

**DISEÑO CONCEPTUAL DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO
PERACÉTICO A PARTIR DE PERÓXIDO DE HIDRÓGENO Y ÁCIDO ACÉTICO**

**JULIO HERNANDO PIEDRAHITA H.
DAVID ESTEBAN SUÁREZ S.**

**UNIVERSIDAD EAFIT
ESCUELA DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA DE PROCESOS
MEDELLÍN**

2009

**DISEÑO CONCEPTUAL DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO
PERACÉTICO A PARTIR DE PERÓXIDO DE HIDRÓGENO Y ÁCIDO ACÉTICO**

**JULIO HERNANDO PIEDRAHITA H.
DAVID ESTEBAN SUÁREZ S.**

**Trabajo de grado para optar por el título de
Ingeniero de Procesos**

Asesor: ANDRÉS FELIPE ORTEGA M.

**UNIVERSIDAD EAFIT
ESCUELA DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA DE PROCESOS
MEDELLÍN**

2009

Nota de Aceptación

Jurado

Jurado

Jurado

*A nuestros padres,
a quienes les debemos y agradecemos todo
y quienes día a día nos enseñan el valor
de lograr todo con esfuerzo.*

*A nuestros hermanos,
por apoyarnos siempre sin condición*

*"...la búsqueda honesta del conocimiento
a menudo requiere permanecer en la ignorancia
durante un periodo indefinido"
Erwin Schrödinger*

AGRADECIMIENTOS

A Andrés Felipe Ortega por sus oportunos comentarios y orientaciones.

Al personal de los laboratorios de de Ingeniería de Procesos de la Universidad EAFIT, en especial a Jhon Jairo Estrada y Edgar Arbeláez por su colaboración y disposición durante el desarrollo del proyecto.

A los profesores Guillermo Palacio, Carlos Correa, Marcela Mora, Kevin Molina, Diego Acosta, Jorge Devia y todos los demás que nos brindaron sus asesorías y nos ayudaron a construir nuestro conocimiento.

A todas las demás personas y amigos que en algún momento nos brindaron su apoyo y han estado con nosotros incondicionalmente.

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	177
OBJETIVOS	188
OBJETIVO GENERAL	188
OBJETIVOS ESPECÍFICOS	18
1. MARCO TEÓRICO	19
1.1 GENERALIDADES	19
1.2 USOS	20
1.3 ANTECEDENTES	21
1.3.1 Proceso 1: A partir de Acetaldehído	21
1.3.2 Proceso 2: A partir de Peróxido de Hidrógeno y Ácido Acético.	21
1.3.3 Proceso 3: Síntesis Electrolítica.	22
1.4 PRODUCTOS UTILIZADOS ACTUALMENTE EN LA DESINFECCIÓN Y SANITIZACIÓN A NIVEL INDUSTRIAL	23
1.4.1 Compuestos Clorados.	23
1.4.2 Compuestos Yodados.	23
1.4.3 Glutaraldehído.	244
1.4.4 Timsen.	244
1.4.5 Compuestos de amonio cuaternario.	25
2. SELECCIÓN DE LA RUTA QUÍMICA	277

3. SELECCIÓN DE MATERIAS PRIMAS PARA LA OBTENCIÓN DE ÁCIDO PERACÉTICO.....	28
3.1 ÁCIDO ACÉTICO GLACIAL	28
3.2 ÁCIDO SULFÚRICO	29
3.3 PERÓXIDO DE HIDRÓGENO	30
3.4 HIDRÓXIDO DE SODIO	31
3.5 AGUA	33
4. SELECCIÓN DE VARIABLES PARA EL DISEÑO DE EXPERIMENTOS	35
4.1 TIEMPO DE REACCIÓN	35
4.2 TEMPERATURA Y PORCENTAJE DE CATALIZADOR	35
4.3 RELACIÓN MOLAR	36
5. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO EXPERIMENTAL	38
6. DISEÑO DE EXPERIMENTOS	41
7. ANÁLISIS DE RESULTADOS	43
7.1 TEMPERATURA Y PORCENTAJE DE CATALIZADOR	46
7.2 RELACIÓN MOLAR	46
7.3 TIEMPO DE REACCIÓN	47
8. AJUSTE DEL MODELO	48
9. DETERMINACIÓN DE LA LEY CINÉTICA	52
10. DISEÑO CONCEPTUAL DEL PROCESO	56
10.1 DIAGRAMAS DE PROCESO	56
10.1.1 Diagrama general de entradas y salidas	56

10.1.2 Diagrama de bloques	56
10.1.3 Diagrama general de bloques	57
10.1.4 Diagrama de flujo de procesos.	57
10.1.5 Plot plant y restricciones para el layout.	57
10.2 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO	58
10.3 SIMULACIÓN DEL PROCESO	61
10.3.1 Receta del proceso	61
10.3.2 Diagrama de Gantt.....	62
10.4 SELECCIÓN DE EQUIPOS	63
10.4.1 Tanques.....	64
10.4.2 Bombas.	65
10.4.3 Reactor.	66
10.4.4 Tanque de dilución.	67
10.4.5 Fuente y sumidero de calor.	67
10.5 DISEÑO DE EQUIPOS	68
10.5.1 Reactor Batch	68
10.5.2 Bombas	683
10.5.3 Tanques de Proceso	74
10.5.4 Caldera	74
10.5.5 Torre de enfriamiento.	75
11. EVALUACION DEL PROCESO	76
11.1 EVALUACIÓN AMBIENTAL	76

11.2 EVALUACIÓN DE SEGURIDAD	77
11.2.1 Riesgos a la salud.	77
11.2.2 Seguridad industrial.	77
11.3 CONTROLES DE CALIDAD	78
12. EVALUACION ECONÓMICA DEL PROYECTO	79
12.1 INVERSIÓN DE CAPITAL	79
12.1.1 Costos directos de capital.	79
12.1.2 Costos indirectos de capital.	81
12.2 CAPITAL DE TRABAJO	82
12.3 COSTOS DE MANUFACTURA	82
12.3.1 Costo Directos de Producción.	84
12.3.2 Costo fijo de manufactura.	84
12.3.3 Gastos generales.	84
12.4 ESTIMACIÓN FLUJO DE EFECTIVO	84
CONCLUSIONES	87
RECOMENDACIONES	89
BIBLIOGRAFÍA	90
ANEXOS.....	94

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Comparación entre algunos desinfectantes	26
Tabla 2. Ficha técnica del ácido acético glacial	28
Tabla 3. Ficha técnica del ácido sulfúrico	29
Tabla 4. Ficha técnica del peróxido de hidrógeno	30
Tabla 5. Ficha técnica del hidróxido de sodio	32
Tabla 6. Reporte de Calidad del Agua en Medellín	33
Tabla 7. Ficha técnica del agua	34
Tabla 8. Efecto de la relación molar en la producción de ácido peracético	37
Tabla 9. Tabla de codificación	41
Tabla 10. Matriz de experimentos	42
Tabla 11. Plan de experimentación Diseño Factorial de 2^4	42
Tabla 12. Modelo inicial del diseño de experimentos	43
Tabla 13. Efecto de relación molar en el porcentaje de ácido peracético	47
Tabla 14. Efecto del tiempo de reacción en la variable respuesta	47
Tabla 15. Estimación de los coeficientes de regresión del modelo ajustado	48
Tabla 16. Variación de la concentración en el tiempo	49
Tabla 17. Determinación del equilibrio químico.....	50

Tabla 18. Datos experimentales y determinación de la concentración del ácido peracético en el tiempo	53
Tabla 19. Estabilidad del producto en el tiempo	55
Tabla 20. Receta del proceso	61
Tabla 21. Tabla estequiométrica	69
Tabla 22. Capacidad Calorífica	70
Tabla 23. Características de las bombas	74
Tabla 24. Costo y proveedores de equipos	80
Tabla 25. Costos Directos.....	81
Tabla 26. Costos Indirectos.....	82
Tabla 27. Costos directos de producción.....	83
Tabla 28. Costo fijo de manufactura	84
Tabla 29. Gastos generales.....	84
Tabla 30. Flujo de efectivo del proyecto a 5 años.....	85
Tabla 31. Valor presente neto y tasa de descuento calculados	86

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Síntesis Electrolítica de Ácido Peracético	22
Figura 2. Concentración en el tiempo del ácido peracético a diferentes temperaturas y porcentajes de catalizador	36
Figura 3. Montaje realizado para la producción de PAA	38
Figura 4. Proceso de titulación	39
Figura 5. Diagrama de Pareto de los factores y sus interacciones	44
Figura 6. Distribución normal de los efectos	45
Figura 7. Efectos principales	45
Figura 8. Interacción de los factores	46
Figura 9. Distribución normal del modelo ajustado	48
Figura 10. Diagrama de Cubos	49
Figura 11. Variación de la concentración en el tiempo	50
Figura 12. Concentración en el Equilibrio	51
Figura 13. Cinética química	54
Figura 14. Diagrama de entradas y salidas	56
Figura 15. Diagrama genérico de bloques GBFD	56
Figura 16. Diagrama de bloques de proceso BFD	57
Figura 17. Layout planta de producción de ácido peracético	58

Figura 18. Diagrama de Flujo de proceso PFD	60
Figura 19. Diagrama de Gantt	62
Figura 20. Perfil de conversión	71
Figura 21. Perfil de concentración de peróxido de hidrógeno	71
Figura 22. Perfil de concentración de ácido acético	72
Figura 23. Perfil de concentración de ácido peracético	72
Figura 24. Remoción de calor del sistema	73

LISTA DE ANEXOS

	pág.
Anexo 1. Hoja de especificación de tanques de proceso	21
Anexo 2. Hoja de especificación del reactor.....	35
Anexo 3. Hojas de especificación de las bombas.....	37
Anexo 4. Hoja de especificación de la caldera	38
Anexo 5. Hoja de especificación de la torre de enfriamiento	43

RESUMEN

El desarrollo de procesos para obtener desinfectantes se ha convertido en un tema de investigación frecuente, con el fin de disminuir su impacto ambiental y asegurar la calidad de los procesos. Este proyecto se basa en el análisis de alternativas, equipos y metodologías para diseñar conceptualmente un proceso que permita obtener ácido peracético, a partir de peróxido de hidrógeno y ácido acético, ya que es un compuesto que ha venido ganando terreno en el mercado mundial de desinfectantes por sus buenas propiedades y su biodegradabilidad.

En este proyecto se tienen en consideración diferentes variables, las cuales permiten determinar las mejores condiciones para la producción de ácido peracético a escala comercial. Para encontrar la relevancia de variables como la temperatura, el tiempo de reacción, la relación molar de reactivos y el porcentaje de catalizador (ácido sulfúrico), se utiliza un diseño de experimentos factorial, midiendo el porcentaje de producto obtenido. La conversión obtenida experimentalmente es de 63% al cabo de 120 minutos de reacción con 3% de catalizador.

Una vez determinadas las condiciones adecuadas, se procede a diseñar el proceso. Inicialmente se definen tiempos de cada etapa y se realiza una simulación utilizando el software Aspen Batch Plus® con el fin de analizar el comportamiento teórico del proceso. Luego de analizar los resultados se procede con la selección y el diseño de los equipos adecuados para obtener el ácido peracético al 15%, concentración utilizada comercialmente.

Finalmente se realiza una evaluación económica del proyecto para determinar la factibilidad de desarrollarlo en Colombia. El resultado es una rentabilidad atractiva del proyecto de la manera como se diseñó.

ABSTRACT

The development of processes for disinfectant has become a frequent topic of research in order to reduce their environmental impact and ensure the quality of the process. This project is based on the analysis of alternatives, equipment and methodologies for conceptual design process to obtain peracetic acid, from hydrogen peroxide and acetic acid, compound that has been gaining ground in the global market for disinfectants for its good properties and biodegradability.

This project will take into account different variables, which help to determine the best conditions for the production of peracetic acid on a commercial scale. To find the relevance of variables such as temperature, reaction time, the molar proportion of reagents and catalyst percent (sulfuric acid), using a factorial design of experiments, measuring the percentage of product obtained. The conversion obtained experimentally is 63% after 120 minutes of reaction with 3% catalyst.

Once the proper conditions are determined, the process is designed. Initially is defined the times for each stage and the process is performed using the simulation software Aspen Batch Plus®, in order to analyze the theoretical behavior of the process. After analyzing the results, is the selection and design of suitable equipment for 15% peracetic acid, used commercially.

Finally there is a financial assessment of the project to determine the feasibility of developing the project in Colombia. The result is an attractive profitability of the project the way it was designed.

INTRODUCCIÓN

Con la creciente tendencia mundial de búsqueda de productos que sean amigables con el medio ambiente, han venido ganando terreno algunos compuestos, que a pesar de llevar largo tiempo en el mercado, no eran muy difundidos debido a su costo de compra más elevado con relación a otros que a la larga son más contaminantes. Este concepto ha sido reevaluado ya que con el aumento de las exigencias para el tratamiento de desperdicios y reducción de emisiones, las empresas tienen que pagar hoy un costo adicional y con un impacto ambiental más alto.

