación disminuye sin embargo no es suficiente para tener un proceso económicamente viable.

Como el paquete termodinámico PRSV necesita un intercambiador de calor y una torre de destilación más, estos equipos representan un aumento en el costo de capital para este paquete termodinámico en comparación con los otros dos, lo que económicamente hablando lo hace estar en desventaja a la hora de la selección del mejor paquete termodinámico para la producción de formaldehído, tal y como lo muestra las ilustraciones 1, 2 y 3, y las tablas 10, 13,16 y 19.

Los costos de capital necesarios para implementar una planta de producción de formaldehído con PR como paquete termodinámico equivalen a \$792.352

como se muestra en la tabla 11. Para lo operación de la planta se necesita \$13.789.819.795.182 por año, donde la mayor parte de estos costos están representados en el tratamiento de residuos industriales con una suma de \$5.210.495.883.586 por año, y para compensar estos costos solo se vende \$99.063.582 por año como se muestra en la tabla 14. Debido a que los costos de operación de la planta clasificados en, costo de tratamiento de residuos industriales y costo de los servicios industriales son más altos que el precio de venta de los productos, la planta no es económicamente viable ya que desde la implementación de esta se empieza perdiendo dinero tal y como lo muestra la tabla 17.

Los costos de capital para implementar la planta de producción de formaldehído con el paquete termodinámico de NRTL tiene un valor de \$3.993.795 como lo muestra la tabla 12; el costo de operación de esta misma planta se observa en la tabla 15 equivalente a \$613.148.803 por año, donde el mayor costo de esta operación la representa los servicios industriales utilizados por año que ascienden a \$179.488.296, y el valor que debería compensar esos costos es el precio de venta de los productos producidos, en este caso el formaldehído y el agua que solo alcanzan los \$97.543.751 por año, y es aquí donde el proceso se hace no rentable ya que el solo precio de los servicios industriales casi es el doble del valor ganado con la venta de los productos obteniendo un proceso económicamente no viable ya que la inversión inicial nunca se va a recupera y mucho menos se tiene como sostener el proceso en un año, tal y como lo muestra la tabla 18.

Para implementar una planta de producción de formaldehído con base al paquete termodinámico de PRSV es necesario invertir \$5.150.347 por concepto de costos de capital (tabla 13), \$40.918.004.153.894 por concepto de operación (tabla 16) donde el 77% de ese valor (\$32.360.408.361.812) es por servicios industriales, siendo un rubro tan alto que necesita un valor de venta de los productos bastante alto, pero solo alcanza los \$102.450.260 por año mostrándose un déficit muy importante del proyecto convirtiéndolo en económicamente no viable tal y como lo muestra la tabla 19.

Los costos de capital más bajos para la producción de formaldehído son con el paquete termodinámico de PR con un valor de \$792.352, y los más altos los tiene el paquete termodinámico PRSV con un valor de \$5.150.347, lo que es coherente ya que con este último paquete se necesita un intercambiador de calor y una torre de destilación más respecto a los otros dos paquetes termodinámicos. El paquete termodinámico PRSV tiene un costo de \$5.150.347.

Aunque la producción del formaldehído con los tres paquetes termodinámicos estudiados (PR, NRTL y PRSV) no es económicamente viable, se puede determinar algunas de las posibles causas donde el costo de los servicios industriales tiene un papel fundamental, ya que debería haber integración energética entre las corrientes, de manera que el calor de estas sea aprovechado ya sea para enfriar o calentar una corriente, lo que conlleva a una reducción de manera considerable del uso de estos servicios, y por consiguiente del costo que estos representan. Otro factor importante para analizar es el precio de venta de los productos obtenidos debido a que con los paquetes termodinámicos de PR y NRTL la pureza de estos es de 50%, un 13% más concentrado de lo que comercialmente se obtiene (37%) por lo tanto, su precio debería ser un 13% mayor; y la fracción molar para PRSV es de 1, lo cual deja dos opciones, la primera es vender como grado analítico que es un producto costoso, y la segunda es disolverlo en agua, puede ser con la misma obtenida en el proceso, para venderlo a concentraciones comerciales en una cantidad mayor de la que inicialmente se consideró en estos costos.

El paquete termodinámico que mejor simula la producción de formaldehído es Non Random Two Liquids (NRTL), al lograr una fracción molar a la salida del reactor de 0.206 con la menor cantidad de equipos de operación, así este proceso no sea económicamente rentable.

### 3. Caso de estudio 2: Estireno

#### 3.1. Descripción del proceso

El estireno es un hidrocarburo aromático que a temperatura ambiente se encuentra en estado líquido aceitoso, incoloro a amarillo con fragancia dulce que se evapora con facilidad. Se le conoce también como: vinil benceno, etenil benceno, cinameno, ó fenil etileno; el cual es contenido en forma de cadena larga como poli estireno en diferentes productos de plástico, caucho, material aislante, partes de automóviles y envases para alimentos (Speight, 2002).

Puede formar peróxidos explosivos. La sustancia puede polimerizar por calentamiento suave, bajo la influencia de la luz, oxidantes, oxígeno y peróxidos, causando peligro de incendio y explosión. Reacciona violentamente con ácidos fuertes y oxidantes fuertes, originando peligro de incendio y explosión. Ataca al caucho, al cobre y aleaciones de cobre (International Programme on Chemical Safety, 2006)

Entre sus propiedades físicas se encuentra el punto de fusión a los  $-30.6^{\circ}\text{C}$ ,  $145^{\circ}\text{C}$  de punto de ebullición, tiene una densidad de  $0.9059\text{ g/cm}^3$  y un punto de inflamación de  $31.4^{\circ}\text{C}$ . Es producido industrialmente a partir del etil benceno por una deshidrogenación u oxidación, o por pirolisis de la gasolina; con diferentes óxidos de metal como catalizador incluyendo el cromo, hierro, zinc, óxidos de magnesio sobre carbón activado, aluminio, bauxita u óxido de hierro sobre carbonato de potasio (Speight, 2002).

Para este proceso de producción de estireno se parte del etil benceno puro para des hidrogenarlo, obteniendo estireno como producto de interés y tolueno, benceno, hidrogeno, etileno y metano como subproductos de tres reacciones secundarias diferentes; utilizando un catalizador compuesto por: óxido de hierro, carbonato de potasio y óxido de cromo, el cual presenta las siguientes características: (Elnashaie, et al., 2001)

Tabla 20. Características del catalizador compuesto

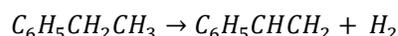
Variable	Valor
Profundidad del lecho catalítico (L)	1.70m
Densidad catalítica ( $\rho_c$ )	$2146\text{Kg/m}^3$
Diámetro del catalizador (D)	4.7mm
Radio del poro ( $r_p$ )	2400
Porosidad del catalizador( $\epsilon_p$ )	0.35

El proceso de producción del estireno inicia con el etil benceno a condiciones atmosféricas ( $25^{\circ}\text{C}$  y 1atm) y con la corriente de recirculación con fracciones

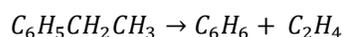
molares de 0.38 de etil benceno y 0.41 de tolueno, la cual es modificada por un primer intercambiador de calor que aumenta la temperatura hasta los 200°C para pasar de estado líquido a gaseoso, donde ese gas necesita incrementar su presión de 101.3Kpa a 240KPa con la ayuda de un compresor elevando la temperatura hasta los 223.79°C; pero las condiciones de reacción son a 650°C lo que implica un nuevo intercambiador de calor para alcanzar esta nueva temperatura.

Con las condiciones de reacción anteriores ingresa la corriente gaseosa a un reactor PFR de lecho empacado con las condiciones del catalizador anteriormente descritas para realizarse la deshidrogenación catalítica del etil benceno, ocurriendo de manera simultánea tres reacciones diferentes las cuales producen estireno, hidrogeno, benceno, etileno, tolueno y metano con composición molar de 0.44, 0.34, 0.0007, 0.0007, 0.10 y 0.10 respectivamente; todo esto realizado bajo los paquetes termodinámicos de Peng Robinson (PR), Non Random Two Liquids (NRTL) y Peng Robinson-Soave (PRSV).

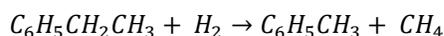
Las reacciones presentes en la deshidrogenación catalítica son:



Ecuación 2



Ecuación 3



Ecuación 4

El comportamiento de las reacciones se encuentra definido por:

**Tabla 21. Cinética de las reacciones del estireno**

Reacción	Tipo	Producto	Velocidad de reacción		
			A (kJ/kmol·K·bar)	E (kJ/kmol)	β
4	Catalítica heterogénea	Estireno e hidrogeno	1.18x10 <sup>10</sup>	1.5860x10 <sup>5</sup>	0
5	Cinética	Benceno y etileno	6911	1.1420x10 <sup>5</sup>	0
6	Cinética	Tolueno y metano	2.3811x10 <sup>11</sup>	2.08x10 <sup>5</sup>	0

La ecuación de cinética está representada por:

$$K = A * e^{-E/R \cdot T} * T^{\beta}$$

Ecuación 5

Ahora, con la corriente gaseosa a la salida del reactor se utiliza un intercambiador de calor que disminuya la temperatura hasta los 35°C, de manera que sea posible separar esta mezcla líquido vapor en un equipo trifásico, donde en la corriente superior (gaseosa) se liberen los gases incondensables como lo son el metano y el hidrogeno, en la corriente inferior (líquida) se obtiene una buena composición de estireno pero sin flujo , por lo tanto, solo queda la corriente media (líquida) rica un 0.80% de estireno y un 0.18% de tolueno, la cual sigue el proceso hacia una torre de destilación para separar el tolueno en la corriente de cima con una fracción molar entre 0.85% y 0.97% dependiendo del paquete termodinámico empleado, obteniendo en la corriente de fondo el estireno y el etilbenceno que no reaccionó. En esta corriente es necesario volver a emplear una torre de destilación de forma que el etilbenceno que no reacciono pueda recircularse separándose del estireno producido, tal y como se muestra a continuación:

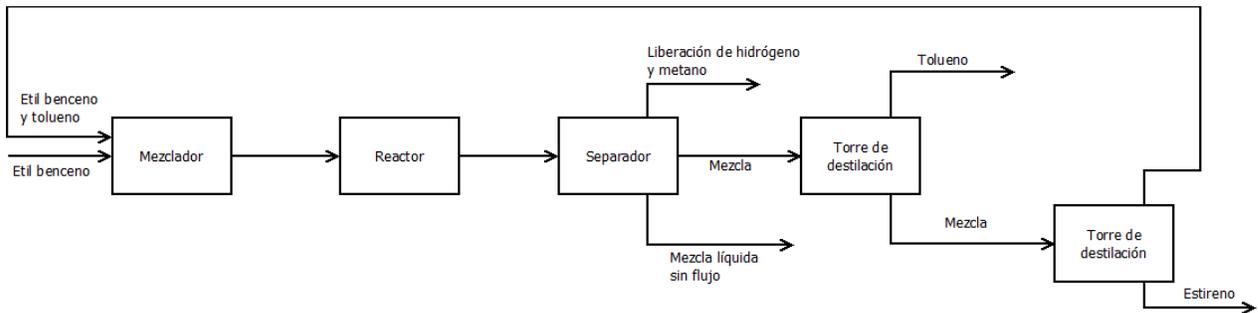


Ilustración 9 Producción de estireno a partir de la deshidrogenación del etil benceno

### 3.2.Simulación de procesos

La simulación del proceso para la obtención del estireno se realiza en Aspen Hysys v.8.0 con base en los valores encontrados en la literatura (Elnashaie, et al., 2001), lo que determina las condiciones iniciales. Partiendo de una corriente de etilbenceno con un flujo molar de 481.3Kmol/h y 1% de composición molar, con una temperatura de 25°C y una presión de 101.3 Kpa, la cual es necesario llevarla a condiciones adecuadas para la reacción hasta los 649.45 °C y 240 Kpa, para ingresar en estado gaseoso a un reactor PFR de 1.950 m de diámetro y 1.702 m de longitud, el cual se encuentra empacado

con un catalizador compuesto por óxido de hierro, carbonato de potasio y óxido de cromo.

Después de definir las condiciones iniciales para la deshidrogenación del etilbenceno hasta producir estireno se elabora la simulación de procesos con cada paquete termodinámico, como se muestran en las siguientes ilustraciones.