Por eso, compuestos como el ácido peracético y el timsen, que tienen excelentes propiedades desinfectantes y que además son biodegradables, han visto incrementado su uso y producción alrededor del mundo, sobretodo en países donde la conciencia ambiental y los costos de contaminar son altos. Su costo de compra es más elevado que el de los desinfectantes comunes, pero tiene mayores ventajas de uso.

Aunque ninguno de estos dos compuestos genera contaminación en los procesos en los que son usados, el ácido peracético no requiere enjuague después de su uso, lo que supone un ahorro adicional al que se produce por el hecho de no contaminar. Sin embargo, en Colombia aún es necesario aprender mucho sobre conciencia ambiental para que su uso se difunda masivamente como ha sucedido en otras partes del mundo y pueda ser una alternativa real de producción limpia.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Determinar la factibilidad técnica y económica para producir a escala industrial ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido acético.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar las variables que afectan el proceso por medio de ensayos preliminares en el laboratorio, para cumplir los requisitos exigidos por el mercado.
- Definir los parámetros con ayuda de un diseño de experimentos para diseñar el proceso de producción de ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido acético.
- Diseñar el proceso de producción de ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido acético basándose en la literatura y en los ensayos previamente realizados.
- Evaluar el proceso y el producto obtenidos para establecer los controles de proceso, calidad, seguridad y manipulación adecuados.
- Evaluar la factibilidad técnica y económica del proceso mediante el cálculo de índices de evaluación financiera como el valor presente neto (VPN), la tasa interna de retorno (TIR) y el periodo de retorno de la inversión (PBP).

1. MARCO TEÓRICO

1.1 GENERALIDADES

Un peróxido orgánico es un compuesto a base de carbono, que contiene una unión oxígeno-oxígeno (O-O). Dentro de los múltiples tipos se encuentran los peroxiácidos que a su vez están divididos en dos clases, los peroxicarboxílicos y los organoperoxisulfónicos. Los primeros son compuestos a base de peróxido de hidrógeno y un ácido carboxílico mientras que los segundos, de ácido sulfónico. [1]

Los ácidos peroxicarboxílicos tienen un amplio rango de aplicaciones en la industria, debido a su alto poder de oxidación. Los de cadena corta ($<C_6$) son infinitamente solubles en agua y los de cadena larga ($>C_6$) son menos solubles en agua y ambos son solubles en varios solventes orgánicos. Además de ello son explosivos en su estado puro o a altas concentraciones, por lo que comercialmente no se encuentran en éste estado. [2]

La estabilidad de los ácidos peroxicarboxílicos aumenta con el peso molecular y depende directamente de la temperatura y del pH de la solución acuosa en que se encuentre. El pK_a de los peroxicarboxílicos es 3 o 4 unidades menor que el del ácido carboxílico precursor. [1,2]

Los ácidos peroxicarboxílicos se pueden obtener por diversos métodos: a partir de un ácido carboxílico y peróxido de hidrógeno, de un anhídrido carboxílico y peróxido de hidrógeno, de ácidos carboxílicos clorados y peróxido de hidrógeno y por la auto oxidación de aldehídos. El primero de ellos es el más utilizado en la industria debido a que su obtención es simple y directa, produciendo una mezcla en equilibrio que depende de la relación molar de las materias primas y la concentración del peróxido de hidrógeno. [2]

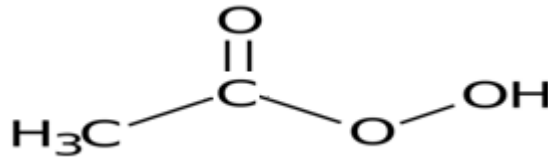
Uno de los principales peroxiácidos es el ácido peracético, formado a partir de peróxido de hidrógeno y ácido acético; conocido por sus excelentes propiedades oxidantes, por su amplio rango de uso contra microorganismos y por las propiedades anteriormente mencionadas. Debido a esto, ha sido aceptado a nivel mundial en las industrias de procesamiento de alimentos y bebidas para los

sistemas de *clean-in-place* y certificado por la agencia de protección ambiental norteamericana (EPA) para el tratamiento de aguas residuales. [1,3]

El ácido peracético o peroxiacético (C₂H₄O₃) no existe comercialmente como producto puro. Lo que se conoce en el mercado con este nombre son mezclas en equilibrio que contienen ácido peracético, ácido acético, peróxido de hidrógeno, agua, ácido sulfúrico (catalizador de la reacción usualmente empleado) y un agente estabilizante usado para aumentar su vida útil y reducir la descomposición inducida por la temperatura y por la presencia de iones metálicos entre los que se encuentran los de hierro, cobre, níquel, cobalto, zinc, cromo y manganeso (contaminantes). [4,5]

El Ácido Peracético tiene la apariencia y el olor del Ácido Acético. Su forma molecular es CH₃COOOH. Es un compuesto orgánico soluble en agua, el cual se disocia en iones de Peróxido de Hidrógeno y Ácido Acético. [1,2]

La estructura molecular del Ácido Peracético se observa a continuación:



1.2 USOS

El Ácido Peracético se emplea en diversos tipos de industrias como la textil, química, farmacéutica, de alimentos, entre otras y, según su aplicación, su porcentaje en peso varía, se usan concentraciones del 40% en el blanqueamiento de textiles, papeles, aceites, ceras y almidones; como oxidante en síntesis orgánica y como desinfectante y sanitizante en la industria alimenticia entre el 5 y 15%. En concentraciones altas (>40%) es altamente reactivo, tiene un punto de inflamación bajo (40.5°C) y es explosivo cuando se calienta a 110°C por lo que debe almacenarse en lugares secos, refrigerados y con buena ventilación. [1,6]

El Ácido peracético se utiliza principalmente en la industria alimenticia, donde se aplica como limpiador y desinfectante. Desde principios de 1950, se ha estado aplicando el ácido peracético para la eliminación de bacterias y hongos en verduras y hortalizas. Es comúnmente utilizado en la desinfección en plantas de

envasado y en superficies en general, en el tratamiento de aguas residuales y lodos debido a su amplio espectro de acción, a su poder oxidante y a que es ecológicamente seguro por su fácil descomposición en compuestos inocuos y fácilmente biodegradables. También es empleado en el blanqueamiento de pulpas en la industria papelera. [1,2,4,7]

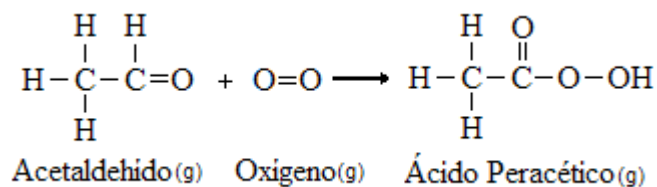
En los últimos años el ácido peracético ha tenido un rápido auge como agente desinfectante en el campo de la salud, es efectivo en la esterilización de habitaciones, equipamiento, hemodializadores, instrumental medico, material quirúrgico y dental. [8]

Además se usa para la producción de epóxidos, glicerol sintético, resinas epóxicas, detergentes. [1,2,7]

1.3 ANTECEDENTES

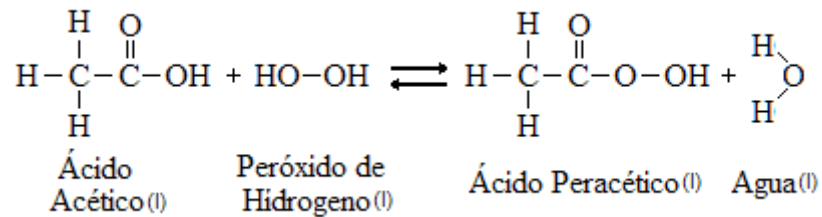
En la actualidad existen varios procesos para la obtención del ácido peracético. A continuación se analizan las diferentes rutas químicas con el fin de encontrar las condiciones que mejor se adapten a este proyecto.

1.3.1 Proceso 1: A partir de Acetaldehído. Consiste en obtener el Ácido Peracético como producto intermedio del proceso de producción del ácido acético a partir del acetaldehído. El ácido peracético se obtiene paralelamente por adición de O₂ al radical acetilo que sustrae hidrógeno del acetaldehído. Para que se de esta oxidación se debe realizar en condiciones suaves y en fase gaseosa, preferiblemente sin catalizador y en un disolvente, como por ejemplo, el acetato de etilo con unas condiciones de temperatura bajas (15 – 40°C) y de presiones altas (25-40 Bares). [9]



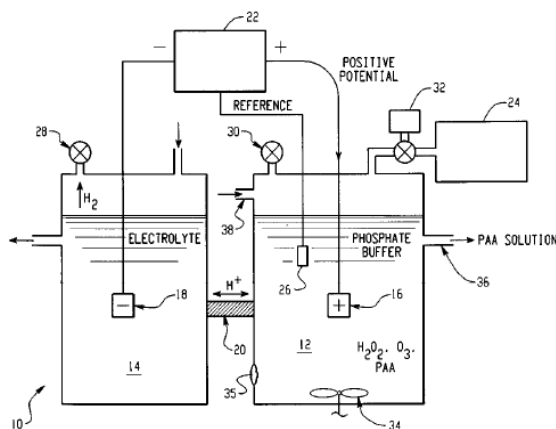
1.3.2 Proceso 2: A partir de peróxido de hidrógeno y ácido acético. En este proceso el ácido peracético se produce mediante la reacción de peróxido de hidrógeno con ácido acético. El ácido peracético se obtiene como una mezcla de

reactivos y productos debido a la naturaleza de la reacción (equilibrio químico) en la cual no se alcanzan a consumir los reactivos en su totalidad. Debido a su inestabilidad es necesaria la neutralización del catalizador para estabilizar el producto y prolongar la vida útil, adicionando hidróxido de sodio, etilfosfonato, tetraetilenfosfonato, ácido 1-Hidroxietilén-1,1-difosfónico y/o una sal de sodio del ácido dipicolínico. [10]



1.3.3 Proceso 3: Síntesis Electrolítica. Este método consiste en suministrar un gas que contenga oxígeno a un cátodo de una unidad de electrólisis y hacer reaccionar el oxígeno presente en el gas para formar especies de peróxido en un electrolito en el cátodo. Luego se hace reaccionar las especies de peróxido con un precursor de ácido peracético para formar el ácido. En este proceso se obtiene una mezcla que esta compuesta por ozono, ácido peracético y peróxido de hidrógeno. Este proceso es muy utilizado en clínicas y centros hospitalarios en la desinfección y esterilización de material quirúrgico, estas entidades cuentan con un equipo de electrólisis el cual se encarga de producir lo que necesita (*On-Demand*) para tratar el material contaminado. [11]

Figura 1. Síntesis Electrolítica de Ácido Peracético



Fuente: Malchesky, 1998.

1.4 PRODUCTOS UTILIZADOS ACTUALMENTE EN LA DESINFECCIÓN Y SANITIZACIÓN A NIVEL INDUSTRIAL

La desinfección y sanitización se refieren a la reducción de los organismos patógenos (que ocasionan enfermedades) en un 99.99% y a un nivel seguro para la salud humana respectivamente. Al reducir la carga de éstos, disminuyen los riesgos de enfermedad y contaminación de todo tipo de material o equipo. La acción mortal de los desinfectantes para diversos organismos patógenos (virus, bacterias, hongos, protozoos) depende de la composición química del desinfectante y de la naturaleza del organismo. A continuación se analizan algunas familias de productos que son utilizados actualmente, con el fin de tener una idea del mercado potencial del ácido peracético y de sus ventajas y desventajas.

1.4.1 Compuestos Clorados. El cloro, es el desinfectante de mayor uso en la industria de alimentos. Los compuestos clorados más comunes son cloro líquido, hipocloritos, cloraminas inorgánicas y orgánicas. Los compuestos clorados tienen un amplio espectro como germicidas, actúan sobre las membranas celulares, inhiben las enzimas que intervienen en el metabolismo de la glucosa, teniendo un efecto letal sobre el ADN y oxida las proteínas celulares. El cloro tiene actividad a baja temperatura, es relativamente barato y deja un mínimo de residuos en la superficie donde es aplicado. La actividad del cloro se ve muy afectada por factores como pH, temperatura y carga orgánica. Por otro lado, este se ve menos afectado por la dureza del agua, comparado con otros sanitizantes, como el caso de los amonios cuaternarios. La mayor desventaja de los compuestos clorados, es su alta corrosividad en muchos metales, especialmente a altas temperaturas. Se ha venido cuestionando su uso debido que al descomponerse en presencia de materia orgánica forma compuesto organoclorados altamente cancerígenos. Desde el punto de vista de manejo y salud pública, puede provocar irritación de piel y mucosas. [1,5,12]

1.4.2 Compuestos Yodados. El uso del yodo como agente antimicrobiano data desde el siglo XIX. Este sanitizante existe en muchas formas, pero su forma más usada es mezclado con un surfactante, éstos toman el nombre de compuestos yodóforos. El agente más activo entre los yodóforos es el yodo libre, el cual se disocia del surfactante en forma controlada. Los yodóforos destruyen los microorganismos por la vía química, no por la acción biológica. El yodo destruye las bacterias a través de mecanismos óxido-reductores, siendo esta bastante rápida. El yodo ejerce su acción antimicrobiana debido a sus características como oxidante, que modifican grupos funcionales de proteínas y ácidos nucleicos.

Inactiva proteínas y enzimas por oxidación de los grupos *-SH a S-S*. El yodo actúa disminuyendo los requerimientos de oxígeno de los microorganismos aeróbicos, interfiriendo a nivel de la cadena respiratoria por bloqueo de transporte de electrones a través de reacciones electrofílicas con enzimas. Los Yodóforos, al igual que los clorados, tienen un gran espectro de acción, siendo activos contra bacterias, virus, levaduras, esporas, hongos y protozoos. Desde el punto de vista de salud presenta irritabilidad y tinción de la superficie en que se aplique. En soluciones acuosas son inestables. [5,12]

1.4.3 Glutaraldehído. Es un agente químico que se utiliza como sustancia esterilizante y como desinfectante de alto nivel. La solución madre es ácida (pH 2.5) y en este estado en general sus propiedades microbicidas son menores. Para tener propiedad desinfectante de alto nivel la solución debe ser activada (alcalinizada) mediante el uso de agentes que eleven el pH de la solución a 7.5 - 8.5. En este estado la solución alcanza el máximo de su capacidad microbicida pero se hace inestable debido a la polimerización de las moléculas que bloquean los grupos aldehídos responsables de su actividad microbicida. Las formulaciones convencionales de glutaraldehído tienen una duración aproximada de 14 días. Existen formulaciones nuevas en las que se han agregado agentes estabilizantes para prolongar la vida útil a alrededor de 28 días. Por su alto grado de toxicidad no se recomienda su uso en superficies y en condiciones ácidas no es efectivo. [5,12]

1.4.4 Timsen. Es un compuesto a base de *Cloruro de n–alquil dimetil – bencil amonio* con elevada actividad microbicida y amplio espectro de acción sobre todo tipo de bacterias, virus y algas. Es utilizado en las industrias de avicultura, porcicultura, ganadería, lechera, empacadoras y acuicultura. La solución de Timsen entra en contacto con los microorganismos, causando la anulación de las cargas negativas existentes a su alrededor y provocando: apertura incontrolada de los poros citoplasmáticos, pérdida de elementos esenciales (Nitrógeno, Fósforo), ingreso de las cadenas de carbono del radical alquilo. Los efectos anteriores causan la destrucción de la membrana y del núcleo celular, asegurando la total eliminación del microorganismo, sin posibilidad de crear resistencia al producto. Este compuesto es altamente estable y está sustancialmente desprovisto de olor con ligero sabor amargo. Las soluciones preparadas son incoloras, reteniendo el sabor el cual no es transmitido a los alimentos y productos que entren en contacto con ellas. El Timsen reduce la tensión superficial de las soluciones en las que se utiliza, lo cual brinda una penetración y una excelente acción germicida. Es incompatible con compuestos aniónicos como el cloro y yodo los cuales deben ser enjuagados antes o después de su uso. En cualquier caso debe enjuagarse. [5,12,13]

1.4.5 Compuestos de amonio cuaternario. Este conjunto de compuestos (conocidos como "QUATS") representan una familia de compuestos antimicrobianos en los cuales las cuatro valencias del átomo de nitrógeno están ocupadas por grupos tipo alquilo de complejidad variable. Son solubles en agua y en alcohol y poseen propiedades tensoactivas. Los compuestos de amonio cuaternario actúan a nivel de la superficie celular, incrementando la permeabilidad de la membrana con la consecuente pérdida de los componentes citoplasmáticos. El espectro de actividad de estos productos es bastante elevado frente a bacterias y hongos, pero escaso frente a virus y esporas. Existen microorganismos, como pseudomonas, que en algunos amonios cuaternarios encuentran un medio de cultivo en el que se multiplican perfectamente. Esta bacteria puede crecer, por ejemplo, en cloruro de benzalconio que, utilizado como desinfectante de superficies, ha sido la causa de inesperadas infecciones en hospitales. Los compuestos de amonio cuaternario son inactivos frente a las aguas duras, por lo que no deben utilizarse para desinfectar el agua de los sifones de vaciado, rica en sales. [5,12]

En la tabla 1 se puede observar una comparación cualitativa y cuantitativa entre las principales características de los productos anteriormente descritos y el ácido peracético. En ella se puede ver claramente que el ácido peracético es más corrosivo que los otros compuestos, lo que inicialmente podría parecer una desventaja, pero si se analiza más detalladamente, las cantidades de ácido peracético necesarias para una buena desinfección o sanitización son muy pequeñas, por lo que el riesgo de corrosión se reduce y produce un ahorro en cantidad de producto. También cabe resaltar el hecho que el ácido peracético, aunque su valor es mayor que el de los otros compuestos, no forma espuma y no necesita enjuague después de su uso, por lo que se genera un ahorro adicional en cantidad de agua. Es importante resaltar también que hasta el momento no se conoce ningún microorganismo que sea resistente a la acción del ácido peracético, contrario a los demás desinfectantes que si los tienen.

Tabla 1. Comparación entre algunos desinfectantes

Característica	Ácido Peracético	Clorados	Yodóforos	Glutaraldehído	Timsen	Amonio Cuaternario
Corrosividad	Moderadamente Corrosivo	Corrosivo	Moderadamente corrosivo	Moderadamente Corrosivo	No	No
Irritación de la piel	Media	Irritante	Media	Irritante	No	No
Efectividad a pH neutro	Si	Si	Si	Si	Si	No
Efectividad a pH ácido	Si	Si, pero inestable	Si	Si	Si	Si
Alcalino	Si	Si, pero menos que a pH neutro	Si	Si	Si	Si
Afectado por materia orgánica	Parcialmente	Si	Moderadamente	Parcialmente	No	Parcialmente
Afectado por la dureza del agua	Ligeramente	No	Ligeramente	No	No, hasta 500 ppm CaCO ₃	Algunos
Actividad microbiana residual	Moderada	Ninguna	Moderada	Baja	Moderada	Moderada
Costo	Medio	Bajo	Alto	Bajo	Medio	Medio
Incompatibilidad	Agentes reductores, iones metálicos, álcalis fuertes	Soluciones acidas, fenoles y aminas	Detergentes altamente alcalinos	Álcalis	Sustancias Aniónicas, jabones, aceites y alcoholes.	Agentes humectantes aniónicos, jabones
Estabilidad de la solución	Se pierde lentamente	Se pierde rápidamente	Se pierde lentamente	Se pierde lentamente	Alta	Estable
Concentración máxima permitida (FDA) sin enjuagar	100-200 ppm	200 ppm	25 ppm	50 ppm	2000 ppm	25 ppm
Sensibilidad a la temperatura del agua	Ninguna	Ninguna	Alta	Media	Baja	Ninguna
Nivel de Espuma	Ninguna	Ninguna	Baja	Media	Sin Datos	Alta
Biodegradabilidad	Alta	Baja	Baja	Media	Alta	Baja

Fuente: Elaboración propia

2. SELECCIÓN DE LA RUTA QUÍMICA

La producción de ácido peracético a partir de acetaldehído es un proceso en el que la reacción ocurre en fase gaseosa a altas temperaturas y presiones (grandes demandas energéticas), además requiere procesos tanto de acondicionamiento de materias primas como de purificación del producto para evitar impurezas. El producto obtenido es concentrado, lo cual no solo es poco comercial, sino altamente peligroso. [9]

El proceso de obtención por medio de la electrólisis es más apropiado para la producción a pequeña escala e *in situ*, ya que consta de todo un equipo que a la vez que produce ácido peracético, lo recircula para mantener su rango de acción. Este proceso no se utiliza a escala industrial por su complejidad, alto costo y bajo rendimiento. [8,11]

Por lo anteriormente descrito, se elige producir el ácido peracético por medio de la reacción entre el peróxido de hidrógeno y ácido acético ya que es el más económico y presenta buena disponibilidad de materias primas y materiales para los equipos.

3. SELECCIÓN DE MATERIAS PRIMAS PARA LA OBTENCIÓN DE ÁCIDO PERACÉTICO

3.1 ÁCIDO ACÉTICO GLACIAL

El ácido acético es un líquido higroscópico, que solidifica a 16.6 °C, incoloro y de olor fuerte (a vinagre). Es soluble en agua, etanol, éter, glicerina, acetona, benceno, y tetracloruro de carbono; insoluble en sulfuro de carbono. Se obtiene por carbonilación del metanol, oxidación del acetaldehído y etileno. El ácido acético sintético se utiliza en la fabricación de acetatos, en la industria textil y del cuero, en minería, como reactivo de flotación, en la formulación de herbicidas y en la industria farmacéutica. Se habla de sintético ya que su producción por el método de fermentación no alcanza concentraciones altas. [1,2,14]

En el proceso de obtención del ácido peracético se utiliza ácido acético glacial (99%w) por su disponibilidad comercial y por la necesidad de evitar el mayor número de impurezas posibles para evitar la descomposición del producto. En la Tabla 2. Se muestran las propiedades del ácido acético glacial.

Tabla 2. Ficha técnica del ácido acético glacial

1. Identificación del producto

Nombre del Producto: Acido Acético 99%

Otras designaciones: Acido etanóico, ácido etílico, ácido vinagre.

Usos: En la industria alimenticia como acidulante y conservador.



2.- Composición o Ingredientes

Nombre químico: Acido Acético

Formula química: CH₃COOH

Peso molecular: 60.05

Numero CAS: 64-19-7

Contenido: Se presenta bajo con contenido mínimo 99%P/P, siendo el resto mayormente agua.

3.- Manipulación y Almacenamiento

Manipulación: Sin indicaciones particulares.

Almacenamiento: Recipientes bien cerrados. En local bien ventilado. Temperatura ambiente. No almacenar en recipientes metálicos.

4.- Propiedades físicas y químicas

Aspecto y olor: Líquido claro incoloro con olor pungente y característico

Presión de vapor: 11mmHg a 20°C

Punto de ebullición: 80°C a 220mmHg

Punto de fusión: 16.6°C

Densidad (20/4): 1.045

Solubilidad en agua: Soluble, libera calor y vapores irritantes.

5.- Estabilidad y reactividad

Estabilidad: Al contacto con el agua libera vapores importantes. Es estable a temperatura ambiente. Mantener por encima de la temperatura de fusión.

Incompatibilidades: Algunos plásticos, gomas y recubrimientos. Acetaldehído, hidróxido de sodio y de potasio, permanganato de potasio, ácido nítrico, entre otros.

6.- Información de transporte

Nombre para transporte: Acido acético glacial

Riesgo principal: 8

Número UN: 2789

Rótulo: Corrosivo

Grupo de envase: II

Número de riesgo: 83

Fuente: Panreac

3.2 ÁCIDO SULFÚRICO

El ácido sulfúrico es el compuesto químico de mayor producción en el mundo, una gran parte se emplea en la obtención de fertilizantes. También se usa para la síntesis de otros ácidos y sulfatos y en la industria petroquímica. Generalmente se obtiene a partir del óxido de azufre (IV), industrialmente tiene una pureza del 98% y es un líquido transparente, higroscópico, muy denso y viscoso. [1,2,15]

En el proceso de obtención del ácido peracético es utilizado como catalizador y es de vital importancia que tenga un alto grado de pureza debido a que la presencia de iones metálicos acelera la descomposición del producto. En la Tabla 3. Se muestran las propiedades del ácido sulfúrico.

Tabla 3. Ficha técnica del ácido sulfúrico

1. Identificación del producto

Nombre del Producto: Acido Sulfúrico 98%

Otras designaciones: Vitriolo, aceite de vitriolo

Usos: Para laboratorios, análisis, investigación y química fina



2.- Composición o Ingredientes

Nombre químico: Acido Sulfúrico

Formula química: H₂SO₄

Peso molecular: 98.08

Numero CAS: 7664-93-9

Contenido: Se presenta bajo con contenido mínimo 98%P/P, siendo el resto mayormente agua

3.- Manipulación y Almacenamiento

Manipulación: Sin indicaciones particulares.

Almacenamiento: Recipientes bien cerrados. En local bien ventilado. Temperatura ambiente. No almacenar en recipientes metálicos.

4.- Propiedades físicas y químicas

Aspecto y olor: Líquido transparente e incoloro con olor característico

Presión de vapor: 1.333E-3 a 20°C

Punto de ebullición: 330°C

Punto de fusión: -15°C

Densidad (20°C): 1.84

Solubilidad en agua: Miscible

PH: Fuertemente ácido

5.- Estabilidad y reactividad

Estabilidad: Estable.