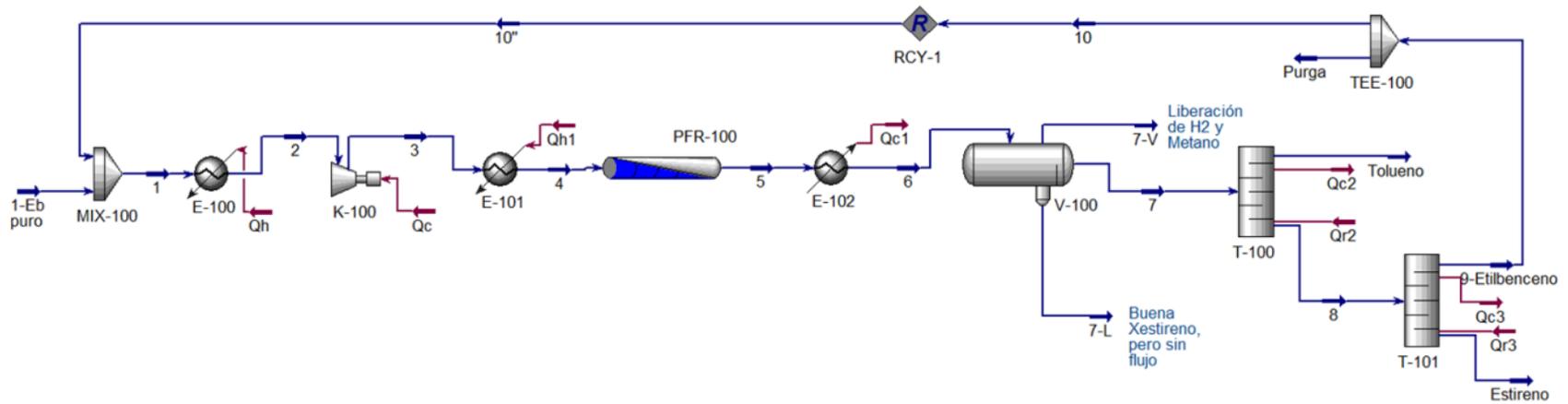


Ilustración 10 Simulación del proceso de producción del estireno con Peng Robinson (PR), Non Random Two Liquids (NRTL) y Peng Robinson – Soave (PRSV) como paquetes termodinámicos

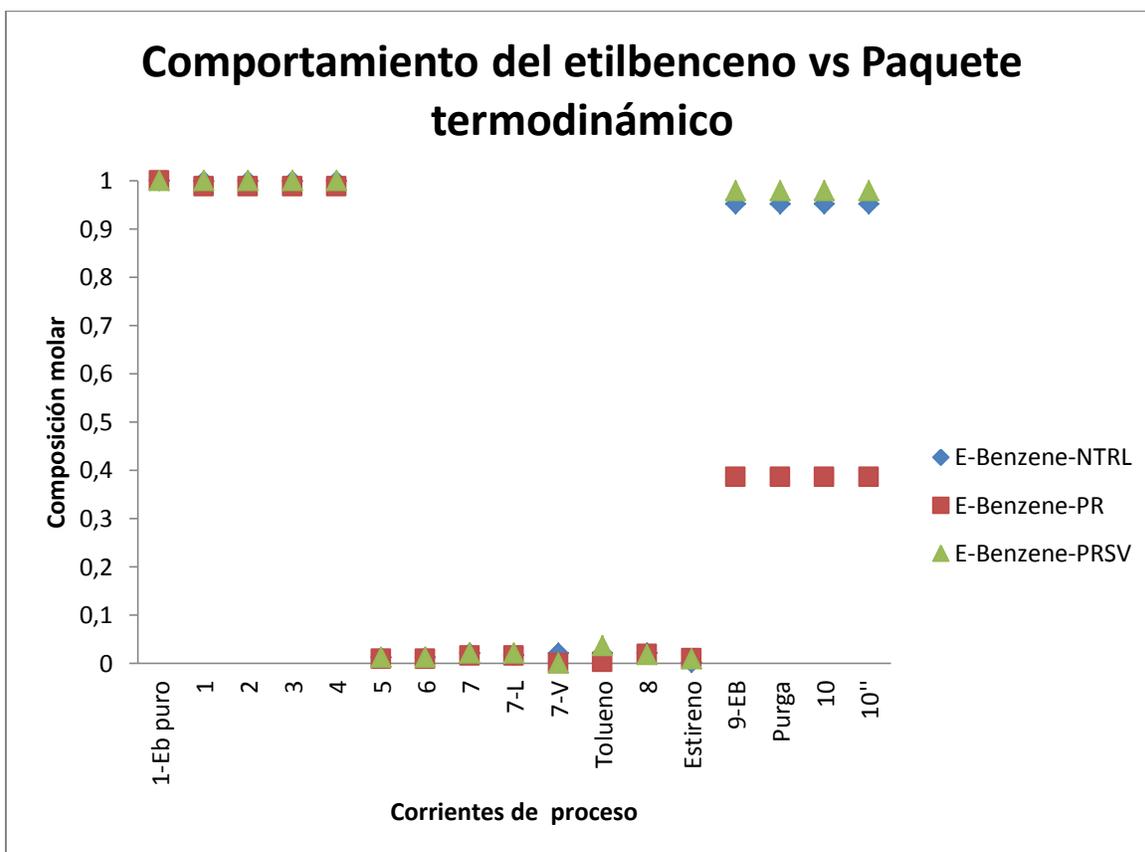
En el reactor se presentan tres reacciones de manera simultánea, alcanzando cada una de ellas diferente conversión dependiendo del paquete termodinámico utilizado, como se muestra a continuación: (Luyben, 2010)

Tabla 22. %Conversión en el proceso del estireno

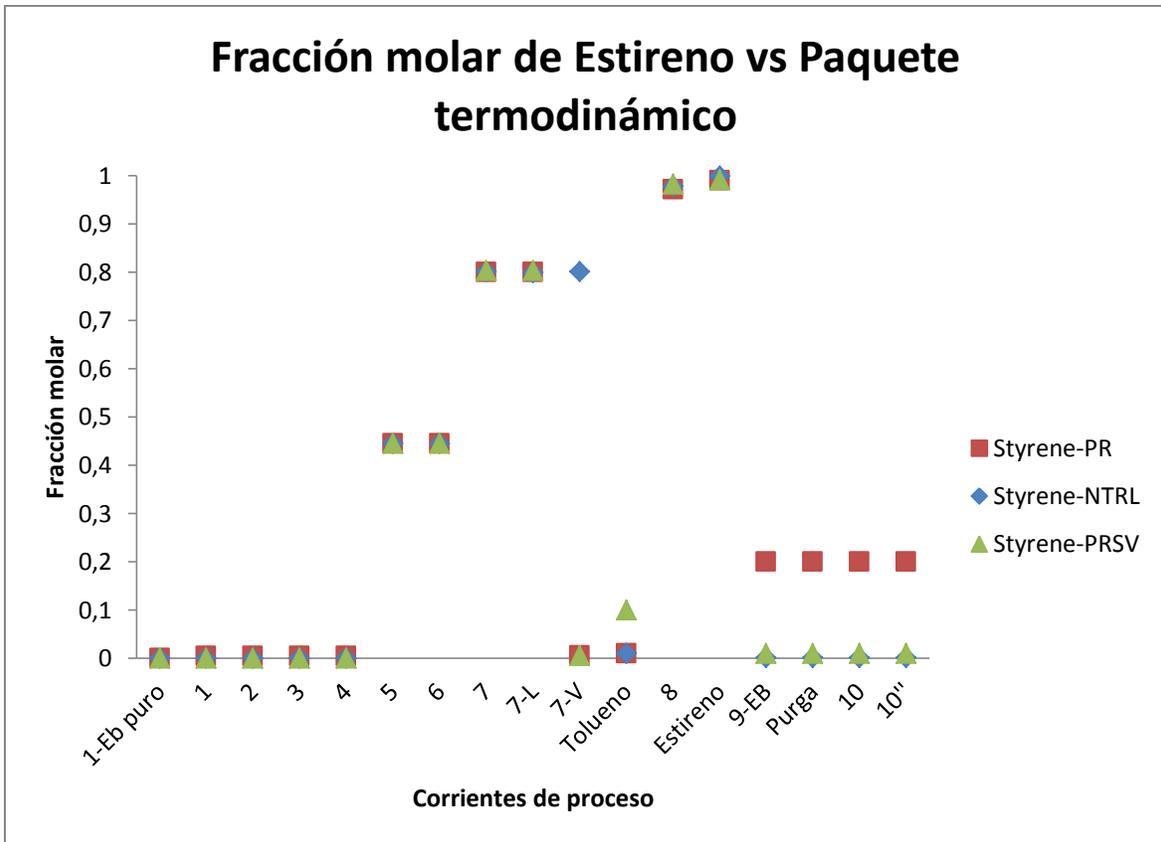
Numero de ecuación	% Conversión	Paquete termodinámico	Reactor
1	80.48	Peng Robinson (PR)	Isobárico
2	0.1347		
3	17.75		
1	80.23	Non Random Two Liquids (NRTL)	Isobárico
2	0.1369		
3	17.51		
1	80.25	Peng Robinson-Soave (PRSV)	Isobárico
2	0.1274		
3	17.49		
<b>1 Reportada en literatura</b>	<b>64</b>	<b>No disponible</b>	<b>Adiabático</b>

Para obtener estos porcentajes de conversión, el etilbenceno fue deshidrogenado en el reactor, donde una parte de este no reacciona y es recirculado al proceso en diferentes composiciones dependiendo del paquete termodinámico utilizado, a continuación se muestra el comportamiento de este en todo el proceso:

Gráfica 4. Comportamiento del etilbenceno en el proceso de producción del estireno



En la conversión del etilbenceno se produce estireno, hidrógeno, benceno, etileno, tolueno y metano, en composiciones diferentes dependiendo del paquete termodinámico con el cual se haya simulado, pero el producto de interés es el estireno, por lo tanto a continuación se presentan la cantidad que se produce de este y en qué fracción molar es separado dependiendo del paquete termodinámico utilizado.



Gráfica 5. Producción de estireno dependiendo del paquete termodinámico utilizado

### 3.3. Block flow diagram (BFD)

#### 3.3.1. Paquete termodinámico 1: Peng Robinson (PR)

PRODUCCIÓN DE ESTIRENO A PARTIR DE LA DES HIDROGENACIÓN DEL ETILBENCENO CON PENG ROBINSON COMO PAQUETE TERMODINÁMICO SOBRE CATALIZADOR COMPUESTO

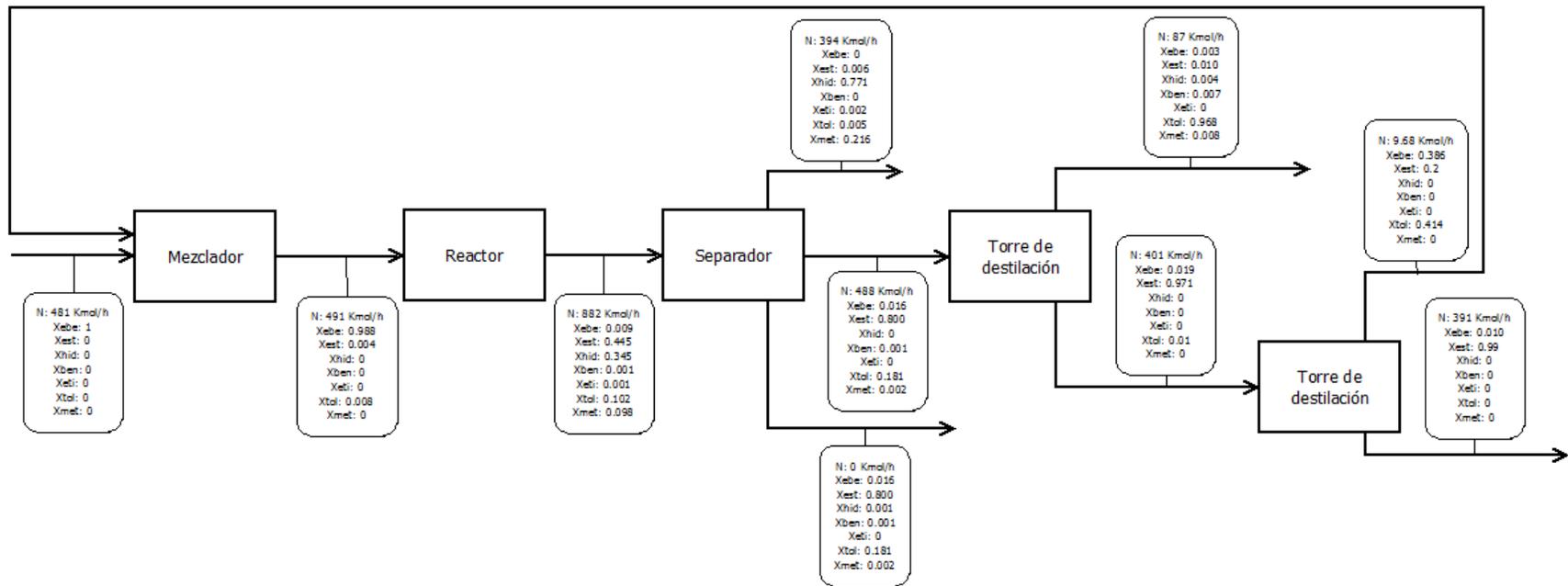


Ilustración 11 BFD del estireno con PR como paquete termodinámico

### 3.3.2. Paquete termodinámico 2: Non random two liquids (NRTL)

PRODUCCIÓN DE ESTIRENO A PARTIR DE LA DES HIDROGENACIÓN DEL ETILBENCENO CON NON RANDOM TWO LIQUIDS COMO PAQUETE TERMODINÁMICO SOBRE CATALIZADOR COMPUESTO