Causas de inestabilidad: Metales y calor.

Peligros de inestabilidad: Emite gases tóxicos de anhídrido sulfúrico y sulfuroso.

Polimerización: No aplicable.

Incompatibilidades: Metales, reductores, álcalis, productos orgánicos.

Descomposición: Cuando se calienta desprende anhídrido sulfúrico, si la temperatura es superior a 450°C, se descompone a anhídrido sulfuroso. En contacto con metales desprende hidrógeno.

6.- Información de transporte

N° ONU: 1830

Clase de riesgo: Corrosivo

IM/IMDG: Clase 8

IMDG: 8/II UN 1830 –IMDG: 8230

Etiqueta IMO: Corrosivo

ADR/RID: Clase 8, grupo de embalaje: II, etiqueta 8. Nombre ADR 2003: UN 1830

Acido Sulfúrico con más del 51% de ácido.

Grupo embalaje: II

Etiqueta ADR (Cisterna): Panel naranja numerado : 80/1830

Etiqueta N°8 : Corrosivo

N° CEFICTEC – TREMCARD : No hay datos disponibles.

Fuente: Panreac

3.3 PERÓXIDO DE HIDRÓGENO

El peróxido de hidrógeno es un líquido claro, sin color y ligeramente viscoso. Es un poco más denso que el agua pero miscible con el agua en todas proporciones. El peróxido de hidrógeno se descompone de forma exotérmica al agua y al oxígeno sin residuos tóxicos. En la industria, el peróxido de hidrógeno se usa para blanquear telas y pasta de papel, y al 90% como componente de combustibles para cohetes y para fabricar espuma de caucho y sustancias químicas orgánicas. A escala industrial es obtenido a partir de la oxidación del isopropanol, el proceso de la antraquinona y la oxidación electroquímica del ácido sulfúrico o del sulfato amónico. [1,2,16]

Para este caso en particular se trabaja con concentraciones del 50% debido a que es la concentración más alta con mayor disponibilidad comercial ya que concentraciones superiores se producen sólo por las mismas empresas que lo consumen para usos muy específicos y su costo es muy elevado. En la Tabla 4 se muestran las propiedades del peróxido de hidrógeno.

Tabla 4. Ficha técnica del peróxido de hidrógeno

1. Identificación del producto

Nombre del Producto: Peróxido de hidrógeno al 50%

Otras designaciones: Agua oxigenada

Usos: Para la industria cosmética, textil y farmacéutica.



2.- Composición o Ingredientes

Nombre químico: Peróxido de Hidrógeno

Formula química: H₂O₂

Peso molecular: 34,0147

Numero CAS: 7722-84-1

Contenido: Se presenta con un contenido mínimo 50%P/P, siendo el resto mayormente agua.

3.- Manipulación y Almacenamiento

Nunca regresar peróxido de hidrógeno al contenedor original. Los tambores vacíos deben ser lavados con abundante agua antes de ser cargados. Los utensilios usados para manejar peróxido deben ser de materiales compatibles como el vidrio, acero inoxidable, aluminio o plástico. El almacenamiento debe ser conforme a las condiciones descritas en el código NFPA 432-2002 (Código para el almacenamiento de formulaciones de Peróxidos)

NFPA Clase de Riesgo Oxidante II

4.- Propiedades físicas y químicas

Aspecto y olor: Líquido transparente e incoloro con olor característico.

Presión de vapor: 18.3 mmHg a 30°C

Punto de ebullición: 114°C

Punto de fusión: NA

Densidad: 1.2 gr/cm³

Solubilidad en agua: Miscible

PH: Fuertemente ácido

5.- Estabilidad y reactividad

Estabilidad: Inestable.

Causas de inestabilidad: Metales pesados, agentes reductores, polvo, materiales orgánicos, pH arriba de 4.

Polimerización: No aplicable.

Incompatibilidades: Hierro y metales pesados, Hierro galvanizado, cobre, madera, papel, material orgánico y otros combustibles.

Descomposición: Ninguna

Condiciones a evitar: Calor excesivo, contaminación de cualquier tipo. No debe colocarse en un contenedor cerrado.

6.- Información de transporte

Clasificación DOT: Oxidante

Etiqueta DOT: Oxidante

Marca DOT: Solución de peróxido de hidrógeno (35-50%)

Cartel DOT: Oxidante

Número UN: 2014

Número 49 STCC: 4918766

Fuente: Panreac

3.4 HIDRÓXIDO DE SODIO

Es un sólido blanco, higroscópico, que corroe la piel y se disuelve en el agua liberando una gran cantidad de calor. Generalmente se utiliza en forma sólida o en solución. El hidróxido de sodio es uno de los principales compuestos químicos utilizados en la industria. El hidróxido de sodio o soda cáustica tiene muchas aplicaciones en la industria química, principalmente en forma de lejía (desinfectante) de sosa₁, que se prepara por disolución en agua de la soda sólida. Como aplicaciones principales están la industria de algodón, seda artificial, plásticos, textiles, jabón y en la fabricación de diversos productos químicos. Se obtiene por varios métodos como el tratamiento de carbonato de sodio con cal apagada y por electrolisis cloro-álcali. [1,2]

Para ese proceso se trabaja con una solución de hidróxido de sodio al 50%, que es la que comúnmente se consigue en el mercado nacional. La presentación en escamas es más difícil de manejar desde el punto de vista de seguridad industrial y no justifica incurrir en dicho riesgo, ya que la soda no es un componente importante en el costo del producto final (no justifica manejarla sólida, ya que

aunque es mas barata, tiene más riesgos). En la Tabla 5. Se muestran las propiedades del NaOH.

Tabla 5. Ficha técnica del hidróxido de sodio

1. Identificación del producto

Nombre del Producto: Hidróxido de sodio 50%

Otras designaciones: Soda cáustica, cáustico blanco, hidrato de sodio.

Usos: Principalmente como base química en la fabricación de papel, tejidos, y detergentes.



2.- Composición o Ingredientes

Nombre químico: hidróxido de sodio

Formula química: NaOH

Peso molecular: 40

Numero CAS: N/A

Contenido: Se presenta bajo con contenido 50%P/P, siendo el resto mayormente agua.

3.- Manipulación y Almacenamiento

Manipulación: Debido a la posibilidad de generación de hidrógeno inflamable y combustible por el contacto del hidróxido de sodio con algunos metales, debe prohibirse fumar en zonas de almacenamiento, manejo o procesamiento de sustancias. En las mismas zonas, deben revisarse las líneas de conducción eléctrica para garantizar ausencia de cortos que puedan ocasionar chispas y posteriores explosiones e incendio si existe hidrógeno presente producto de la reacción del hidróxido con algunos metales con los que entra en contacto.

Almacenamiento: En el almacenamiento, el hidróxido de sodio debe estar separado de ácidos fuertes, metales o alimentos. El área debe permanecer seca, con la menor humedad posible y el piso debe ser de concreto resistente a la corrosión.

4.- Propiedades físicas y químicas

Aspecto y olor: Líquido, incoloro a ligeramente turbio. Inodoro.

Gravedad Específica (Agua=1): 1.53 (Solución al 50%)

Punto de Ebullición (°C): 140 (solución 50%)

Punto de Fusión (°C): 12 (solución 50%)

Densidad relativa del vapor (Aire=1): N.R.

Presión de vapor (mm Hg): 13 / 60°C (Solución al 50%)

PH: 14.0 (soluciones al 10%, 30% y 50%).

Solubilidad: 100% en agua. Soluble en glicerol.

5.- Estabilidad y reactividad

Estable bajo las condiciones de manipulación y almacenamiento recomendadas (Numeral 3). En caso de incendio se pueden generar productos de descomposición peligrosos, tales como monóxido y dióxido de carbono, humos y óxidos de nitrógeno. Mantener alejado de agentes oxidantes y de materiales fuertemente alcalinos o ácidos, a fin de evitar reacciones exotérmicas.

6.- Información de transporte

Transporte terrestre

Nombre para transporte: Solución de hidróxido de sodio (Soda cáustica líquida, 50%.

Riesgo principal Clase: 8

Número de UN: 1824

Rótulo: Corrosivo

Grupo de envase: II y III

Fuente: Panreac

3.5 AGUA

El agua es un líquido incoloro, inodoro ni tiene sabor de origen natural, Su importancia reside en que casi la totalidad de los procesos químicos que suceden en la naturaleza, no solo en organismos vivos sino también en la superficie no organizada de la tierra, así como los que se llevan a cabo en laboratorios y en la industria. En la producción de ácido Peracético es utilizado como solvente para alcanzar las concentraciones deseadas. El suministro de está es la red de servicio público de las empresas públicas de Medellín, la cual cumple con las necesidades del proceso ya que aunque posee algunos iones metálicos indeseables para el proceso, su concentración no es muy considerable, como se puede observar en la tabla 6 (promedio inferior a 0.04ppm de hierro), y no justifica pasarla por un proceso de desionización, ya que aumentaría su costo considerablemente. Principalmente los iones de hierro y afectan la estabilidad del producto, pero no se encuentra reportado un límite máximo permisible. De todas maneras es necesario verificarlo a escala piloto. En la Tabla 6 y 7 se pueden observar las características y propiedades generales del agua. [17]

Tabla 6. Reporte de Calidad del Agua en Medellín

Parámetro Físicoquímico	Unidades	Número de muestras	Desviación estándar	Máximo	Mínimo	Promedio	Valor referencia (*)
Alcalinidad, como CaCO ₃	mg/l	21	12.70	48.5	10.0	27.6	Máx. 200
Cloro residual, Cl ₂	mg/l	380	0.20	1.70	0.40	0.81	Entre 0.3 y 2.0
Cloruros, Cl	mg/l	21	1.75	6.2	0.6	3.3	Máx. 250
Color	Pt-Co	282	2.49	15	< 2	3	Máx. 15
Conductividad	µmhos/cm	282	22.16	146	35	79	Máx. 1000
Dureza Total, CaCO ₃	mg/l	21	16.39	56.7	8.8	33.8	Máx. 300
Nitratos, NO ₃	mg/l	21	2.72	9.5	0.6	2.9	Máx. 10
Nitritos, NO ₂	mg/l	7	0	< 0.003	< 0.003	< 0.003	Máx. 0.1
Sulfatos, SO ₄	mg/l	21	5.15	23.1	2.2	11.6	Máx. 250
Temperatura	°C	272	1.22	22.7	16.4	19.2	Sin Referencia
Turbiedad	UNT	282	0.39	2.50	0.10	0.44	Máx. 2
pH	U	282	0.40	9.1	6.6	7.2	Entre 6.5 y 9.0

Parámetro Metales	Unidades	Número de muestras	Desviación estándar	Máximo	Mínimo	Promedio	Valor referencia (*)
Aluminio, Al	mg/l	22	0.07	0.2000	< 0.0040	0.0520	Máx. 0.2
Hierro, Fe	mg/l	21	0.03	0.0940	< 0.0170	0.0456	Máx. 0.3

Tabla 7. Ficha técnica del agua

1. Identificación del producto

Nombre del Producto: Agua

Otras designaciones: Óxido de hidrógeno, Hidróxido de hidrógeno, Hidrato, Ácido Hídrico, Monóxido de dihidrógeno, Óxido de dihidrógeno.

Usos: Para laboratorios, análisis, investigación y química fina.

2.- Composición o Ingredientes

Nombre químico: Agua

Formula química: H₂O

Peso molecular: 18.01528

Numero CAS: 7732-18-5

3.- Manipulación y Almacenamiento

Manipulación: Sin indicaciones particulares.

Almacenamiento: Sin indicaciones particulares.

4.- Propiedades físicas y químicas

Aspecto y olor: Líquido transparente e incoloro sin olor

Punto de ebullición: 100°C

Punto de fusión: 0°C

Densidad : 1.

PH: 7

5.- Estabilidad y reactividad

Estabilidad: Estable.

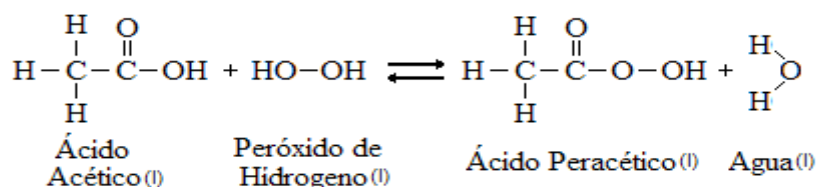
Causas de inestabilidad: No aplicable.

Peligros de inestabilidad: No aplicable

Polimerización: No aplicable.