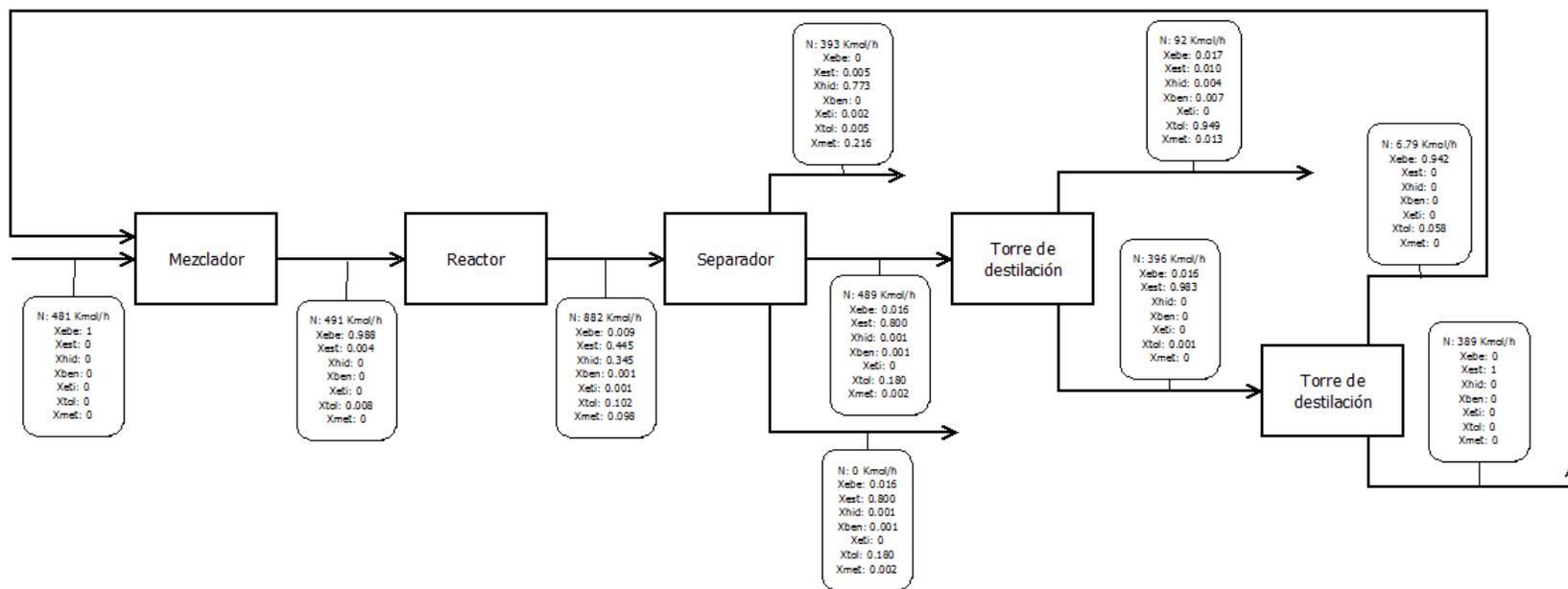


Ilustración 12 BFD del estireno con NRTL como paquete termodinámico

### 3.3.3. Paquete termodinámico 3: Peng Robinson-Soave (PRSV)

PRODUCCIÓN DE ESTIRENO A PARTIR DE LA DES HIDROGENACIÓN DEL ETILBENCENO CON PENG ROBINSON-SOAVE COMO PAQUETE TERMODINÁMICO SOBRE CATALIZADOR COMPUESTO

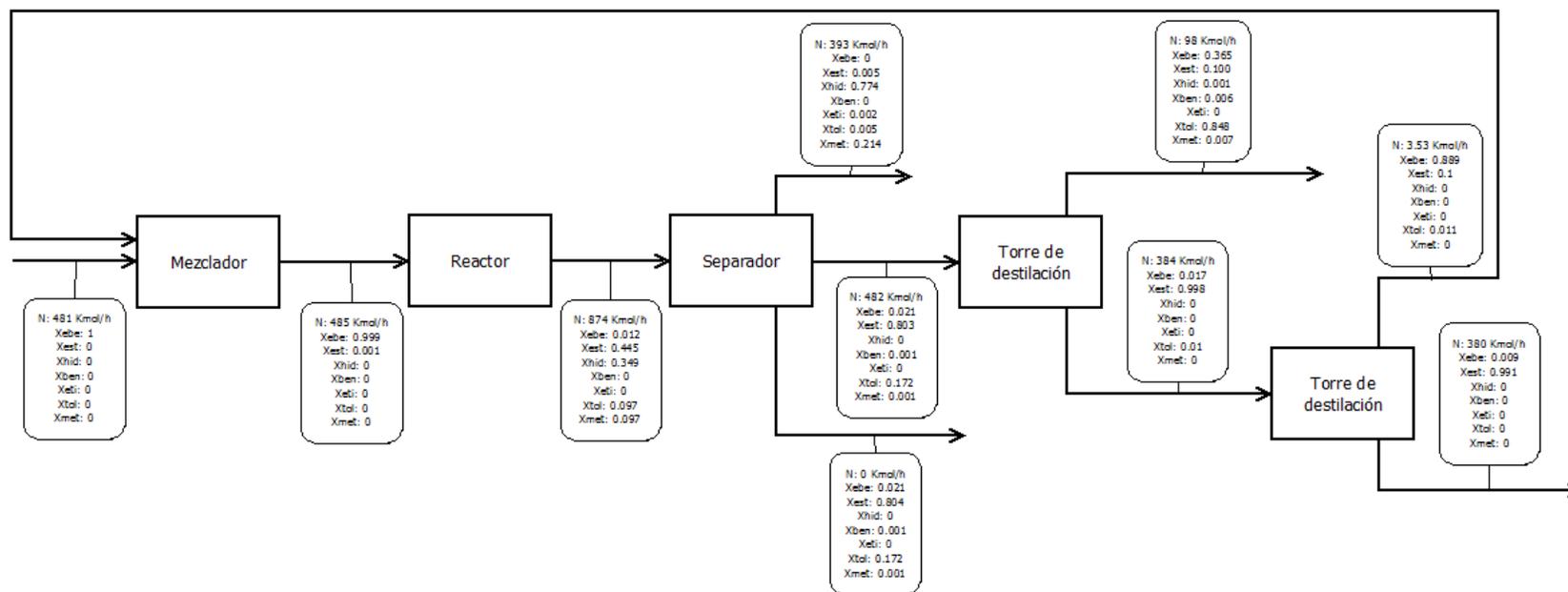


Ilustración 13 BFD del estireno con PRSV como paquete termodinámico

### 3.4.Process flow diagram (PFD)

Producción de estireno a partir de la des hidrogenación del etilbenceno sobre catalizador compuesto

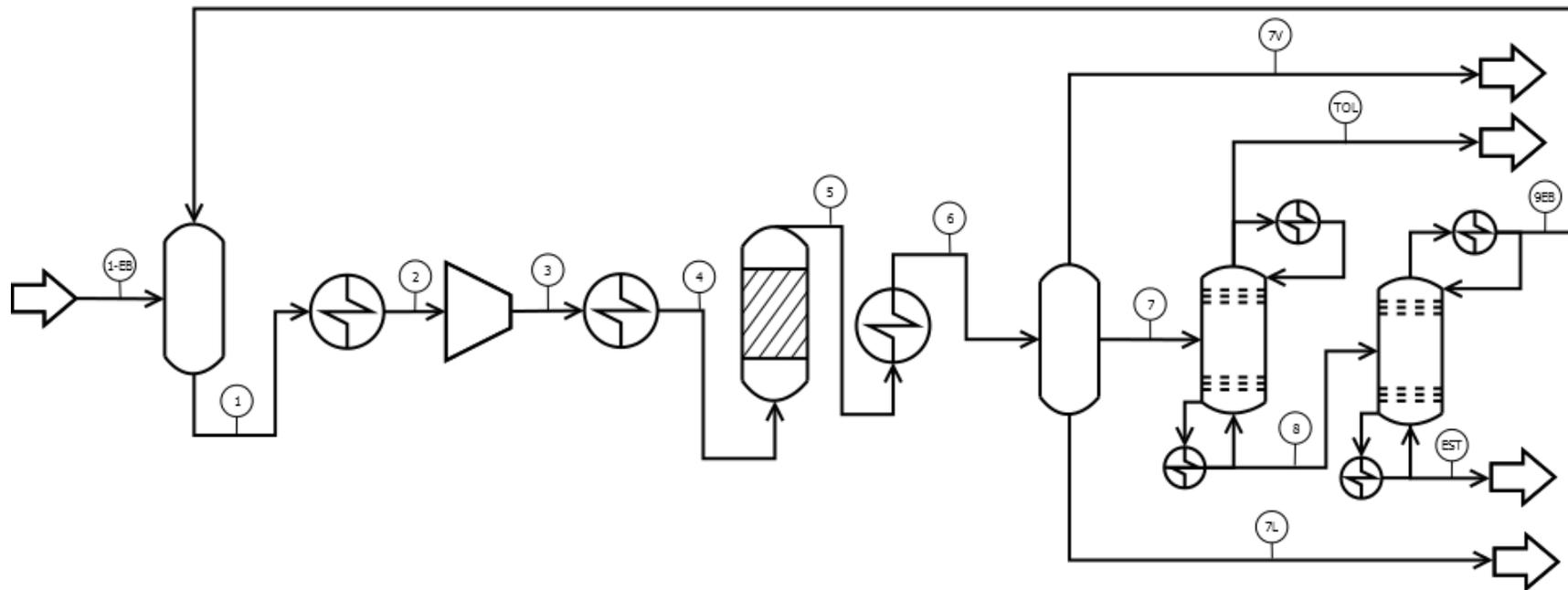


Ilustración 14 PFD para la producción de estireno

Tabla 23. Tabla de corrientes del PFD del estireno

		Unit	1-Eb puro	1	2	3	4	5	6	7	7-L	7-V	Tolueno	8	Estireno	9-EB	Purga	10	10'	
			C	25	27.026466	200	223.792289	649.45	332.388472	35	35	35	35	110.427045	144.927019	145.568543	124.570521	124.570521	124.570521	124.574836
PR	Temperature	C	25	27.026466	200	223.792289	649.45	332.388472	35	35	35	35	110.427045	144.927019	145.568543	124.570521	124.570521	124.570521	124.574836	
	Pressure	kPa	101.324997	101.324997	101.324997	240	240	240	240	240	240	240	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997
	Molar Flow	kgmole/h	481.3	490.880386	490.880386	490.880386	490.880386	881.847318	881.847318	487.675798	0	394.17152	86.83036	400.845438	391.164157	9.681281	0.096813	9.584469	9.580386	9.580386
	Mass Flow	kg/h	51097.696	52055.3364	52055.3364	52055.3364	52055.3364	52056.365	52056.365	49635.0931	0	2421.2719	7918.98154	41716.1115	40748.4073	967.704216	9.677042	958.027174	957.640395	957.640395
	Composición molar	E-Benzene-PR		1	0.988019	0.988019	0.988019	0.988019	0.009023	0.009023	0.016181	0.016181	0.000168	0.002795	0.01908	0.01	0.385962	0.385962	0.385962	0.386121
		Styrene-PR		0	0.003903	0.003903	0.003903	0.003903	0.444781	0.444781	0.799829	0.799829	0.005509	0.010001	0.97092	0.99	0.2	0.2	0.2	0.2
		Hydrogen-PR		0	0	0	0	0	0.344998	0.344998	0.000644	0.000644	0.771039	0.003615	0	0	0	0	0	0
		Benzene-PR		0	0	0	0	0	0.000741	0.000741	0.00125	0.00125	0.000111	0.007022	0	0	0.000002	0.000002	0.000002	0.000002
		Ethylene-PR		0	0	0	0	0	0.000741	0.000741	0.000049	0.000049	0.001597	0.000275	0	0	0	0	0	0
		Toluene-PR		0	0.008078	0.008078	0.008078	0.008078	0.102106	0.102106	0.180509	0.180509	0.005105	0.967652	0.01	0	0.414036	0.414036	0.414036	0.413878
Methane-PR		0	0	0	0	0	0.09761	0.09761	0.001538	0.001538	0.216471	0.008641	0	0	0	0	0	0		
NTRL	Temperature	C	25	30.416418	200	222.966889	649.45	329.333913	35	35	35	35	111.174878	144.995423	145.434182	135.2825	135.2825	135.2825	135.2825	
	Pressure	kPa	101.324997	101.324997	101.324997	240	240	240	240	240	240	240	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997
	Molar Flow	kgmole/h	481.3	489.65258	489.65258	489.65258	489.65258	882.84072	882.84072	487.384292	0	395.456428	88.858635	398.525657	390.088708	8.436949	0.084369	8.35258	8.35258	
	Mass Flow	kg/h	51097.696	51978.9056	51978.9056	51978.9056	51978.9056	51979.9293	51979.9293	49611.6957	0	2368.23366	8092.27995	41519.4157	40629.3049	890.110784	8.901108	881.209676	881.209668	
	Composición molar	E-Benzene-NTRL		1	0.999177	0.999177	0.999177	0.999177	0.011803	0.011803	0.021191	0.016374	0.021191	0.021476	0.021128	0.001	0.951765	0.951765	0.951765	0.951765
		Styrene-NTRL		0	0.000017	0.000017	0.000017	0.000017	0.444617	0.444617	0.801412	0.798736	0.801412	0.01	0.977872	0.999	0.001	0.001	0.001	0.001
		Hydrogen-NTRL		0	0	0	0	0	0.347598	0.347598	0.000735	0.000733	0.000735	0.004031	0	0	0	0	0	0
		Benzene-NTRL		0	0	0	0	0	0.000759	0.000759	0.001293	0.00126	0.001293	0.007091	0	0	0	0	0	0
		Ethylene-NTRL		0	0	0	0	0	0.000759	0.000759	0.000046	0.000045	0.000046	0.000251	0	0	0	0	0	0
		Toluene-NTRL		0	0.000806	0.000806	0.000806	0.000806	0.097456	0.097456	0.172893	0.180399	0.172893	0.943825	0.001	0	0.047235	0.047235	0.047235	0.047235
Methane-NTRL		0	0	0	0	0	0.097009	0.097009	0.00243	0.002454	0.00243	0.013326	0	0	0	0	0	0		
PRSV	Temperature	C	25	27.20472	200	223.750212	649.45	329.10265	35	35	35	35	116.94083	145.52587	145.626461	136.086925	136.086925	136.086925	136.086925	
	Pressure	kPa	101.324997	101.324997	101.324997	240	240	240	240	240	240	240	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997	101.324997
	Molar Flow	kgmole/h	481.3	484.573732	484.573732	484.573732	484.573732	874.051174	874.051174	481.507475	0	392.543699	97.794646	383.712829	380.406029	3.3068	0.033068	3.273732	3.273732	
	Mass Flow	kg/h	51097.696	51444.6565	51444.6565	51444.6565	51444.6565	51445.67	51445.67	49080.518	0	2365.15205	9103.10859	39977.4094	39626.9442	350.465204	3.504652	346.960552	346.960552	
	Composición molar	E-Benzene-PRSV		1	0.999854	0.999854	0.999854	0.999854	0.011848	0.011848	0.021348	0.021348	0.000195	0.037017	0.017354	0.009	0.978402	0.978402	0.978402	0.978402
		Styrene-PRSV		0	0.000068	0.000068	0.000068	0.000068	0.444875	0.444875	0.803338	0.803338	0.005173	0.100187	0.982546	0.991	0.01	0.01	0.01	0.01
		Hydrogen-PRSV		0	0	0	0	0	0.347965	0.347965	0.000247	0.000247	0.774489	0.001215	0	0	0	0	0	0
		Benzene-PRSV		0	0	0	0	0	0.000761	0.000761	0.001293	0.001293	0.00011	0.006364	0	0	0	0	0	0
		Ethylene-PRSV		0	0	0	0	0	0.000761	0.000761	0.00005	0.00005	0.001634	0.000248	0	0	0	0	0	0
		Toluene-PRSV		0	0.000078	0.000078	0.000078	0.000078	0.096916	0.096916	0.172217	0.172217	0.004548	0.847548	0.0001	0	0.011598	0.011598	0.011598	0.011598
Methane-PRSV		0	0	0	0	0	0.096872	0.096872	0.001507	0.001507	0.213851	0.007421	0	0	0	0	0	0		

### 3.5. Costos del proceso

Los costos del proceso de la producción de estireno están relacionados con la inversión que se necesita para implementarlo, incluyendo instalación de equipos, adecuación de espacios, materias primas, equipos, cantidad y tipo de servicio industrial utilizado, tratamiento ambiental para los desechos, y demás ítems relacionados con la operación de la planta, denominados costos de capital y operación respectivamente.

Los intercambiadores de calor simulados en Aspen Hysys v.8.0, son equipos sencillos llamados *coolers* y *heaters* los cuales no determinan ni el tipo ni la cantidad de servicio industrial que necesitan para cumplir con su función, por lo tanto, es necesario calcular el flujo másico de servicio industrial y el tipo de intercambiador utilizado para cada paquete termodinámico como se muestra a continuación: (Henaó, 2006) (Geankoplis, 1998) (Kakac, et al., 2002) (EPM, 2013) (Smith, et al., 1996)

**Tabla 24. Servicios industriales utilizados para la producción de estireno con Peng Robinson como paquete termodinámico**

Equipo	Calor (W)	U (W/m <sup>2</sup> K)	T <sub>inicial</sub> (°C)	T <sub>final</sub> (°C)	ΔT <sub>LM</sub> (°C)	A (m <sup>2</sup> )	t <sub>inicial</sub> (°C)	t <sub>final</sub> (°C)	Servicio
E-100 (Qh)	9416760.87	340.500	27.026	200.000	18.993	1456.085	400.00	60.00	Aceite térmico
E-101 (Qh1)	15103057	227.000	223.792	649.450	35.542	1871.952	1000.00	250.00	Gas natural
E-102 (Qc1)	13468564.46	340.500	332.388	35.000	32.060	1233.793	25.00	70.00	Agua de proceso
C2 (T-100)	2816102.153	680.900	35.000	110.427	4.066	1017.114	200.00	90.00	Vapor de baja
R2 (T-100)	6231111.025	680.900	35.000	144.927	8.535	1072.198	250	70	Vapor de media
C3 (T-101)	9524262.843	680.900	144.927019	124.5705	11.937	1171.815	100	25	Agua de proceso
R3 (T-101)	9527742.438	680.900	144.927019	145.5685	17.835	784.581	145	80	Vapor de baja

**Tabla 25. Servicios industriales utilizados para la producción de estireno con Non Random Two Liquids como paquete termodinámico**

Equipo	Calor (W)	U (W/m <sup>2</sup> K)	T <sub>inicial</sub> (°C)	T <sub>final</sub> (°C)	ΔT <sub>LM</sub> (°C)	A (m <sup>2</sup> )	t <sub>inicial</sub> (°C)	t <sub>final</sub> (°C)	Servicio
E-100 (Qh)	9407665.886	340.500	27.388	200.000	15.914	1736.095	400.00	80.00	Aceite térmico
E-101 (Qh1)	15058061.73	227.000	222.945	649.450	25.335	2618.302	900.00	250.00	Gas natural
E-102 (Qc1)	13495649.27	340.500	332.214	35.000	32.040	1237.027	25.00	70.00	Agua de proceso
C2 (T-100)	2903141.979	680.900	35.000	111.060	3.995	1067.204	200.00	90.00	Vapor de baja
R2 (T-100)	6444756.46	680.900	35.000	145.0869	8.517	1111.290	250	70	Vapor de media
C3 (T-101)	12693178.05	680.900	145.086893	135.0595	10.189	1829.650	100	25	Agua de proceso
R3 (T-101)	12781389.01	680.900	145.086893	145.4524	19.108	982.389	145	80	Vapor de baja

**Tabla 26. Servicios industriales utilizados para la producción de estireno con Peng Robinson-Soave como paquete termodinámico**

Equipo	Calor (W)	U (W/m <sup>2</sup> K)	T <sub>inicial</sub> (°C)	T <sub>final</sub> (°C)	ΔT <sub>LM</sub> (°C)	A (m <sup>2</sup> )	t <sub>inicial</sub> (°C)	t <sub>final</sub> (°C)	Servicio
E-100 (Qh)	9512945.758	340.500	27.360	200.000	19.053	1466.335	400.00	60.00	Aceite térmico
E-101 (Qh1)	14941475.91	227.000	223.752	649.450	42.220	1559.025	1000.00	233.00	Gas natural
E-102 (Qc1)	13330843.73	340.500	329.283	35.000	31.713	1234.522	25.00	70.00	Agua de proceso
C2 (T-100)	2228437.459	680.900	35.000	116.927	3.331	982.443	200.00	90.00	Vapor de baja
R2 (T-100)	5818556.868	680.900	35.000	145.529	8.468	1009.175	250	70	Vapor de media
C3 (T-101)	6610343.529	680.900	145.529	137.0268	9.937	977.025	100	25	Agua de proceso
R3 (T-101)	6646233.971	680.900	145.529	145.6265	17.471	558.689	145	80	Vapor de baja

Para el cálculo de estos costos se necesitan unos valores característicos como el área de transferencia de calor para los intercambiadores, la potencia del compresor, las dimensiones del reactor, la cantidad de platos y dimensiones de la torre de destilación, la cantidad de materias primas utilizadas por año, el flujo de productos obtenidos por año y el flujo y tipo de servicios industriales por año; que permitan identificar en tablas heurísticas el tipo de equipo utilizado que cumpla las características principales de proceso anteriormente mencionado, tal y como se muestra a continuación:

**Tabla 27. Equipo principales, entradas y salidas para la producción de estireno con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico**

Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de Estireno							
EQUIPOS							
	Descripción	Tipo	Cantidad	Capacidad		Material de construcción	Presión operativa (barg)
E-100	Intercambiador líquido-vapor	Platos planos	1	A[m²]	1456.085	S.S	1.013
K-100	Compresor	Centrifugo	1	W [KW]	605.805	S.S	2.40
E-101	Horno	Platos planos	1	A[m²]	1871.952	S.S	2.40
PFR-100	Reactor PFR	Recipiente empacado	1	D[m] , L[m]	1.950   1.702	S.S	2.40
E-102	Intercambiador vapor - equilibrio	Platos planos	1	A[m²]	1233.793	S.S	2.40
V-100	Tanque separador de 3 fases	Recipiente	1	D[m] , L[m]	0.647   1.940	S.S	2.40
T-100	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.504   2.018	S.S	2.40
PT-100	Platos de la T-100	Perforados	17	D[m]	0.504	C.S	1.013
C2 (T-100)	Condensador de la T-100	Platos planos	1	A[m²]	1017.114	S.S	1.013
R2 (T-100)	Rehervidor de la T-100	Platos planos	1	A[m²]	1072.198	S.S	1.013
T-101	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.308   1.230	S.S	1.013
PT-101	Platos de la T-101	Perforados	34	D[m]	0.308	C.S	1.013
C3 (T-101)	Condensador de la T-101	Platos planos	1	A[m²]	1171.815	S.S	1.013
R3 (T-101)	Rehervidor de la T-101	Tubos en U	1	A[m²]	784.581	S.S	1.013
ENTRADAS Y SALIDAS							
	Tipo	Flujos [kg/año]					
Etil benceno	Materia prima	441,484,093					
Estireno	Producto	200,047,813					
Hidrogeno	Producto	155,168,713					
Benceno	Producto	333,277					
Etileno	Producto	333,277					
Tolueno	Producto	45,923,909					
Metano	Producto	43,901,756					
Agua de enfriamiento	Servicio Industrial	3,156,988,588					
Vapor de baja presión (LPS)	Servicio Industrial	1,233,431,457					
Aceite térmico	Servicio Industrial	368,148,479					
Gas natural	Servicio Industrial	68,596,428					

**Tabla 28. Equipos principales, entradas y salidas para la producción de estireno con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico**

Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de Estireno							
EQUIPOS							
	Descripción	Tipo	Cantidad	Capacidad		Material de construcción	Presión operativa (barg)
E-100	Intercambiador líquido-vapor	Enfriador de aire	1	A[m <sup>2</sup> ]	1736.095	S.S	1.013
K-100	Compresor	Centrífugo	1	W[KW]	627.990	S.S	2.40
E-101	Horno		1	A[m <sup>2</sup> ]	2618.302	S.S	2.40
PFR-100	Reactor PFR	Recipiente empacado	1	D[m] , L[m]	1.950   1.702	S.S	2.40
E-102	Intercambiador vapor - equilibrio	Platos planos	1	A[m <sup>2</sup> ]	1237.027	S.S	2.40
V-100	Tanque separador de 3 fases	Recipiente	1	D[m] , L[m]	0.645   1.934	S.S	2.40
T-100	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.504   2.018	S.S	2.40
PT-100	Platos de la T-100	Perforados	20	D[m]	0.504	C.S	1.013
C2 (T-100)	Condensador de la T-100	Platos planos	1	A[m <sup>2</sup> ]	1067.204	S.S	1.013
R2 (T-100)	Rehervidor de la T-100	Platos planos	1	A[m <sup>2</sup> ]	1111.290	S.S	1.013
T-101	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.306   1.223	S.S	1.013
PT-101	Platos de la T-101	Perforados	78	D[m]	0.306	C.S	1.013
C3 (T-101)	Condensador de la T-101	Platos planos	1	A[m <sup>2</sup> ]	1829.650	S.S	1.013
R3 (T-101)	Rehervidor de la T-101	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	982.389	S.S	1.013
ENTRADAS Y SALIDAS							
	Tipo		Flujos [kg/año]				
Etil benceno	Materia prima		441,484,093				
Estireno	Producto		200,032,067.754				
Hidrogeno	Producto		155,180,854.189				
Benceno	Producto		333,727.103				
Etileno	Producto		333,727.103				
Tolueno	Producto		45,896,472.040				
Metano	Producto		43,873,869.906				
Agua de enfriamiento	Servicio industrial		4,824,995,861.469				
Vapor de baja presión (LPS)	Servicio industrial		3,478,193,483.499				
Vapor de media presión (MPS)	Servicio industrial		556,826,958.162				
Aceite térmico	Servicio industrial		390,779,967.585				
Gas natural	Servicio industrial		82,318,810.159				

**Tabla 29. Equipos principales, entradas y salidas para la producción de estireno con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico**