4. SELECCIÓN DE VARIABLES PARA EL DISEÑO DE EXPERIMENTOS

Teniendo en cuenta la información encontrada en la literatura y los ensayos preliminares realizados se identificaron las posibles variables significativas en la obtención de ácido peracético como son el tiempo de reacción, la relación molar, el porcentaje de catalizador y la temperatura las cuales serán evaluadas posteriormente en el diseño de experimentos. La concentración de los reactivos es otra variable importante y fue analizada en la sección 3. Además, se encontró que variables como presión, tiempo de adición de reactivos y velocidad de agitación, no afectan significativamente la conversión a pequeña escala y su efecto debe determinarse a escala mayor.



$$-\Delta H_{RXN} = -11900 \text{ kJ/kmol}$$

4.1 TIEMPO DE REACCIÓN

Para el tiempo de reacción se establecieron los niveles 90 y 120 minutos, debido a que en los ensayos preliminares se determina que luego de 120 minutos, la cantidad de peracético presente en la mezcla no aumenta significativamente (se alcanzan conversiones del 98% de la conversión del equilibrio aproximadamente). Además, dicho tiempo es suficiente para evaluar el comportamiento general de la reacción y es adecuado para encontrar las relaciones de los demás factores que presenten un crecimiento más pronunciado y mayor conversión como se aprecia en la Gráfica 1. [10,18].

4.2 TEMPERATURA Y PORCENTAJE DE CATALIZADOR

Los niveles definidos para la temperatura son: 25°C (Temperatura ambiente) y 40 °C respectivamente. La temperatura afecta de forma significativa el tiempo de reacción que se requiere para obtener el producto con las características que se desean. Es importante que la temperatura no alcance valores por encima de los

60 °C ya que se puede presentar descomposición del peróxido de hidrógeno y la mezcla se puede volver inestable y explosiva. Los valores establecidos para el catalizador son de 0.7% en peso y 3% en peso del total de la mezcla reaccionante. Se quiere estudiar el efecto del catalizador, su interacción con las demás variables y si es estrictamente necesario mantener la reacción en el nivel más alto de temperatura con una relación alta de catalizador. [18,19]

En la Figura 2 se puede observar el efecto de estos dos factores en la reacción. [18]

Figura 2. Concentración en el tiempo del ácido peracético (PAA) a diferentes temperaturas y porcentajes de catalizador

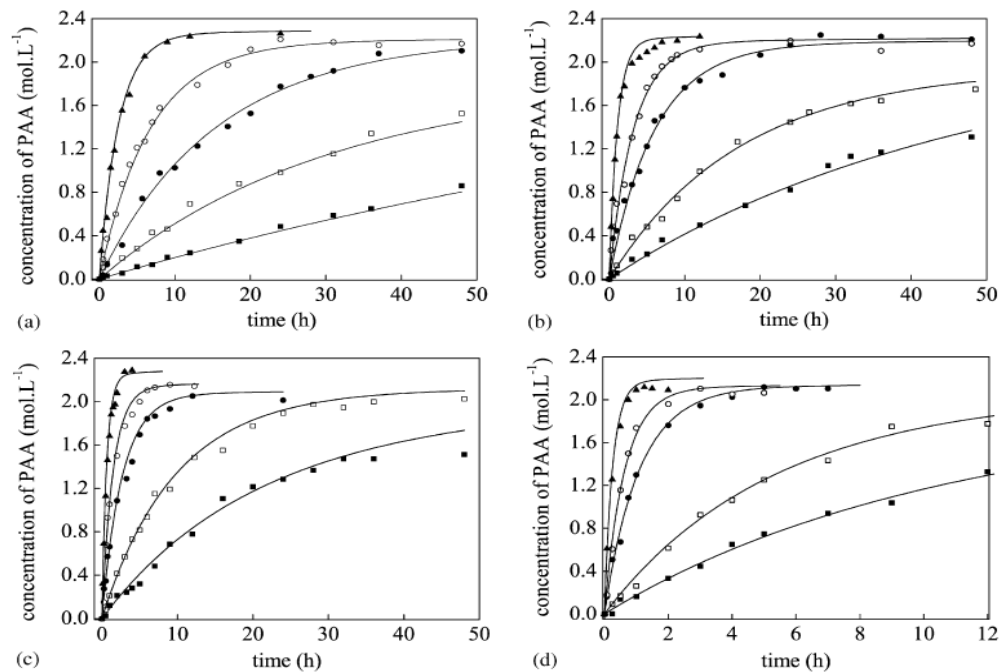


Fig. 1. Experimental and calculated concentrations of PAA at several temperatures with different charge of sulfuric acid as catalyst: (a) $T=293\text{ K}$; (b) $T=303\text{ K}$; (c) $T=313\text{ K}$; (d) $T=323\text{ K}$. (■) $0.00\text{ mol.L}^{-1}\text{ H}_2\text{SO}_4$; (□) $0.0125\text{ mol.L}^{-1}\text{ H}_2\text{SO}_4$; (●) $0.0626\text{ mol.L}^{-1}\text{ H}_2\text{SO}_4$; (○) $0.125\text{ mol.L}^{-1}\text{ H}_2\text{SO}_4$; (▲) $0.3125\text{ mol.L}^{-1}\text{ H}_2\text{SO}_4$; —calculated values.

Fuente: Zhou, 2007

4.3 RELACIÓN MOLAR

Para este factor se establecieron los niveles de 1 y de 2 en exceso de Peróxido de Hidrógeno, con base en los resultados encontrados en la literatura. Los ensayos preliminares mostraron que la relación molar no tenía un efecto apreciable en la variable respuesta (% peracético). En la Tabla 8 se observa que según éste estudio, el efecto de la relación molar en la producción de ácido peracético con

bajas cantidades de catalizador no es significativo. Sin embargo, se quiere estudiar el efecto que pueda tener debido a la interacción con los niveles de los demás factores.

Tabla 8. Efecto de la relación molar en la producción de ácido peracético

Molar Ratios and Yields of PAA at Equilibrium With Respect to HOAc at Unity (In 0.7% w/w catalyst)			Molar Ratios and Yields of PAA at Equilibrium With Respect to H ₂ O ₂ at Unity (0.7% catalyst)		
HOAc, mole	H ₂ O ₂ , mole	PAA, mole	HOAc, mole	H ₂ O ₂ , mole	PAA, mole
1.00	0.41	0.29	0.61	1.00	0.32
1.00	0.50	0.32	1.00	1.00	0.44
1.00	1.00	0.44	2.00	1.00	0.66
1.00	1.65	0.52	2.40	1.00	0.70

Fuente: Vineyard. Mark K. 2006

Por lo anterior se determina que las variables que se estudian en el diseño de experimentos son el tiempo de reacción, el porcentaje de catalizado en la mezcla, la temperatura y la relación molar. Los niveles escogidos se muestran más adelante, en la tabla 9 de la sección 6.

5. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO EXPERIMENTAL

Para la producción de Ácido Peracético los reactivos empleados son Ácido Acético 99% (Protokímica), Peróxido de Hidrógeno 50% (Protokímica) y Ácido Sulfúrico 98% (Protokímica) como catalizador. Para la titulación e identificación de las cantidades presentes de Peróxido de Hidrógeno remanente y Ácido Peracético producido se utiliza Sulfato Cérico 0.1N (Merck), Indicador Ferroin, Yoduro de Potasio y Tiosulfato de Sodio 0.1N (Merck) como se explica a continuación en el método analítico.

El ácido acético y el ácido sulfúrico se pesan en una balanza digital (OHAUS), se mezclan en un erlenmeyer de 250ml en las cantidades que indica cada ensayo (ver tabla 11, capítulo 6) y se someten a agitación magnética a 280 - 290 RPM durante cinco minutos, mientras se alcanzan las condiciones de temperatura adecuadas para cada ensayo (20°C o 40°C), sumergiendo el erlenmeyer en un beaker de 1000ml con agua para controlar la temperatura de reacción. El montaje anterior se pone sobre una plancha de agitación y calentamiento (CORNING, PC-420D) como se muestra en la Figura 3.

Figura 3. Montaje realizado para la producción de PAA



Luego de alcanzar la temperatura deseada se adiciona el peróxido de hidrógeno en relación molar de 1 o 2 con el ácido acético, según indique el diseño de

experimentos. Se pone un tapón de caucho para evitar que se escapen vapores y se purga el sistema periódicamente para evitar su presurización. Se deja reaccionar durante 120 minutos, midiendo constantemente la temperatura con un termómetro de mercurio (SILBER BRAND) para mantenerla en el valor inicial. Al cabo de 90 minutos, se toma una muestra del sistema reaccionante con una pipeta graduada de 10 ml, con el fin de titularla y medir la cantidad de peróxido de hidrógeno y ácido peracético presentes en el sistema. El mismo proceso se realiza al cabo de los 120 minutos.

MÉTODO ANALÍTICO

El método analítico empleado es descrito por Enviro Tech para la caracterización de soluciones que contienen ácido peracético y peróxido de hidrógeno. [20]

Se realiza un montaje en el cual se disponen dos buretas de 50 ml cada una en un soporte universal. Las buretas se llenan con Sulfato Cérico y Tiosulfato de Sodio respectivamente.

Figura 4. Proceso de titulación de ácido peracético



De la muestra obtenida anteriormente, se pesan 0.2 g en una balanza analítica (METTLER, AE-100) y se mezclan en un erlenmeyer con 50 ml de Ácido Sulfúrico 1N que previamente ha sido medido con una probeta y sometido a bajas temperaturas en un recipiente con hielo. Se agregan dos gotas de indicador Ferroin, lo que genera una coloración naranja a la mezcla como se observa en la Figura 4. Se adiciona sulfato cérico, agitando manualmente el erlenmeyer hasta que se cambie el color naranja por un azul ligero y permanezca. Se agrega aproximadamente 11.76 ml de sulfato cérico por cada 10% de peróxido de

hidrógeno presente en la mezcla. En promedio se utilizan 18.57 ml de sulfato cérico por ensayo.

Posteriormente se pesa 1 g de Yoduro de potasio en una balanza digital (OHAUS), se agrega a la muestra que esta siendo titulada y se agita hasta que se observa una coloración café oscura homogénea. Luego se empieza a agregar el tiosulfato de sodio hasta que dicha coloración desaparezca y forme nuevamente el naranja inicial como (mostrado en la figura 4). La cantidad de tiosulfato de sodio utilizado es aproximadamente 5.26 ml por cada 10% de ácido Peracético presente en la solución. En promedio, se utilizan 10.11 ml de tiosulfato de sodio por ensayo.

El experimento se llevó a cabo en Medellín, a condiciones de presión atmosférica (640mmHg). Los erlenmeyers y beakers empleados son de Borosilicato 3.3 de Schott-Duran y las pipetas, probetas y buretas Silber Brand.

6. DISEÑO DE EXPERIMENTOS

Para este proyecto se elige trabajar con un diseño de experimentos factorial, ya que se quieren encontrar tanto efectos individuales como interacciones entre diferentes niveles de los factores y porque permite obtener dicha información sin aumentar significativamente el tamaño del experimento (economía de materiales).

Se define un diseño factorial 2^4 , en el que se estudian 4 variables (las descritas en la sección anterior) en dos niveles cada una (16 experimentos en total). En este tipo de diseño se obtienen resultados significativos sin la necesidad de replicar cada experimento, con la inclusión de modelos, como el de Lenth, que permiten estimar el error estándar y determinar la importancia de cada variable. Además se puede estudiar un factor más que el diseño 2^3 con el mismo número de unidades experimentales y el mismo nivel de confianza. [21,22]

La variable respuesta es el porcentaje en peso de ácido peracético presente en la mezcla. También se midió la cantidad de peróxido de hidrógeno en la mezcla, que aunque no es una variable que afecte el rendimiento del proceso, es importante para la caracterización del producto. La cuantificación de esta variable se realiza por medio de una titulación selectiva. [20]

A continuación se muestra la tabla de codificación (tabla 9), matriz de experimentos (tabla 10), y el plan de experimentación (tabla 11).

Tabla 9. Tabla de codificación

DISEÑO DE EXPERIMENTOS FACTORIAL			
		-1	+1
A	Relación Molar Acético/Peroxido	1	2
B	% Catalizador/Reactivos	0,7	3
C	Temperatura (°C)	25	40
D	Tiempo de Reacción (min)	90	120

Tabla 10. Matriz de experimentos

Tratamiento	A	B	C	D	Y
1	1	1	1	1	
2	-1	1	1	1	
3	1	-1	1	1	
4	-1	-1	1	1	
5	1	1	-1	1	
6	-1	1	-1	1	
7	1	-1	-1	1	
8	-1	-1	-1	1	
9	1	1	1	-1	
10	-1	1	1	-1	
11	1	-1	1	-1	
12	-1	-1	1	-1	
13	1	1	-1	-1	
14	-1	1	-1	-1	
15	1	-1	-1	-1	
16	-1	-1	-1	-1	

Tabla 11. Plan de experimentación Diseño Factorial de 2⁴

Ensayo	Relación Molar	% Catalizador	Temperatura °C	Tiempo de Reacción	Variable Respuesta (% de PAA)	(% de H ₂ O ₂)
1	2	3	40	120	27,55	13,51
2	1	3	40	120	28,21	13,6
3	2	0,7	40	120	27,36	15,08
4	1	0,7	40	120	18,2	15,4
5	2	3	40	120	24,13	9,35
6	1	3	25	120	8,5	14,96
7	2	0,7	40	120	15,485	18,7
8	1	0,7	25	120	4,5	29,5
9	2	3	40	90	20,52	21,505
10	1	3	40	90	9,12	22,95
11	2	0,7	40	90	17,38	23,375
12	1	0,7	40	90	6,55	23,03
13	2	3	40	90	25,84	7,26
14	1	3	25	90	24,6	7,99
15	2	0,7	40	90	25,65	7,31
16	1	0,7	25	90	23,75	9,05

7. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Para desarrollar el análisis del diseño de experimentos factorial se emplea el software MINITAB® con el fin de determinar el efecto de las variables estudiadas y encontrar las condiciones adecuadas para la producción de ácido peracético.

Inicialmente se plantea un modelo donde se pretende evaluar el efecto de todos los factores y sus interacciones, incluso las de orden 4. A continuación se muestran los resultados obtenidos.

Tabla 12. Modelo inicial del diseño de experimentos

Term	Effect	Coef
Constant		19,209
Rel molar P/A	0,304	0,152
% Catalizador	11,872	5,936
Temperatura (°C)	7,561	3,780
Tiempo Reacción (min)	3,699	1,850
Rel molar P/A * % Catalizador	0,066	0,033
Rel molar P/A * Temperatura (°C)	0,122	0,061
Rel molar P/A * Tiempo Reacción (min)	0,278	0,139
% Catalizador * Temperatura (°C)	-4,651	-2,325
% Catalizador * Tiempo Reacción (min)	-0,889	-0,445
Temperatura (°C) * Tiempo Reacción (min)	-0,658	-0,329
Rel molar P/A * % Catalizador * Temperatura (°C)	1,218	0,609
Rel molar P/A * % Catalizador * Tiempo Reacción (min)	2,012	1,006
Rel molar P/A * Temperatura (°C) * Tiempo Reacción (min)	-1,654	-0,827
% Catalizador * Temperatura (°C) * Tiempo Reacción (min)	-1,962	-0,981
Rel molar P/A * % Catalizador * Temperatura (°C) * Tiempo Reacción (min)	-0,636	-0,318

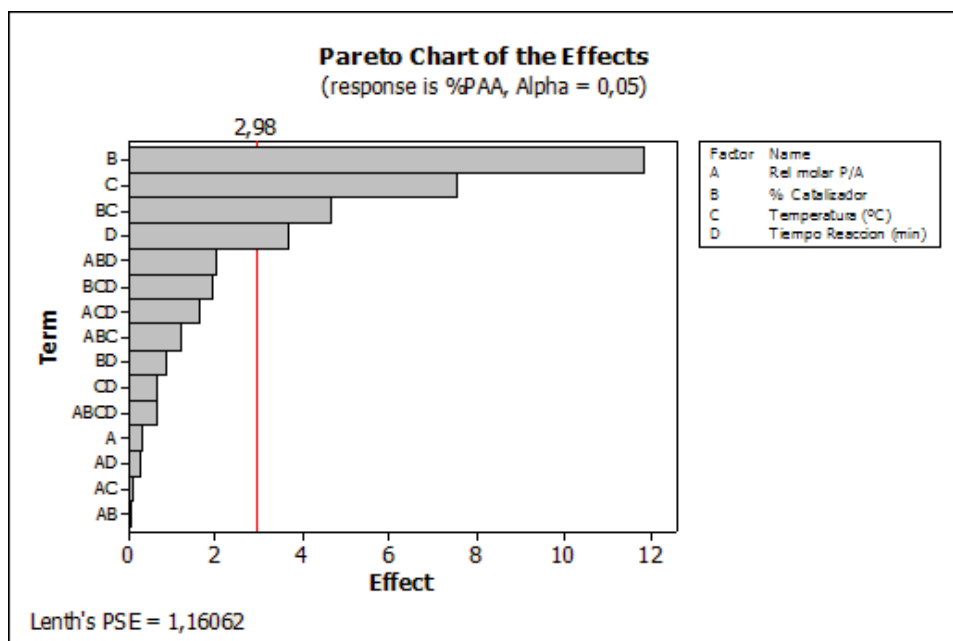
En la tabla anterior, se puede ver la magnitud de cada efecto y se puede evidenciar que la temperatura y el porcentaje de catalizador tienen la mayor incidencia positiva sobre la variable respuesta. Esto significa que un incremento en alguno de estos factores, producirá un incremento en la cantidad de ácido peracético presente en la mezcla. También se puede observar que la magnitud del efecto de la interacción entre estas dos variables es significativa, por lo tanto no se pueden analizar individualmente, como se verá más adelante. El tiempo de

reacción también es significativo y aunque tiene un coeficiente menor que las dos variables anteriores, se debe considerar en el análisis.

También se puede ver que las demás interacciones de 2, 3 y 4 variables, no son significativas en los niveles estudiados. El valor promedio mostrado en la parte superior corresponde al centro del dominio estudiado, por lo que si se experimenta con todos los niveles en valores intermedios, se obtendría un valor cercano a 19.21%PAA.

A continuación se muestra una gráfica de distribución normal y un diagrama de Pareto donde se puede ver más claramente cuáles efectos son significativos para este estudio.

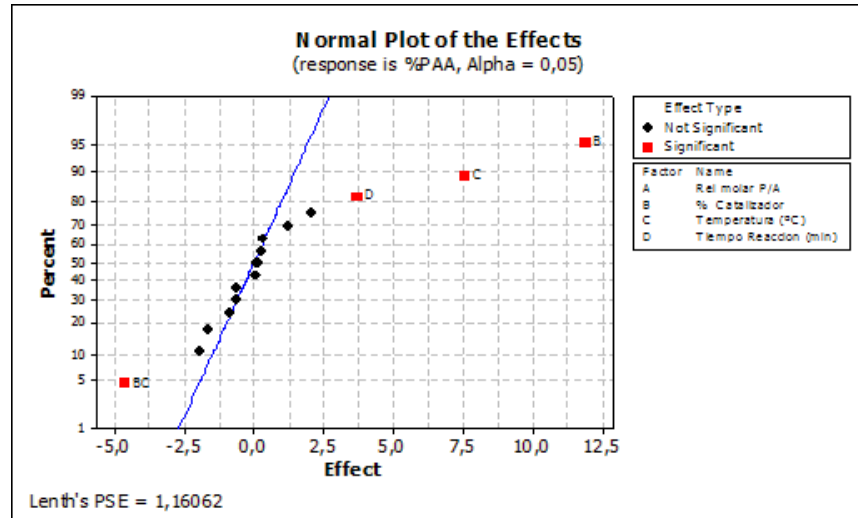
Figura 5. Diagrama de Pareto de los factores y sus interacciones



Para ambos gráficos se utiliza el método de Leith para experimentos sin replicaciones (que no tienen error), donde se calcula un coeficiente PSE (1.16062), que se utiliza para multiplicarlo por el valor de cada efecto. Para el diagrama de Pareto se calcula un margen de error (ME=2.98) con el promedio de todos los valores y se consideran significativos aquellos factores que su efecto esté por encima de dicho valor. En la Figura 5 se puede ver que, tanto el tiempo de reacción como la temperatura y el porcentaje de catalizador, están por encima del margen de error, por lo que son considerados significativos en los niveles

estudiados. De igual manera, se puede apreciar en la Figura 6 de distribución normal que los efectos de dichos factores son significativos porque no se ajustan a la distribución normal y no pueden ser explicados fácilmente por el ruido (puntos rojos).

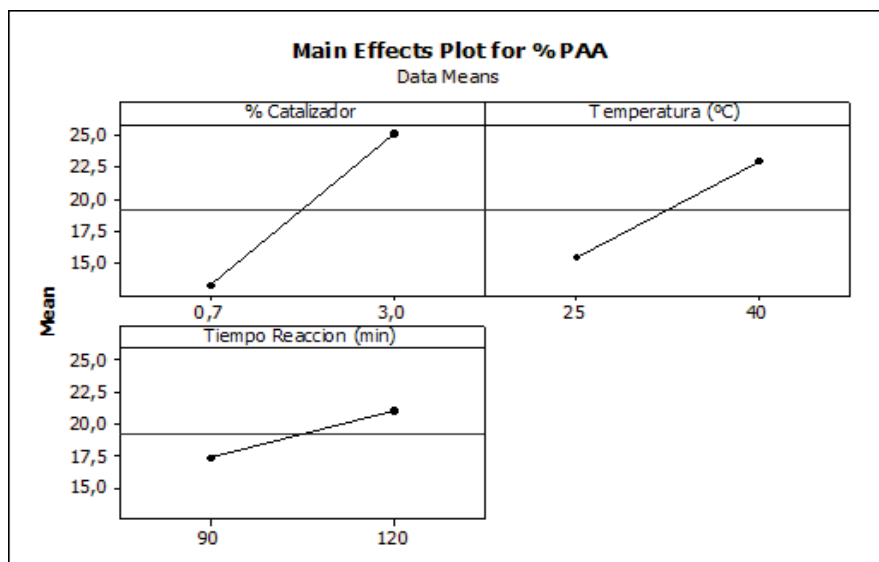
Figura 6. Distribución normal de los efectos



Como se dijo anteriormente, los efectos de la temperatura y el porcentaje de catalizador no pueden analizarse individualmente, porque como se pudo ver en los gráficos anteriores, su interacción es significativa. Más adelante se analiza cada efecto detalladamente.

A continuación se muestra un gráfica de efectos donde se corrobora lo anteriormente descrito.

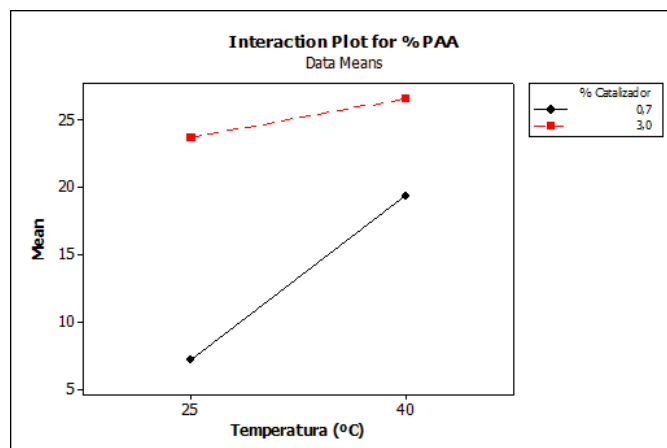
Figura 7. Efectos principales



7.1 TEMPERATURA Y PORCENTAJE DE CATALIZADOR

Los efectos de la temperatura y el porcentaje de catalizador son significativos, pero no se pueden analizar independientemente, debido a que se observa una interacción entre ambos, como se mencionó en la sección anterior y como se puede observar en la Figura 8.

Figura 8. Interacción de los factores



Con el nivel más bajo de catalizador (0.7%), se observa un incremento de 12.2% en el porcentaje de ácido peracético (PAA) de la mezcla al aumentar la temperatura, mientras que con el nivel más alto de este (3%), se presenta el incremento es únicamente de 2.9%. Esto indica que en los niveles estudiados, a mayor cantidad de catalizador empleado, el efecto de la temperatura es menor.

7.2 RELACIÓN MOLAR

Se puede ver que la variable respuesta no varía en mayores proporciones cuando cambian los niveles de este factor debido a que la adición en exceso de unos de los reactivos no asegura un aumento en el porcentaje del ácido peracético por las condiciones en que opera el sistema y a la naturaleza de la reacción.

En la Tabla 13, se pueden observar una comparación de los resultados obtenidos con las dos relaciones molares utilizadas.

Tabla 13. Efecto de relación molar en porcentaje de ácido peracético

Condiciones de Proceso			Variable Respuesta	
Temperatura	% Catalizador	Tiempo de Reacción	% PAA a 1:1	% PAA a 2:1
40	3	120	25,84	27,55
25	3	120	24,6	28,21
40	0,7	120	24,13	20,52
25	0,7	120	8,5	9,12
40	3	90	25,65	27,36
25	3	90	23,75	18,2
40	0,7	90	15,48	17,38
25	0,7	90	4,5	6,55

En este caso, para los factores y niveles estudiados, la relación molar de los reactivos se puede considerar un factor inerte o inactivo. Esto se debe a que su efecto principal y sus interacciones con los demás factores pueden ser fácilmente explicados por el ruido (ya que se ajusta más fácilmente a la línea de ajuste Normal y se acercan más a cero). Por lo anterior se podrían manipular los niveles de este factor, para obtener mejoras en alguna otra respuesta (costo) sin afectar considerablemente el rendimiento de la reacción.