Equipos principales, entradas y salidas de una planta de producción de Estireno							
EQUIPOS							
	Descripción	Tipo	Cantidad	Capacidad		Material de construcción	Presión operativa (barg)
E-100	Intercambiador líquido-vapor	Platos planos	1	A[m <sup>2</sup> ]	1466.335	S.S	1.013
K-100	Compresor	Centrifugo	1	W[KW]	598.310	S.S	2.40
E-101	Intercambiador de calor	Enfriador de aire	1	A[m <sup>2</sup> ]	1559.025	S.S	2.40
PFR-100	Reactor PFR	Recipiente empacado	1	D[m] , L[m]	1.950   1.702	S.S	2.40
E-102	Intercambiador vapor - equilibrio	Platos planos	1	A[m <sup>2</sup> ]	1234.522	S.S	2.40
V-100	Tanque separador de 3 fases	Recipiente	1	D[m] , L[m]	0.644   1.933	S.S	2.40
T-100	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.502   2.008	S.S	2.40
PT-100	Platos de la T-100	Perforados	40	D[m]	0.502	C.S	1.013
C2 (T-100)	Condensador de la T-100	Platos planos	1	A[m <sup>2</sup> ]	982.443	S.S	1.013
R2 (T-100)	Rehervidor de la T-100	Platos planos	1	A[m <sup>2</sup> ]	1009.175	S.S	1.013
T-101	Torre de destilación	Torre de platos	1	D[m] , L[m]	0.301   1.203	S.S	1.013
PT-101	Platos de la T-101	Perforados	113	D[m]	0.301	C.S	1.013
C3 (T-101)	Condensador de la T-101	Platos planos	1	A[m <sup>2</sup> ]	977.025	S.S	1.013
R3 (T-101)	Rehervidor de la T-101	Tubos en U	1	A[m <sup>2</sup> ]	558.689	S.S	1.013
ENTRADAS Y SALIDAS							
	Tipo	Flujos [kg/año]					
Etil benceno	Materia prima	441,484,093					
Estireno	Producto	197,941,871					
Hidrogeno	Producto	154,666,489					
Benceno	Producto	337,964					
Etileno	Producto	337,964					
Tolueno	Producto	43,116,628					
Metano	Producto	43,097,506					
Agua de enfriamiento	Servicio Industrial	5,300,963,665					
Vapor de baja presión (LPS)	Servicio Industrial	3,810,497,409					
Vapor de media presión (MPS)	Servicio Industrial	1,005,446,627					
Aceite térmico	Servicio Industrial	870,266,661					
Gas natural	Servicio Industrial	605,918,731					

### 3.5.1. Costos de capital

Los costos de capital para la producción de estireno están definidos como el costo de los equipos, con su instalación y adecuación apropiada para desarrollar el objeto comercial, para el cual cada equipo fue desarrollado. Estos costos están divididos por cada paquete termodinámico de la siguiente forma: (Henao, 2006)

Tabla 30. Costos de capital para la producción de estireno con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico

Cálculo de los costos de capital de la planta de producción de estireno.																					
Compresores																					
	FM	$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$							$\log(C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)$							$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$					
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
K-100	2.52	---	---	---	--	--	2.40	1.000	0	2.500	6.300	2.500	2.9945	0.9542	0	605.805	382	400	\$467,088	\$2,942,652	\$1,167,719
Intercambiadores de calor																					
	FM	$\log_{10}(F_P)=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2$							$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$		
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
E-100	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1456.085	382	400	\$163,916	\$ 729,589	\$ 458,964
E-101	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	2.40	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1871.952	382	400	\$182,349	\$ 811,637	\$ 510,578
E-102	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	2.40	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1233.793	382	400	\$152,792	\$ 680,079	\$ 427,819
C2 (T-100)	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1017.114	382	400	\$140,774	\$ 626,585	\$ 394,167
R2 (T-100)	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1072.198	382	400	\$143,959	\$ 640,762	\$ 403,086
C3 (T-101)	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1171.815	382	400	\$149,488	\$ 665,372	\$ 418,567
R3 (T-101)	3.0	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	1.013	0.862	1.80	1.50	5.677	3.300	3.2138	0.2688	0.07961	784.581	382	400	\$ 47,744	\$ 271,048	\$ 157,556
Recipientes a presión																					
	FM	$F_P=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2+C_4 \cdot (\log_{10}(P))^3+C_5 \cdot (\log_{10}(P))^4$							$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{(K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$		
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
PFR-100	4	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	2.40	0.818	1.62	1.47	6.427	3.090	3.7599	0.3683	0.1954	2.98648	382	400	\$ 9,977	\$ 64,129	\$ 30,830
T-100	4	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	2.40	0.818	2.5	1.72	8.125	4.220	3.4746	0.5893	0.2053	0.19987	382	400	\$ 1,524	\$ 12,380	\$ 6,430
T-101	4	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	1.013	0.518	2.5	1.72	6.067	4.220	3.4746	0.5893	0.2053	0.0743	382	400	\$ 1,233	\$ 7,480	\$ 5,203
Internos (Platos)																					
	FM	$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$							$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot N \cdot F_q \cdot (K_1+K_2 \cdot A+K_3 \cdot A^2)$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$						
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	F <sub>q</sub>	N	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>
PT-100	1	--	--	--	--	--	--	1	1.200	1.200	1	17	235	19.8	75.07	0.19987	382	400	\$ 4,307	\$ 5,168	\$ 5,168
PT-101	1	--	--	--	--	--	--	1	1.200	1.200	1	34	235	19.8	75.07	0.0743	382	400	\$ 8,434	\$ 10,120	\$ 10,120
																			Σ	\$ 7,467,003	\$ 3,996,208
Costos totales																					
$C_{MT}=1.18(\Sigma C_{M(k)})$		\$ 8,811,063		$ICF=C_{MG}=C_{MT}+0.35(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 10,209,736		$L=0.1(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 399,621		$ICF_L=C_{MT}+0.25(\Sigma C_{M(k)}^0)$		\$ 9,810,115							

Tabla 31. Costos de capital para la producción de estireno con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico

Cálculo de los costos de capital de la planta de producción de estireno.																								
Compresores																								
	FM	$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$							$\log(C_{Eq}^0)=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2$							$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$								
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>			
K-100	2.52	---	---	---	--	--	2.40	1.000	0	2.500	6.300	2.500	2.9945	0.9542	0	627.990	382	400	\$483,396	\$3,045,395	\$1,208,490			
Intercambiadores de calor																								
	FM	$\log_{10}(F_P)=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2$							$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$					
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>			
E-100	3	-0.06154	0.0473	0	--	--	1.013	0.868	1.53	1.27	4.839	2.800	3.6418	0.4053	0	1736.095	382	400	\$ 94,362	\$ 456,583	\$ 264,213			
E-101	3	-0.06154	0.0473	0	--	--	2.40	0.905	1.53	1.27	4.976	2.800	3.6418	0.4053	0	2618.302	382	400	\$111,460	\$ 554,674	\$ 312,089			
E-102	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	2.40	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1237.027	382	400	\$152,962	\$ 680,834	\$ 428,294			
C2 (T-100)	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1067.204	382	400	\$143,674	\$ 639,494	\$ 402,288			
R2 (T-100)	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1111.290	382	400	\$146,163	\$ 650,570	\$ 409,256			
C3 (T-101)	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1829.650	382	400	\$180,590	\$ 803,805	\$ 505,651			
R3 (T-101)	3	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	1.013	0.862	1.80	1.50	5.677	3.300	3.2138	0.2688	0.07961	982.389	382	400	\$ 56,355	\$ 319,931	\$ 185,971			
Recipientes a presión																								
	FM	$F_P=C_1+C_2 \cdot \log_{10}(P)+C_3 \cdot (\log_{10}(P))^2+C_4 \cdot (\log_{10}(P))^3+C_5 \cdot (\log_{10}(P))^4$							$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$				$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot 10^{K_1+K_2 \cdot \log_{10}(A)+K_3 \cdot (\log_{10}(A))^2}$						$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$					
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>			
PFR-100	4	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	2.40	0.818	1.62	1.47	6.427	3.090	3.7599	0.3683	0.1954	2.98648	382	400	\$ 9,977	\$ 64,129	\$ 30,830			
T-100	4	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	2.40	0.818	2.5	1.72	8.125	4.220	3.4746	0.5893	0.2053	0.19987	382	400	\$ 1,524	\$ 12,380	\$ 6,430			
T-101	4	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	1.013	0.518	2.5	1.72	6.067	4.220	3.4746	0.5893	0.2053	0.07344	382	400	\$ 1,231	\$ 7,470	\$ 5,196			
Internos (Platos)																								
	FM	$F_{CM}=B_1+B_2 \cdot F_P \cdot F_M, F_{CM}^0=B_1+B_2$							$C_{Eq}^0=(IP_{Act}/IP_{Ref}) \cdot N \cdot F_q \cdot (K_1+K_2 \cdot A+K_3 \cdot A^2)$							$C_M=F_{CM} \cdot C_{Eq}^0$								
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sub>CM</sub> <sup>0</sup>	F <sub>q</sub>	N	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sub>Eq</sub> <sup>0</sup>	C <sub>M</sub>	C <sub>M</sub> <sup>0</sup>			
PT-100	1	--	--	--	--	--	--	1	1.200	1.200	1	20	235	19.8	75.07	0.19987	382	400	\$ 5,067	\$ 6,081	\$ 6,081			
PT-101	1	--	--	--	--	--	--	1	1.200	1.200	1	78	235	19.8	75.07	0.07344	382	400	\$ 19,346	\$ 23,215	\$ 23,215			
																			Σ	\$7,264,560	\$3,788,002			
Costos totales																								
$C_{MT}=1.18(\Sigma C_{M(k)})$		\$ 8,572,181					$ICF=C_{MG}=C_{MT}+0.35(\Sigma C_{M(k)}^0)$				\$ 9,897,982			$L=0.1(\Sigma C_{M(k)}^0)$			\$ 378,800		$ICF_L=C_{MT}+0.25(\Sigma C_{M(k)}^0)$				\$ 9,519,182	

Tabla 32. Costos de capital para la producción de estireno con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico

Cálculo de los costos de capital de la planta de producción de estireno.																					
Compresores																					
	FM	$F_{CM}=B_1+B_2.F_M.F_P, F^0_{CM}=B_1+B_2$							$\log(C^0_{Eq}=(IP_{Act}/IP_{Ref}).K_1+K_2.\log_{10}(A)+K_3.(\log_{10}(A))^2)$								$C_M=F_{CM}.C^0_{Eq}$				
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sup>0</sup> <sub>CM</sub>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sup>0</sup> <sub>Eq</sub>	C <sub>M</sub>	C <sup>0</sup> <sub>M</sub>
K-100	2.52	---	---	---	--	--	2.40	1.000	0	2.500	6.300	2.500	2.9945	0.9542	0	598.31	382	400	\$461,572	\$2,907,904	\$1,153,930
Intercambiadores de calor																					
	FM	$\log_{10}(F_P)=C_1+C_2.\log_{10}(P)+C_3.(\log_{10}(P))^2$							$F_{CM}=B_1+B_2.F_P.F_M, F^0_{CM}=B_1+B_2$				$C^0_{Eq}=(IP_{Act}/IP_{Ref}).10^{(K_1+K_2.\log_{10}(A)+K_3.(\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM}.C^0_{Eq}$		
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sup>0</sup> <sub>CM</sub>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sup>0</sup> <sub>Eq</sub>	C <sub>M</sub>	C <sup>0</sup> <sub>M</sub>
E-100	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1466.335	382	400	\$164,404	\$ 731,763	\$ 460,332
E-101	3	-0.0615	0.0473	0.0000	--	--	2.40	0.905	1.53	1.27	4.976	2.800	3.6418	0.4053	0	1559.025	382	400	\$ 90,336	\$ 449,549	\$ 252,940
E-102	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	2.40	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1234.522	382	400	\$152,831	\$ 680,249	\$ 427,926
C2 (T-100)	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	982.443	382	400	\$138,718	\$ 617,435	\$ 388,411
R2 (T-100)	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	1009.175	382	400	\$140,307	\$ 624,506	\$ 392,859
C3 (T-101)	2.3	0.0000	0.0000	0.0000	--	--	1.013	1.000	1.53	1.27	4.451	2.800	3.8528	0.4242	0	977.025	382	400	\$138,393	\$ 615,988	\$ 387,501
R3 (T-101)	3.0	-0.06499	0.05025	0.01474	--	--	1.013	0.862	1.80	1.50	5.677	3.300	3.2138	0.2688	0.07961	558.689	382	400	\$ 37,415	\$ 212,409	\$ 123,470
Recipientes a presión																					
	FM	$F_P=C_1+C_2.\log_{10}(P)+C_3.(\log_{10}(P))^2+C_4.(\log_{10}(P))^3+C_5.(\log_{10}(P))^4$							$F_{CM}=B_1+B_2.F_P.F_M, F^0_{CM}=B_1+B_2$				$C^0_{Eq}=(IP_{Act}/IP_{Ref}).10^{(K_1+K_2.\log_{10}(A)+K_3.(\log_{10}(A))^2)}$						$C_M=F_{CM}.C^0_{Eq}$		
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sup>0</sup> <sub>CM</sub>	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sup>0</sup> <sub>Eq</sub>	C <sub>M</sub>	C <sup>0</sup> <sub>M</sub>
PFR-100	4	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	2.40	0.818	1.62	1.47	6.427	3.090	3.7599	0.3683	0.1954	2.98648	382	400	\$ 9,977	\$ 64,129	\$ 30,830
T-100	4	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	2.40	0.818	2.5	1.72	8.125	4.220	3.4746	0.5893	0.2053	0.19797	382	400	\$ 1,519	\$ 12,345	\$ 6,412
T-101	4	0.5146	0.6838	0.297	0.0235	0.002	1.013	0.518	2.5	1.72	6.067	4.220	3.4746	0.5893	0.2053	0.07104	382	400	\$ 1,226	\$ 7,440	\$ 5,175
Internos (Platos)																					
	FM	$F_{CM}=B_1+B_2.F_P.F_M, F^0_{CM}=B_1+B_2$							$C^0_{Eq}=(IP_{Act}/IP_{Ref}).N.Fq.(K_1+K_2.A+K_3.A^2)$								$C_M=F_{CM}.C^0_{Eq}$				
		C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	P [barg]	F <sub>P</sub>	F <sub>CM</sub>	F <sup>0</sup> <sub>CM</sub>	Fq	N	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	A	IP <sub>Ref.</sub>	IP <sub>Act.</sub>	C <sup>0</sup> <sub>Eq</sub>	C <sub>M</sub>	C <sup>0</sup> <sub>M</sub>
PT-100	1	--	--	--	--	--	--	1	1.200	1.200	1	40	235	19.8	75.07	0.19797	382	400	\$ 10,130	\$ 12,156	\$ 12,156
PT-101	1	--	--	--	--	--	--	1	1.200	1.200	1	113	235	19.8	75.07	0.07104	382	400	\$ 28,018	\$ 33,621	\$ 33,621
Costos totales																					
$C_{MT}=1.18(\Sigma C_{M(k)})$		\$ 8,224,003		$ICF=C_{MG}=C_{MT}+0.35(\Sigma C^0_{M(k)})$		\$ 9,510,450		$L=0.1(\Sigma C^0_{M(k)})$		\$ 367,556		$ICF_L=C_{MT}+0.25(\Sigma C^0_{M(k)})$		\$ 9,142,893							