7.3 TIEMPO DE REACCIÓN

Este factor tiene un efecto significativo en la variable respuesta, como se puede apreciar en la Tabla 14.

Tabla 14. Efecto del tiempo de reacción en la variable respuesta

Condiciones de proceso			Variable Respuesta	
Temperatura	% Catalizador	Relacion Molar	% PAA a los 90 minutos	% PAA a los 120 minutos
40	3	2	27,36	27,55
25	3	2	18,2	28,21
40	3	1	25,65	25,84
25	3	1	23,75	24,6
40	0,7	2	17,38	20,52
25	0,7	2	6,55	9,12
40	0,7	1	15,48	24,13
25	0,7	1	4,5	8,5

El efecto de aumentar el tiempo de reacción en media hora es un incremento de 3.7% en la cantidad de PAA presente en la mezcla y esta es independiente en los niveles evaluados en las otras variables. En grandes volúmenes de producción, éste aumento es significativo y no requiere mucho tiempo de reacción.

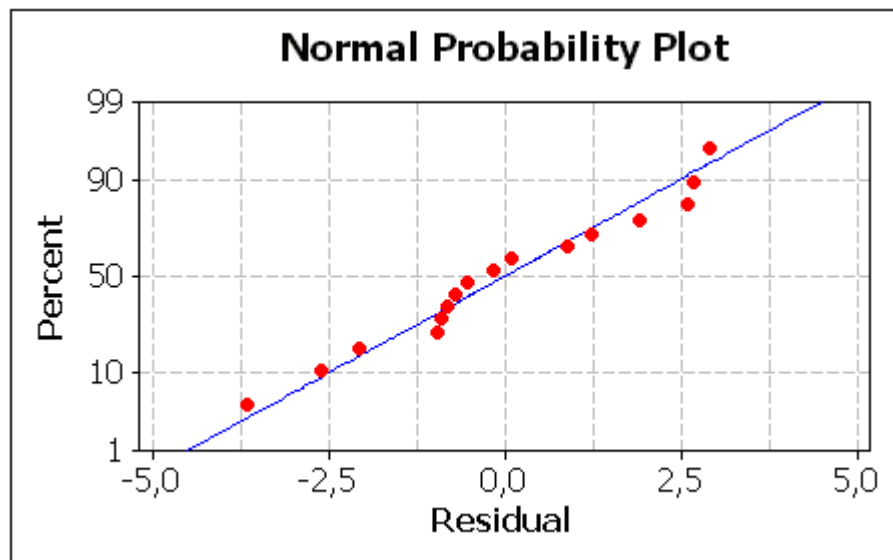
8. AJUSTE DEL MODELO

El Modelo planteado inicialmente incluye todos los efectos e interacciones posibles entre los factores. Al determinar cuáles son significativos y cuáles no, se plantea un modelo ajustado donde sólo se tienen en cuenta los efectos encontrados significativos y se evalúa su precisión.

Tabla 15. Estimación de los coeficientes de regresión del modelo ajustado

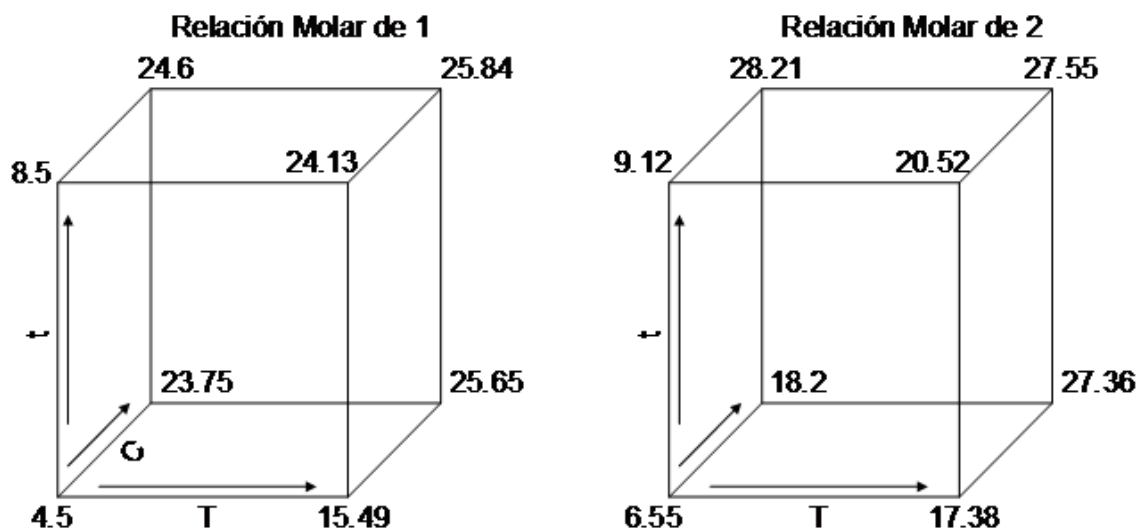
Term	Effect	Coef	SEcoef	T	P
Constant		19,209	0,5628	34,13	0,000
% Catalizador	11,872	5,936	0,5628	10,55	0,000
Temperatura (°C)	7,561	3,780	0,5628	6,72	0,000
Tiempo Reacción (min)	3,699	1,850	0,5628	3,29	0,007
% Catalizador*Temperatura (°C)	-4,651	-2,325	0,5628	-4,13	0,002

Figura 9. Distribución normal del modelo ajustado



Se comprueba que el nuevo modelo, donde únicamente se tienen en cuenta los efectos principales e interacciones consideradas como significativas, es un buen ajuste y predice de manera confiable los resultados obtenidos en el modelo inicial.

Figura 10. Diagrama de Cubos



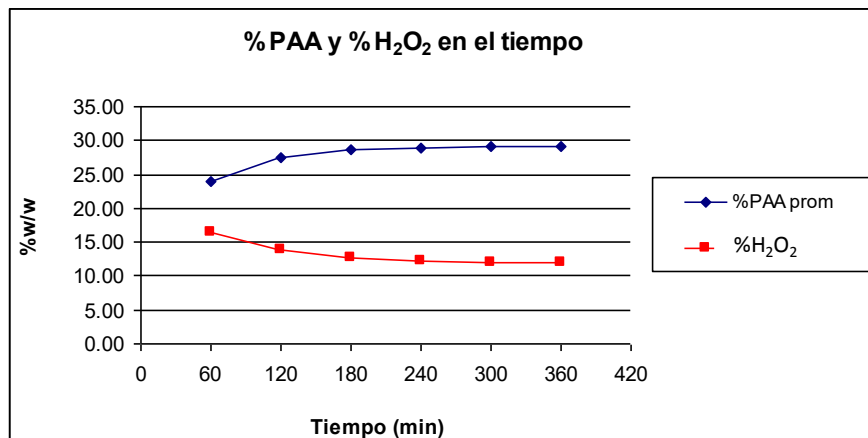
En los diagramas de cubos, se graficaron los factores T, %C y t, para los niveles inferior y superior de la relación molar. En ellos se puede observar que cada par de datos correspondientes, se podrían tomar como réplicas, ya que su diferencia es relativamente pequeña, lo que confirma que la relación molar no es un factor significativo en este estudio.

Con los resultados obtenidos se busca la combinación de las variables que permita obtener el porcentaje de peracético deseado en la mezcla. El software Minitab® arroja los resultados de 3% para la variable catalizador y 40°C para la temperatura para obtener 28% de peracético. Estos resultados son comprobados en el laboratorio y se mide la concentración durante 6 horas con el fin de encontrar la concentración en el equilibrio. Los resultados se muestran a continuación.

Tabla 16. Variación de la concentración en el tiempo

Temperatura	%Catalizador	Tiempo (h)	%PAA		%H ₂ O ₂		%PAA _{prom}	%H ₂ O ₂ _{prom}
			Ensayo 1	Ensayo 2	Ensayo 1	Ensayo 2		
40	3	60	23.85	24.04	16.51	16.55	23.94	16.53
		120	27.27	27.65	13.9	13.6	27.46	13.75
		180	28.5	28.8	12.88	12.54	28.65	12.71
		240	28.90	28.98	12.2	12.11	28.94	12.155
		300	29.07	29.17	11.99	11.99	29.12	11.99
		360	29.1	29.17	11.97	11.97	29.14	11.97

Figura 11. Variación de la concentración en el tiempo

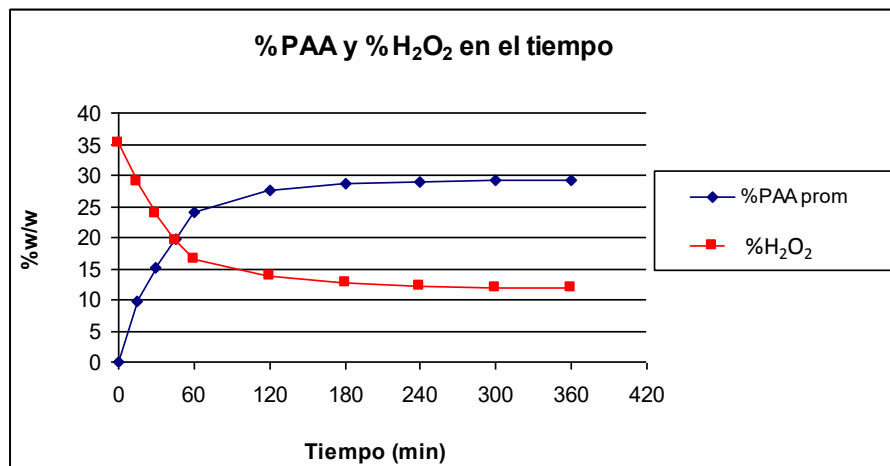


Inicialmente se tomaron datos cada hora, pero al ver que el mayor incremento en la conversión ocurre durante la primera hora se decide tomar datos durante ésta cada 15 minutos con el fin de evaluar mejor el comportamiento de la reacción midiendo paralelamente la densidad de la mezcla para conocer la concentración en mol/l, necesaria para el diseño del proceso. Se obtuvieron los siguientes resultados.

Tabla 17. Determinación del equilibrio químico

Tiempo (min)	%PAA prom	%H ₂ O ₂ prom
0	0	35.1
15	9.69	29.02
30	15.2	23.7
45	19.86	19.48
60	23.94	16.53
120	27.46	13.75
180	28.65	12.71
240	28.94	12.155
300	29.12	11.99
360	29.14	11.97

Figura 12. Concentración en el Equilibrio



Con los datos obtenidos se pudo determinar que la conversión donde se alcanza el equilibrio es del 67 %. Al cabo de 120 minutos la conversión es de 63% que equivale a 95% de la conversión del equilibrio, por eso se decide que el tiempo de reacción sea de 120 minutos, ya que sería más costoso dejar reaccionar una o dos horas más comparado con el poco aumento en la conversión. También se confirma, gracias al ajuste realizado, que los efectos definidos como significativos, son en realidad los que tienen mayor incidencia sobre la variable respuesta, debido a que el modelo ajustado describe de manera adecuada el resultado obtenido.

9. DETERMINACIÓN DE LA LEY CINÉTICA

Para la determinación de la ley cinética se usó el método de análisis diferencial.

Se postula una ley cinética que describa el comportamiento aparente de la reacción, ya que el planteamiento de una ley cinética rigurosa para la reacción en equilibrio no está dentro del alcance de este proyecto. El proceso para determinar la ley cinética fue tomado de Fogler y Levenspiel. [23,24]

$$-\gamma_A = k_A * C_B^\beta * C_A^\alpha \quad (1)$$

Donde A y B son peróxido de hidrógeno y ácido acético respectivamente.

Es necesario aclarar que para esta serie de experimentos se utilizó ácido acético en exceso por lo que se dice que la concentración final es igual que la inicial ($C_B=C_{B0}$) y se asume que su orden de reacción es 1 ya que, con los métodos disponibles en este estudio, no es posible medir su concentración en el tiempo. Por lo anterior se tiene lo siguiente. [18]

$$\gamma_A = k_A * \underbrace{C_{B0}^\beta}_{k'} * C_A^\alpha \quad (2)$$

$$\gamma_A = k' * C_A^\alpha \quad (3)$$

Combinando la ley cinética con el balance molar expresado en términos de concentración y sacando logaritmo natural a ambos lados de la ecuación, se obtiene la ecuación de una línea recta.

$$\ln\left[-\frac{dC_A}{dt}\right] = \ln k' + \alpha \ln C_A \quad (4)$$

Para graficar dicha recta, que tiene como pendiente el valor del orden de reacción para A y como intercepto el valor de k' , es necesario recolectar datos de concentración en el tiempo. La toma de datos se lleva a cabo durante 120 minutos, definido como el tiempo de reacción, a las mismas condiciones en el laboratorio.