### **3.5.2. Costos de operación**

Los costos de operación para la producción del estireno están determinados por año con la cantidad de materias primas utilizadas, el tipo y cantidad de servicios industriales necesarios confrontado con el precio de venta de los productos obtenidos.

Como el proceso de producción del estireno se realiza bajo tres paquetes termodinámicos diferentes, es necesario presentar estos costos de manera independiente por cada paquete termodinámico (EPM, 2013) (Reed business information limited, 2013) (Turton, et al., 2009)

Tabla 33. Costos de operación del proceso de producción del estireno con Peng Robinson (PR) como paquete termodinámico

<b>Cálculo del costos operativos de una planta de producción de Estireno</b>			
<b>Costos de materias primas (C<sub>MP</sub>)</b>			
Descripción	Consumo anual F <sub>MP(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>MP(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>MP(k)</sub> [\$/año]
Etil benceno	441,484,093	1.342	\$ 592,471,653
<b>Total C<sub>MP</sub> [\$/año]</b>			<b>\$ 592,471,653</b>
<b>Costos de tratamiento de residuos industriales (C<sub>TR</sub>)</b>			
Tipo	Consumo anual F <sub>R(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>TR(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>TR(k)</sub> [\$/año]
Agua de enfriamiento (Residuo no peligroso)	3,156,988,588	0.36	1136515892
Vapor de baja presión (LPS) (Residuo no peligroso)	1,233,431,457	0.36	444035324.4
<b>Total C<sub>TR</sub> [\$/año]</b>			<b>\$ 1,580,551,216</b>
<b>Costos de servicios industriales (C<sub>SI</sub>)</b>			
Tipo	Consumo anual F <sub>SI(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>SI(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>SI(k)</sub> [\$/año]
Agua de enfriamiento	3,156,988,588	0.0148	\$ 46,723,431
Vapor de baja presión (LPS)	1,233,431,457	0.0277	\$ 34,166,051
Aceite térmico	368,148,479	0.549	\$ 202,113,515
Gas natural	68,596,428	1.003	\$ 68,802,217
<b>Total C<sub>SI</sub> [\$/año]</b>			<b>\$ 351,805,214</b>
<b>Costos de mano de obra operativa (C<sub>MOO</sub>)</b>			
Equipo	N <sub>k</sub>	L <sub>S(k)</sub>	L <sub>S(k)</sub> ·N <sub>k</sub>
Compresor	1	0.00	0.0000
Intercambiadores	7	0.10	0.7000
Torres	2	0.35	0.7000
Reactores	1	0.50	0.5000
$L_S = \sum L_{S(k)} \cdot N_k$	1.9000	$\tau_Y$	1095
S <sub>Op</sub>	\$ 17,000	L <sub>Y(Op)</sub>	245
N <sub>Op</sub>	8.4918	<b>C<sub>MOO</sub> [\$/año]</b>	<b>\$ 144,361</b>
<b>Costos operativos sin depreciación y costo por depreciación</b>			
<b>COT<sub>d</sub></b>	<b>\$ 3,107,770,402</b>	<b>C<sub>Dep</sub></b>	<b>\$ 882,910</b>
<b>Ingreso por venta de productos (V)</b>			
Tipo	Producción F <sub>Prod(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>Prod(k)</sub> [\$/kg]	V <sub>(k)</sub> [\$/año]
Estireno	200,047,813	3.52	\$ 704,168,302.14
Hidrogeno	155,168,713	4	
Benceno	333,277	1.714285714	\$ 571,332.59
Etileno	333,277	1.54	\$ 513,247.11
Tolueno	45,923,909	4.62	\$ 212,168,457.88
Metano	43,901,756	1.03	\$ 45,218,808.92
<b>Total V [\$/año]</b>			<b>\$ 962,640,149</b>

Tabla 34. Costos operativos para la producción de estireno con Non Random Two Liquids (NRTL) como paquete termodinámico

<b>Cálculo del costos operativos de una planta de producción de Estireno</b>				
<b>Costos de materias primas (C<sub>MP</sub>)</b>				
Descripción		Consumo anual F <sub>MP(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>MP(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>MP(k)</sub> [\$/año]
Etil benceno		441,484,093	1.76	\$ 777,012,004
<b>Total C<sub>MP</sub> [\$/año]</b>				<b>\$ 777,012,004</b>
<b>Costos de tratamiento de residuos industriales (C<sub>TR</sub>)</b>				
Tipo		Consumo anual F <sub>R(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>TR(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>TR(k)</sub> [\$/año]
Agua de enfriamiento		4824995861	0.036	\$ 173,699,851.01
Vapor de baja presión (LPS)	(Residuo no peligroso)	3478193483	0.036	\$ 125,214,965.41
Vapor de media presión (MPS)	(Residuo no peligroso)	556826958.2	0.036	\$ 20,045,770.49
<b>Total C<sub>TR</sub> [\$/año]</b>				<b>\$ 318,960,587</b>
<b>Costos de servicios industriales (C<sub>SI</sub>)</b>				
Tipo		Consumo anual F <sub>SI(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>SI(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>SI(k)</sub> [\$/año]
Agua de enfriamiento		4824995861	0.0148	\$ 71,409,938.75
Vapor de baja presión (LPS)		3478193483	0.0277	\$ 96,345,959.49
Vapor de media presión (MPS)		556826958.2	0.0283	\$ 15,758,202.92
Aceite térmico		390779967.6	0.549	\$ 214,538,202.20
Gas natural		82318810.16	1.003	\$ 82,565,766.59
<b>Total C<sub>SI</sub> [\$/año]</b>				<b>\$ 480,618,070</b>
<b>Costos de mano de obra operativa (C<sub>MOO</sub>)</b>				
Equipo		N <sub>k</sub>	L <sub>s(k)</sub>	L <sub>s(k)</sub> ·N <sub>k</sub>
Compresores		1	0.00	0.0000
Intercambiadores		7	0.10	0.7000
Torres		2	0.35	0.7000
Reactores		1	0.50	0.5000
<b>L<sub>S</sub> = Σ L<sub>S(k)</sub>·N<sub>k</sub></b>		1.9000	τ <sub>Y</sub>	1095
<b>S<sub>Op</sub></b>		\$ 17,000	L <sub>Y(Op)</sub>	245
<b>N<sub>Op</sub></b>		8.4918	<b>C<sub>MOO</sub> [\$/año]</b>	\$ 144,361
<b>Costos operativos sin depreciación y costo por depreciación</b>				
<b>COT<sub>d</sub></b>		\$ 1,941,382,256	<b>C<sub>Dep</sub></b>	\$ 856,726
<b>Ingreso por venta de productos (V)</b>				
Tipo		Producción F <sub>Prod(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>Prod(k)</sub> [\$/kg]	V <sub>(k)</sub> [\$/año]
Estireno		200,032,068	3.520	\$ 704,112,878
Hidrogeno		155,180,854	4.000	\$ 620,723,417
Benceno		333,727	1.714	\$ 572,104
Etileno		333,727	4.620	\$ 1,541,819
Tolueno		45,896,472	3.159	\$ 144,974,570
Metano		43,873,870	1.030	\$ 45,190,086
<b>Total V [\$/año]</b>				<b>\$ 1,517,114,874</b>

Tabla 35. Costos de operación en la producción de estireno con Peng Robinson-Soave (PRSV) como paquete termodinámico

<b>Cálculo del costos operativos de una planta de producción de Estireno</b>				
<b>Costos de materias primas (C<sub>MP</sub>)</b>				
Descripción		Consumo anual F <sub>MP(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>MP(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>MP(k)</sub> [\$/año]
Etil benceno		441,484,093	1.342	\$ 592,471,653
<b>Total C<sub>MP</sub> [\$/año]</b>				<b>\$ 592,471,653</b>
<b>Costos de tratamiento de residuos industriales (C<sub>TR</sub>)</b>				
Tipo		Consumo anual F <sub>R(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>TR(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>TR(k)</sub> [\$/año]
Agua de enfriamiento	(Residuo no peligroso)	5,300,963,665	0.36	\$ 1,908,346,919.32
Vapor de baja presión (LPS)	(Residuo no peligroso)	3,810,497,409	0.36	\$ 1,371,779,067.29
Vapor de media presión (MPS)	(Residuo no peligroso)	1,005,446,627	0.36	\$ 361,960,785.63
<b>Total C<sub>TR</sub> [\$/año]</b>				<b>\$ 3,642,086,772</b>
<b>Costos de servicios industriales (C<sub>SI</sub>)</b>				
Tipo		Consumo anual F <sub>SI(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>SI(k)</sub> [\$/kg]	C <sub>SI(k)</sub> [\$/año]
Agua de enfriamiento		5,300,963,665	0.0148	\$ 78,454,262
Vapor de baja presión (LPS)		3,810,497,409	0.0277	\$ 105,550,778
Vapor de media presión (MPS)		1,005,446,627	0.0283	\$ 28,454,140
Aceite térmico		870,266,661	0.5490	\$ 477,776,397
Gas natural		605,918,731	1.0030	\$ 607,736,487
<b>Total C<sub>SI</sub> [\$/año]</b>				<b>\$ 1,297,972,064</b>
<b>Costos de mano de obra operativa (C<sub>MOO</sub>)</b>				
Equipo		N <sub>k</sub>	L <sub>S(k)</sub>	L <sub>S(k)</sub> ·N <sub>k</sub>
Compresor		1	0.00	0.0000
Intercambiadores		7	0.10	0.7000
Torres		2	0.35	0.7000
Reactores		1	0.50	0.5000
L <sub>S</sub> =ΣL <sub>S(k)</sub> ·N <sub>k</sub>		1.9000	τ <sub>Y</sub>	1095
S <sub>Op</sub>		\$ 17,000	L <sub>Y(Op)</sub>	245
N <sub>Op</sub>		8.4918	<b>C<sub>MOO</sub> [\$/año]</b>	<b>\$ 144,361</b>
<b>Costos operativos sin depreciación y costo por depreciación</b>				
COT <sub>d</sub>		\$ 6,807,118,490	C <sub>Dep</sub>	\$ 822,860
<b>Ingreso por venta de productos (V)</b>				
Tipo		Producción F <sub>Prod(k)</sub> [kg/año]	Precio P <sub>Prod(k)</sub> [\$/kg]	V <sub>(k)</sub> [\$/año]
Estireno		197,941,871	3.520	\$ 696,755,385
Hidrogeno		154,666,489	4.000	\$ 618,665,956
Benceno		337,964	1.714	\$ 579,367
Etileno		337,964	1.540	\$ 520,464
Tolueno		43,116,628	4.620	\$ 199,198,821
Metano		43,097,506	1.030	\$ 44,390,431
<b>Total V [\$/año]</b>				<b>\$ 1,560,110,424</b>

### **3.5.3. Análisis financiero**

Con el análisis financiero de la producción de estireno, se pretende conocer en cuanto tiempo se recupera la inversión inicial del proyecto, y cuanto se gana por año de producción de la venta de los productos obtenidos.

Realizando una tabla de amortización de la inversión, costos y ganancias por un periodo de 20 años, que permita determinar la viabilidad económica del proyecto la cual es mostrada de manera discriminada para cada paquete termodinámico (Henao, 2006).

**Tabla 36. Tabla de amortización para la producción de estireno con Peng Robinson como paquete termodinámico**

Cálculo de los flujos de caja, flujos de caja descontados, VNP y TIR para una planta de producción de Estireno												
(n)	V <sub>(n)</sub>	COT <sub>d(n)</sub>	C <sub>Dep(n)</sub>	C <sub>Imp(n)</sub>	ICF <sub>(n)</sub>	S <sub>(n)</sub> =0.1(ICF <sub>L</sub> )	L <sub>(n)</sub>	WC <sub>Req(n)</sub>	WC <sub>Rec(n)</sub>	FC <sub>(n)</sub>	FC <sub>(n),(1+i)<sup>n</sup></sub>	FC <sub>(n),(1+TIR)<sup>n</sup></sub>
0					\$ 399,621					\$ (399,621)	\$ (399,621)	\$ (399,621)
1					\$5,886,069					\$ (5,886,069)	\$ (4,562,844)	\$ (0)
2					\$3,924,046			\$1,962,023		\$ (5,886,069)	\$ (3,537,089)	\$ (0)
3	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)						\$ (1,394,025,646)	\$ (649,384,073)	\$ (0)
4	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)						\$ (1,394,025,646)	\$ (503,398,506)	\$ (0)
5	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)						\$ (1,394,025,646)	\$ (390,231,400)	\$ (0)
6	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)						\$ (1,394,025,646)	\$ (302,504,961)	\$ (0)
7	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)						\$ (1,394,025,646)	\$ (234,499,970)	\$ (0)
8	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)						\$ (1,394,025,646)	\$ (181,782,922)	\$ (0)
9	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)						\$ (1,394,025,646)	\$ (140,916,994)	\$ (0)
10	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)						\$ (1,394,025,646)	\$ (109,237,980)	\$ (0)
11	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)						\$ (1,394,025,646)	\$ (84,680,605)	\$ (0)
12	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)		\$981,012	\$ 399,621		\$1,962,023	\$ (1,390,682,990)	\$ (65,486,476)	\$ (0)
13	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)		\$981,012	\$5,886,069		\$ -	\$ (1,387,158,565)	\$ (50,636,056)	\$ (0)
14	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)		\$981,012	\$3,924,046		\$ -	\$ (1,389,120,588)	\$ (39,308,277)	\$ (0)
15	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)		\$981,012	\$ -		\$ -	\$ (1,393,044,634)	\$ (30,557,610)	\$ (0)
16	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)		\$981,012	\$ -		\$ -	\$ (1,393,044,634)	\$ (23,688,069)	\$ (0)
17	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)		\$981,012	\$ -		\$ -	\$ (1,393,044,634)	\$ (18,362,845)	\$ (0)
18	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)		\$981,012	\$ -		\$ -	\$ (1,393,044,634)	\$ (14,234,763)	\$ (0)
19	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)		\$981,012	\$ -		\$ -	\$ (1,393,044,634)	\$ (11,034,700)	\$ (0)
20	\$962,640,149	\$ 3,107,770,402	\$ 882,910	\$ (751,104,607)		\$981,012	\$ -		\$ -	\$ (1,393,044,634)	\$ (8,554,031)	\$ (0)
										<b>VPN</b>	\$ (2,866,999,791)	\$ (399,621)

Tasa de impuestos TI	35%
Tasa de descuento "i"	29%
Tasa Interna de retorno TIR	9848905329%

**Tabla 37. Tabla de amortización para la producción de estireno con Non Random Two Liquids como paquete termodinámico**

Cálculo de los flujos de caja, flujos de caja descontados, VNP y TIR para una planta de producción de Estireno												
(n)	V <sub>(n)</sub>	COT <sub>d(n)</sub>	C <sub>Dep(n)</sub>	C <sub>Imp(n)</sub>	ICF <sub>(n)</sub>	S <sub>(n)</sub> =0.1(ICF <sub>L</sub> )	L <sub>(n)</sub>	WC <sub>Req(n)</sub>	WC <sub>Rec(n)</sub>	FC <sub>(n)</sub>	FC <sub>(n),(1+i)<sup>-n</sup></sub>	FC <sub>(n),(1+TIR)<sup>-n</sup></sub>
0					\$ 378,800					\$ (378,800)	\$ (378,800)	\$ (378,800)
1					\$5,711,509					\$ (5,711,509)	\$ (4,427,526)	\$ (0)
2					\$3,807,673			\$1,903,836		\$ (5,711,509)	\$ (3,432,191)	\$ (0)
3	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)						\$ (275,473,944)	\$ (128,325,036)	\$ (0)
4	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)						\$ (275,473,944)	\$ (99,476,772)	\$ (0)
5	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)						\$ (275,473,944)	\$ (77,113,777)	\$ (0)
6	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)						\$ (275,473,944)	\$ (59,778,122)	\$ (0)
7	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)						\$ (275,473,944)	\$ (46,339,629)	\$ (0)
8	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)						\$ (275,473,944)	\$ (35,922,193)	\$ (0)
9	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)						\$ (275,473,944)	\$ (27,846,661)	\$ (0)
10	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)						\$ (275,473,944)	\$ (21,586,559)	\$ (0)
11	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)						\$ (275,473,944)	\$ (16,733,767)	\$ (0)
12	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)		\$ 951,918	\$ 378,800	\$1,903,836		\$ (272,239,389)	\$ (12,819,599)	\$ (0)
13	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)		\$ 951,918	\$5,711,509	\$ -		\$ (268,810,516)	\$ (9,812,508)	\$ (0)
14	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)		\$ 951,918	\$3,807,673	\$ -		\$ (270,714,353)	\$ (7,660,469)	\$ (0)
15	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)		\$ 951,918	\$ -	\$ -		\$ (274,522,025)	\$ (6,021,872)	\$ (0)
16	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)		\$ 951,918	\$ -	\$ -		\$ (274,522,025)	\$ (4,668,118)	\$ (0)
17	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)		\$ 951,918	\$ -	\$ -		\$ (274,522,025)	\$ (3,618,696)	\$ (0)
18	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)		\$ 951,918	\$ -	\$ -		\$ (274,522,025)	\$ (2,805,191)	\$ (0)
19	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)		\$ 951,918	\$ -	\$ -		\$ (274,522,025)	\$ (2,174,567)	\$ (0)
20	\$1,517,114,874	\$ 1,941,382,256	\$ 856,726	\$ (148,793,438)		\$ 951,918	\$ -	\$ -		\$ (274,522,025)	\$ (1,685,710)	\$ (0)
										<b>VPN</b>	\$ (572,627,765)	\$ (378,800)

Tasa de impuestos TI	35%
Tasa de descuento "i"	29%
Tasa Interna de retorno TIR	5368709130%

**Tabla 38. Tabla de amortización para la producción de estireno con Peng Robinson-Soave como paquete termodinámico**

Cálculo de los flujos de caja, flujos de caja descontados, VNP y TIR para una planta de producción de Estireno												
(n)	V <sub>(n)</sub>	COT <sub>d(n)</sub>	C <sub>Dep(n)</sub>	C <sub>Imp(n)</sub>	ICF <sub>(n)</sub>	S <sub>(n)</sub> =0.1(ICF <sub>L</sub> )	L <sub>(n)</sub>	WC <sub>Req(n)</sub>	WC <sub>Rec(n)</sub>	FC <sub>(n)</sub>	FC <sub>(n),(1+i)<sup>-n</sup></sub>	FC <sub>(n),(1+TIR)<sup>-n</sup></sub>
0					\$ 367,556					\$ (367,556)	\$ (367,556)	\$ (367,556)
1					\$5,485,736					\$ (5,485,736)	\$ (4,252,509)	\$ (0)
2					\$3,657,157			\$1,828,579		\$ (5,485,736)	\$ (3,296,518)	\$ (0)
3	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)						\$ (3,410,267,242)	\$ (1,588,617,281)	\$ (0)
4	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)						\$ (3,410,267,242)	\$ (1,231,486,264)	\$ (0)
5	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)						\$ (3,410,267,242)	\$ (954,640,515)	\$ (0)
6	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)						\$ (3,410,267,242)	\$ (740,031,407)	\$ (0)
7	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)						\$ (3,410,267,242)	\$ (573,667,757)	\$ (0)
8	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)						\$ (3,410,267,242)	\$ (444,703,688)	\$ (0)
9	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)						\$ (3,410,267,242)	\$ (344,731,541)	\$ (0)
10	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)						\$ (3,410,267,242)	\$ (267,233,753)	\$ (0)
11	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)						\$ (3,410,267,242)	\$ (207,157,948)	\$ (0)
12	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)		\$914,289	\$ 367,556	\$1,828,579		\$ (3,407,156,817)	\$ (160,441,088)	\$ (0)
13	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)		\$914,289	\$5,485,736	\$ -		\$ (3,403,867,216)	\$ (124,252,855)	\$ (0)
14	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)		\$914,289	\$3,657,157	\$ -		\$ (3,405,695,795)	\$ (96,371,786)	\$ (0)
15	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)		\$914,289	\$ -	\$ -		\$ (3,409,352,952)	\$ (74,787,034)	\$ (0)
16	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)		\$914,289	\$ -	\$ -		\$ (3,409,352,952)	\$ (57,974,445)	\$ (0)
17	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)		\$914,289	\$ -	\$ -		\$ (3,409,352,952)	\$ (44,941,430)	\$ (0)
18	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)		\$914,289	\$ -	\$ -		\$ (3,409,352,952)	\$ (34,838,318)	\$ (0)
19	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)		\$914,289	\$ -	\$ -		\$ (3,409,352,952)	\$ (27,006,448)	\$ (0)
20	\$1,560,110,424	\$ 6,807,118,490	\$ 822,860	\$ (1,836,740,824)		\$914,289	\$ -	\$ -		\$ (3,409,352,952)	\$ (20,935,231)	\$ (0)
<b>VPN</b>											\$ (7,001,735,371)	\$ (367,556)

Tasa de impuestos TI	35%
Tasa de descuento "i"	29%
Tasa Interna de retorno TIR	9848905329%

### 3.6. Análisis y discusión

La reacción principal para la producción del estireno es endotérmica, reduciendo la temperatura de entrada (649.45°C) a la mitad (329°C a 332°C) dependiendo del paquete termodinámico utilizado, como lo muestra la tabla 23.

El proceso de producción del estireno es totalmente compatible con los paquetes termodinámicos empleados, es por ello que todos los resultados son muy similares entre sí, tal y como se puede ver en la tabla 22 y 23.

En la tabla 22 se observa que la reacción número 1 es la principal, siendo esta la que produce estireno, alcanzando una conversión de 80.48% con PR, 80.25% con PRSV y 80.23% con NRTL; seguida por la reacción número 3 la cual produce metano y tolueno, alcanzando una conversión de 17.75% con PR, 17.51 con NRTL, y 17.49% con PRSV; notando que el mismo paquete termodinámico no posee el mayor porcentaje de conversión de las tres reacciones, sino que se encuentra repartido así, PR tiene el mayor porcentaje de conversión de las reacciones 1 y 3, y NRTL tiene la mayor conversión de la reacción número 2, mientras que PRSV presenta los porcentajes de conversión menores de las tres reacciones.

La literatura reporta para la reacción principal de la producción de estireno un 64% de conversión, pero con PR se alcanzó la mayor conversión de los tres paquetes termodinámicos estudiados con un valor de 80.48%, pudiéndose determinar una conversión mayor en la simulación que la reportada en la literatura para los tres paquetes termodinámicos estudiados, tal y como lo muestra la tabla 22.

La fracción molar del estireno dependiendo del paquete termodinámico utilizado se muestra en la gráfica 5, donde se aprecia que en la corriente número 4 a la entrada del reactor no existe presencia de estireno en ningún paquete termodinámico, pero en la corriente número 5 a la salida del reactor se encuentra que todos los paquetes termodinámicos teniendo conversión diferente de la reacción número 1 como se muestra en la tabla 22, presentan similar composición molar del estireno, donde PR obtiene 0.444781, NRTL 0.444617 y PRSV 0.444875 de composición molar. Aunque las composiciones solo se diferencian en el cuarto decimal, se puede anotar que la mayor composición la obtuvo el paquete termodinámico PRSV, seguido de PR y por último NRTL.

Para producir el estireno el etilbenceno se deshidrogena en un PFR empacado con un catalizador compuesto, en el cual pueden apreciar en la gráfica 4, al igual que lo ocurrido en la gráfica de producción del estireno, el etilbenceno en

la corriente 5 a la salida del reactor su composición cae abruptamente para todos los paquetes termodinámicos de forma similar donde, con PR se presentó el menor mayor hasta los 0.009023, seguido del NRTL con 0.011803 y por último esta PRSV con 0.011848. Esta fracción molar restante del etilbenceno sin reaccionar es separada de los productos obtenidos para recircularlo nuevamente al proceso, donde para todos los paquetes termodinámicos este es separado en la corriente número 9-EB por medio de una torre de destilación que entrega una fracción molar de 0.3860 para PR, 0.9518 para el NRTL y 0.9784 para el PRSV.

Los costos de capital para la producción de estireno con el paquete termodinámico de PR se muestran en la tabla 30 con un valor de \$9.80.115, y los costos para operar la planta durante un año ascienden a \$3.107.710.402 (tabla 33), de los cuales la mitad son por el tratamiento de residuos industriales con un valor de \$1.580.551.216; donde para compensar estos gastos tenemos el precio de venta de los productos obtenidos por año por la suma de \$962.640.149, siendo demasiado bajos para compensarlos generando desde la implementación un déficit de \$2.145.130.253, lo que hace imposible mantener la producción de estireno con este paquete termodinámico como lo muestra la tabla 36.

Para la producción de estireno con el paquete termodinámico de NRTL se necesita realizar una inversión inicial de \$9.519.182 como costos de capital (tabla 31), para operarla año a año se necesita \$1.941.382.256 como costos de operación (tabla 34), donde se gana \$1.517.114.874 por concepto de venta de productos obtenidos; pero como el valor de los costos de operación es mayor que el costo de venta de los productos obtenidos se tiene un déficit de \$424.267.381 por año de producción, lo que hace que el proyecto no sea económicamente viable como lo muestra la tabla 37.

La producción de estireno con el paquete termodinámico de PRSV necesita una inversión de \$9.142.893 detallada en los costos de capital de la tabla 32, pero para operar la planta por un año se necesita la suma de \$6.807.118.490 especificado en la tabla 35, donde el costo de tratamiento de residuos industriales juega un papel importante debido a que este absorbe la mitad del total de estos costos con un valor de \$3.642.086.772, y a su vez el costo de los servicios industriales absorbe otro cuarto de ese valor global con la suma de \$1.297.972.064, obteniendo una suma alta que necesita ser superada por la venta de los productos obtenidos lo cual no sucede, ya que este valor solo alcanza la suma de \$1.560.110.424, generando un proceso no viable económicamente “hablando” como lo muestra la tabla 38.

El proceso de producción de estireno genera metano como producto secundario, el cual “podría ser consumido” en la planta en algunos intercambiadores de calor, lo que genera una disminución en el costo de operación de esta, ya que no se tendría que pagar \$68.802.217 por concepto de metano sino \$23.583.408 con el paquete termodinámico de PR, con NRTL se puede reducir de \$82.565.766 a \$23.375.680, y con PRSV la disminución va de \$607.736.487 a \$563.346.056.

Aunque el proceso de producción del estireno haya sido producido bajo las mismas condiciones de entrada los tres paquetes termodinámicos utilizados (PR, NRTL y PRSV), necesitan costos de operación diferente siendo la simulación con PRSV el más costoso por año con un valor de \$6.807.118.490, seguido de PR con un valor de \$3.107.770.402 y por último se encuentra NRTL con un valor de \$1.941.382.256.

## 4. Conclusiones y recomendaciones

### 4.1. Conclusiones

- El mejor paquete termodinámico para simular formaldehído de acuerdo con los resultados obtenidos es NRTL con una fracción molar de 0.206 y un flujo másico de formaldehído de 17990.461 Kg/h.
- El mejor paquete termodinámico para separar el formaldehído del metanol no reaccionante es PRSV con una fracción molar de 0.998 y un flujo másico de 2488.832 Kg/h.
- La producción de formaldehído simulado con los paquetes termodinámicos de PR, NRTL y PRSV no es económicamente viable, debido a que los costos de operación son más altos de lo que se puede recuperar con la venta de los productos obtenidos.
- El precio de venta de los productos obtenidos debe venderse a la composición obtenida para que sea rentable o diluirlos en agua para venderlos en concentraciones comerciales y tener un aumento de producto disponible para la venta.
- En la producción del estireno con el paquete termodinámico PRSV presenta las conversiones más bajas de las tres reacciones.
- Simulación del proceso de estireno con el paquete termodinámico de NRTL es el que más estireno produce con un flujo molar de 392.5260 kmol/h, seguido por el PR con un flujo molar de 392.2289 kmol/h y por último se encuentra el PRSV con un flujo molar de 388.8435 kmol/h.
- La simulación actual del proceso de producción de estireno por medio de la deshidrogenación del etilbenceno con ninguno de los tres paquetes termodinámicos actuales (PR, NRTL, y PRSV) no es económicamente viable debido a que el costo de operación por año supera al precio de venta de los productos obtenidos.
- En la producción de estireno con el paquete termodinámico de PRSV tiene los costos operativos más altos, seguido por PR y por último se encuentra NRTL.
- El mejor paquete termodinámico para simular el proceso productivo del estireno es NRTL, ya que tiene los costos de operación más bajos, y la más alta producción de estireno.
- La simulación de formaldehído con el paquete termodinámico de NRTL tiene la conversión más alta con un 53.73%; y la reportada en la literatura presenta un 86% de conversión, pero no pueden compararse debido a que son realizados en reactores y condiciones iniciales diferentes.

- La simulación del proceso de producción del estireno tiene una conversión del 80.48% con PR como paquete termodinámico, siendo esta la más alta de los tres paquetes termodinámicos estudiados; y la reportada en la literatura alcanza un 64% de conversión, sin embargo no son comparables debido a que son simuladas en reactores y condiciones iniciales diferentes.

#### **4.2.Recomendaciones**

- Debe realizarse una integración energética en la simulación de procesos que permita aprovechar el calor entre corrientes, disminuyendo el uso de servicios industriales y por lo tanto los costos de estos.
- Encontrar una presión o temperatura óptima para el reactor que permita incrementar la conversión en este con los tres paquetes termodinámicos y los dos procesos estudiados, analizando cuál de las dos variables es más económica para disminuir a su vez los costos de capital y operación.
- Analizar los precios de venta de los productos obtenidos, conveniente con la pureza encontrada o con la cantidad comercial a la que pueda ser convertida esta pureza al diluirlos.
- Utilizar los productos secundarios obtenidos como el metano y el agua, del proceso de producción del estireno y formaldehído respectivamente, como materias primas en los servicios industriales para obtener una reducción de los costos operativos de cada proceso.

## 5. Bibliografía

**Aristizábal Adriana** Introducción a las prácticas de diseño de procesos // Clases de Hysys. - Medellín : Universidad Pontificia Bolivariana, 2007. - pp. 1-28.

**Aspen technology Inc** Aspen tech, 2012. - Octubre 9, 2012. - <http://www.aspentech.com/products/aspen-hysys.aspx>.

**Aspen Technology Inc** Aspen Tech, 2012. - Octubre 7, 2012. - <http://www.aspentech.com/products/aspen-plus.aspx>.

**Barragán Aroche José Fernando and Bazúa Rueda Enrique** Herramientas para la enseñanza de la termodinámica en ingeniería química // Ciencia y tecnología. - Mexico : [s.n.], 2004. - 2 : Vol. 19. - pp. 83-91.

**Chemstation Inc** Chemstations, 2012. - Octubre 10, 2012. - [http://www.chemstations.com/About\\_Us/](http://www.chemstations.com/About_Us/).

**Consejo colombiano de seguridad; Ministerio de ambiente, vivienda y desarrollo territorial** Guías para el manejo seguro y gestión ambiental de 25 sustancias químicas. - Bogotá : [s.n.], 2003.

**Dauber Florian and Span Roland** Achieving higher accuracies for process simulations by implementing the new reference equation for natural gases // Computers and chemical engineering. - Germany : [s.n.], 2012. - 37. - pp. 15-21.

**Dimitratos Yiannis, Smith Julie F. and Cox Robert K.** Can simulation technology enable a paradigm shift in process control? Modeling for the rest of us // Computers & chemical engineering. - 2006. - 30. - pp. 1542-1552.

**Dortmund data bank software & separation technology** EOS mixing rule parameters. - Oldenburg : [s.n.], 2009.

**Elnashaie [et al.]** On the link between intrinsic catalytic reactions kinetics and the development of catalytic processes catalytic dehydrogenation of ethylbenzene to styrene// Catalysis today. - [s.l.] : Elsevier, 2001. - 64. - pp. 151-162.

**EPM** epm, 2013. - 10 1, 2013. - [https://www.epm.com.co/site/Portals/2/documentos/tarifas/2013/tarifas\\_aguas\\_octubre\\_2013.pdf](https://www.epm.com.co/site/Portals/2/documentos/tarifas/2013/tarifas_aguas_octubre_2013.pdf).

**Gani R, Ruíz C A and Cameron I T** A generalized model for distillation columns-I: Model, description and applications // Computers & Chemical Engineering. - Great Britain : Pergamon Journals Ltd, 1986. - 3 : Vol. 10. - pp. 181-198.

**Gani Rafiqul and O`Connell John P** A knowledge based system for the selection of thermodynamic models // Computers chemical engineering. - Great Britain : Pergamon press plc, 1989. - 4/5 : Vol. 13. - pp. 397-404.

**Geankoplis Christie** Procesos de transporte y operaciones unitarias. - Mexico : Continental, 1998. - Tercera.

**Henao Carlos** Simulación y evaluación de procesos químicos. - Medellín : Universidad Pontificia Bolivariana, 2006.

**Henao Carlos** Síntesis y optimización de procesos químicos. - Medellín : Universidad Pontificia Bolivariana, 2006.

**Huang Hai** A new mixing rule for the Patel-Teja equation of state. Study of vapor-liquid equilibria // Fluid phase equilibria. - Amsterdam : Elsevier science publishers, 1990. - 58. - pp. 93-115.

**Huapaya Sánchez Alejandro** Curso de termodinámica para ingeniería química II. - Lima : Universidad Nacional de Ingenierías, 2009.

**International Programme on Chemical Safety** Fichas internacionales de seguridad química. - España : [s.n.], 2006.

**Jiménez Gutiérrez Arturo** Diseño de procesos en la ingeniería química. - Mexico : Reverté S.A, 2003.

**Kakac Sadik and Liu Hongtan** Heat exchangers. Selection, rating and thermal design. - Miami : CRC Press, 2002. - Segunda.

**Lam Chiou Peng** A model-centric approach for the management of model evolution in chemical process modelling // Computers and chemical engineering. - 2007. - 31. - pp. 1633-1662.

**Luyben William** Principles and case studies of simultaneous design. - U.S.A : John Wiley & sons, 2010.

**Markos J [et al.]** Design and simulation of a distillation column for separation of dichloropropane from a multicomponent mixture // Chemical engineering and processing. - 2003. - 42. - pp. 273-284.

**Øi Lars Erik** Comparison of Aspen HYSYS and Aspen Plus simulation of CO<sub>2</sub> absorption into MEA from atmospheric gas // Energy procedia. - 2012. - 23. - pp. 360-369.

**Raissi Ali and Huang Cunping** Analysis of sulfur–iodine thermochemical cycle for solar hydrogen production. Part I: decomposition of sulfuric acid // Solar energy. - [s.l.] : Associate Editor S.A., 2005. - 78. - pp. 632-646.

**Reed business information limited** ICIS. - Reed business information limited, 2013. - Octubre 1, 2013. - <http://www.icis.com/chemicals/channel-info-chemicals-a-z/>.

**Sandoval Reynaldo and Bazúa Enrique** Reglas de mezclado para ecuaciones cúbicas // Ciencia y tecnología. - Mexico : [s.n.], 1991. - 2 : Vol. 7. - pp. 39-44.

**Santacesaria Elio and Morbidelli Massimo** Kinetics of the catalytic oxidation of methanol to formaldehyde // Chemical engineering. - Italia : Pergamon Press, 1981. - 5 : Vol. 36. - pp. 909-918.

**Smejkal Q.** Comparison of computer simulation of reactive distillation using ASPEN PLUS and HYSYS software // Chemical engineering and processing. - 2002. - 41. - pp. 413-418.

**Smith J.M, Van Ness H.C and Abott M.M** Introducción a la termodinamica en ingeniería química. - [s.l.] : Mc Graw Hill, 1996. - Quinta : pp. 59-129.

**Speight James** Chemical process and design handbook. - New York : Mc Graw Hill, 2002.

**Turton Richard [et al.]** Analysis, synthesis and design of chemical processes. - [s.l.] : Prentice hall, 2009. - Tercera.

**Valderrama J O, López C and Arce P F** Regla de mezclas en ecuaciones de estado aplicadas a mezclas que contienen un fluido supercrítico // Información tecnológica. - 2000. - 2 : Vol. 11. - pp. 59-64.

**Vasconcelos C.J.G and Wolf-Maciel M.R.** Dynamic and control of high purity heterogeneous azeotropic distillation process // European symposium on computer aided process engineering. - [s.l.] : S. Pierucci, 2000. - pp. 217-222.

**Walas Stanley** Chemical process equipment. Selection and design. - USA : Butterworth-Heinemann, 1990.

## **6. Anexos**

### **HOJAS DE ESPECIFICACIÓN DE EQUIPOS UTILIZADOS EN EL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL FORMALDEHÍDO Y ESTIRENO**

- Intercambiador de calor (Walas, 1990)
- Reactor PFR (Walas, 1990)
- Compresor (Walas, 1990)
- Horno (Walas, 1990)
- Tanque (Walas, 1990)
- Torre de destilación (Walas, 1990)