Tabla 18. Datos experimentales y determinación de la variación de la concentración en el tiempo

Tiempo (min)	Ca (H ₂ O ₂) mol/L	-DCa/Dt (mol/L *min)	-dCa/dt
0	12.5947	0.1748	0.2007
15	9.9726	0.1231	0.1489
30	8.1263	0.0972	0.1102
45	6.6679	0.0676	0.0824
60	5.6533	0.0267	0.0656
90	4.8517	0.0050	0.0463
120	4.7009		

Luego, con los datos obtenidos se calcula el valor de $-\frac{dC_A}{dt}$ gráficamente o por el método de diferencias finitas, como se muestra a continuación. Los resultados se muestran en la tabla 18.

Punto inicial

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{-3C_{A0} + 4C_{A1} - C_{A2}}{2\Delta t} \quad (5)$$

Punto intermedio

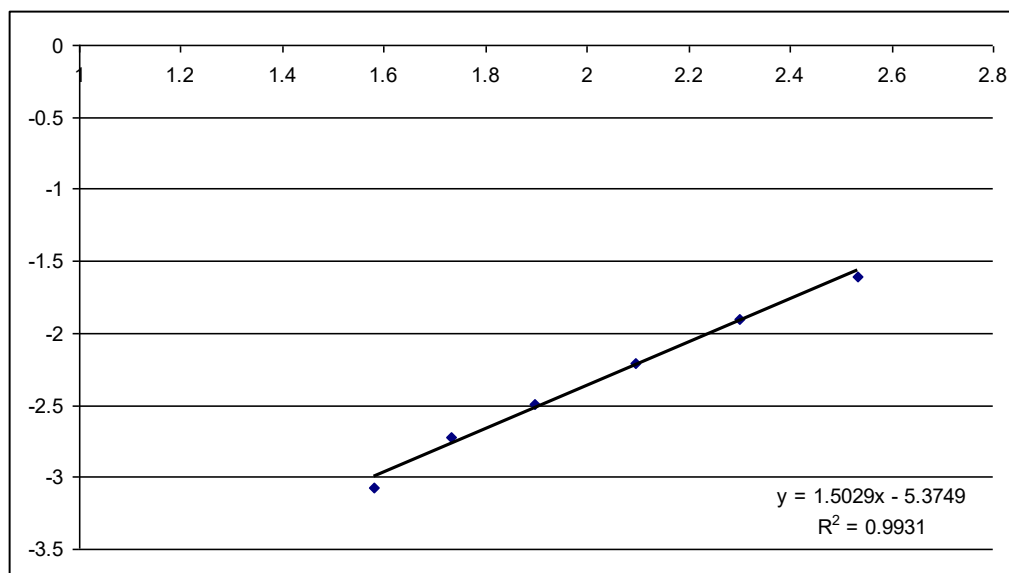
$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{C_{A(i+1)} - C_{A(i-1)}}{2\Delta t} \quad (6), \text{ siendo } i \text{ el dato que se quiere calcular.}$$

Punto final

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{C_{A3} - 4C_{A4} + 3C_{A5}}{2\Delta t} \quad (7)$$

Con los valores correspondientes se hace una gráfica de $\ln\left[-\frac{dC_A}{dt}\right]$ vs $\ln C_A$ y con una regresión lineal se obtienen los valores de k' y α .

Figura 13. Determinación de la cinética química



De la gráfica anterior, aproximando el valor de $\alpha = 2$ y recalculando k con la

expresión $k = \frac{k'}{C_{B0}}$ obtenemos un valor de $k = 0.00011 \text{ (L/mol)}^2 / \text{min}$.

Con lo anterior, la ley cinética que predice el comportamiento aparente del proceso está dada por la siguiente expresión y servirá para el diseño conceptual del proceso mostrado a continuación:

$$\gamma_A = -0.00011 * C_B^1 * C_A^2 \quad (8)$$

Una vez determinada la velocidad de reacción del proceso, se realizaron algunos experimentos con el fin de comprobar la necesidad de agregar un estabilizante para evitar la rápida descomposición del producto. Se prueba con diferentes cantidades de NaOH, que es una de las sustancias reportadas en la literatura para inhibir la acción del catalizador y para permitir que el equilibrio alcanzado se mantenga y simplemente se desplace al diluir con agua, sin descomponer el producto (por la estequiometría de la reacción). Otros estabilizantes pueden ser usados (sales de sodio del ácido dipicolínico), pero se elige trabajar con NaOH por su mayor disponibilidad comercial. [10]

El hidróxido de sodio se agrega en tres relaciones molares diferentes, con respecto al ácido sulfúrico, a soluciones de ácido peracético con las mismas características para estimar la cantidad necesaria. Uno de los ensayos se realiza sin adición de NaOH. Es necesario recordar que la relación molar de neutralización de ácido sulfúrico con NaOH es de 2:1 en exceso de hidróxido de sodio. Los resultados se muestran en la Tabla 19.

Tabla 19. Estabilidad del producto en el tiempo

Rel NaOH/H₂SO₄	%PAA inicial	%PAA 1 semana	%PAA 2 semanas
3	29.14	29.14	29.12
2	29.14	29.14	29.12
1	29.14	29.1	29.07
0	29.14	24	19

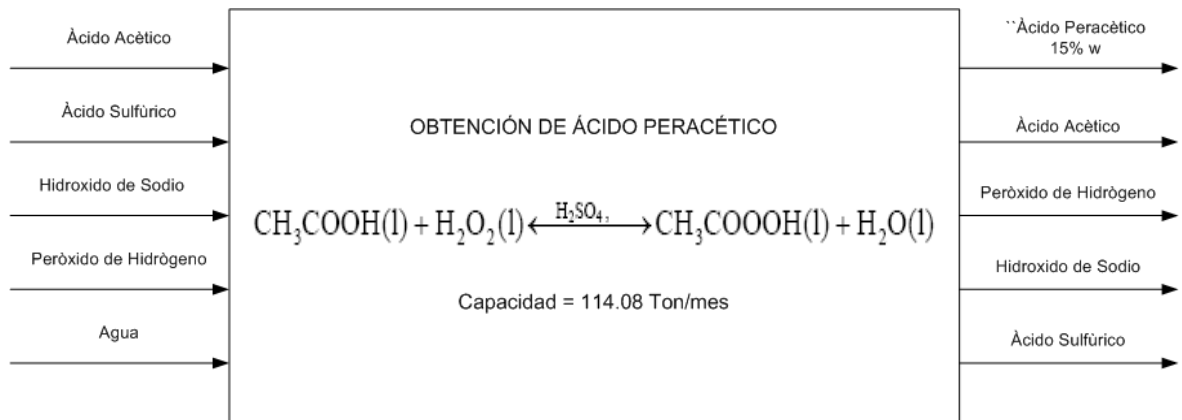
Como puede observarse en la tabla 19, cuando se agrega hidróxido de sodio en exceso, el producto mantiene su concentración al cabo de dos semanas, mientras que cuando es agregado en menor cantidad o no se agrega, la concentración disminuye al cabo del mismo tiempo. Cuando se agrega en relación molar de 2, se obtienen los mismos resultados que cuando la relación molar es de 3, por lo cual es mejor agregarlo en relación estequiométrica para neutralización (relación molar de 2) para no incurrir en sobrecostos innecesarios y para evitar que los excesos de NaOH reaccionen en mayor medida con los demás ácidos presentes en la mezcla, formando compuestos no deseados. Esto comprueba la necesidad de agregar hidróxido de sodio para aumentar la vida útil del producto.

10. DISEÑO CONCEPTUAL DEL PROCESO

10.1 DIAGRAMAS DE PROCESO

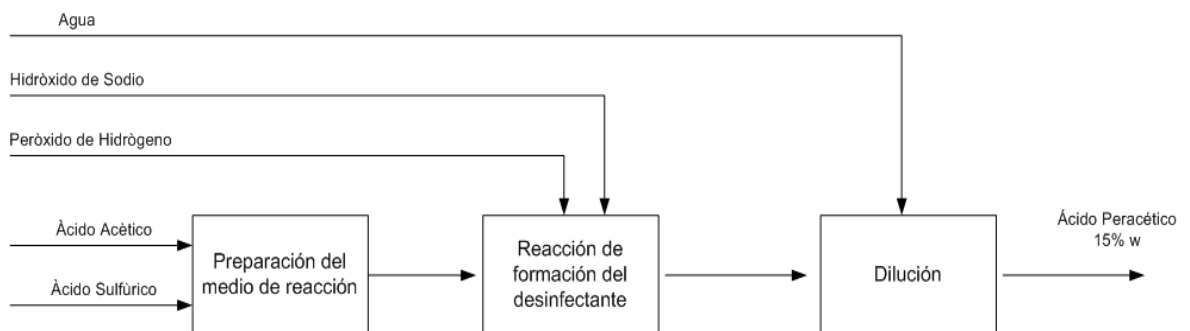
10.1.1 Diagrama general de entradas y salidas

Figura 14. Diagrama de entradas y salidas



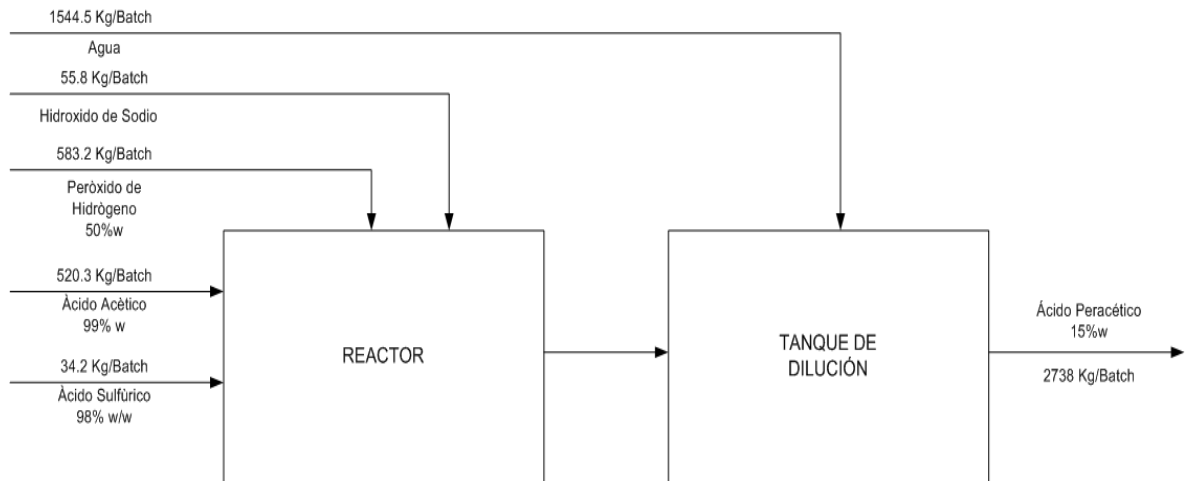
10.1.2 Diagrama de bloques

Figura 15. Diagrama genérico de bloques GBFD



10.1.3 Diagrama general de bloques

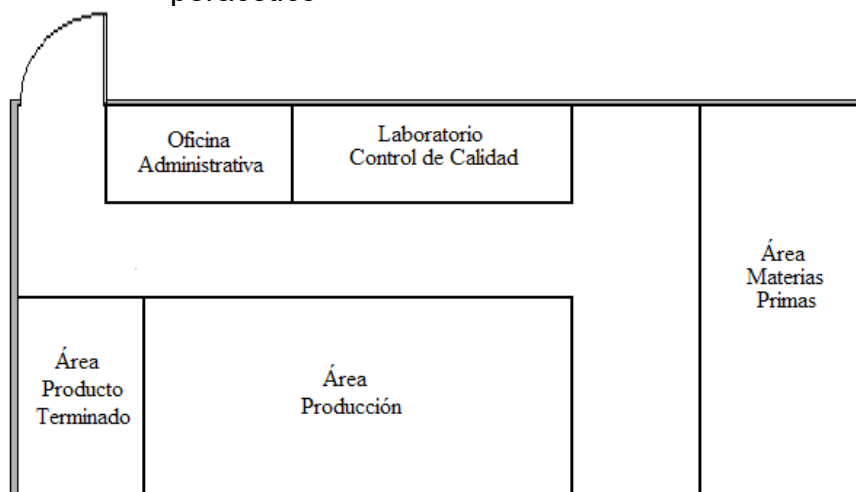
Figura 16. Diagrama de bloques de proceso BFD



10.1.4 Diagrama de flujo de procesos. En la Figura 18 puede observarse el diagrama de flujo de proceso de ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido acético.

10.1.5 Plot plan y restricciones para el layout. Para el layout de la planta, se cuenta con 5 áreas definidas, las cuales se pudieron identificar luego del diseño del proceso realizado en las secciones siguientes. El área de materias primas es el lugar donde se encuentran los tanques almacenamiento de peróxido de hidrógeno, ácido acético, ácido sulfúrico, hidróxido de sodio. Estos tanques deben tener una separación física del proceso por seguridad industrial. En el área de producción se ubican los tanques de dosificación, la torre de enfriamiento, la caldera, el reactor y el tanque de dilución. Después de ésta se encuentra el área de almacenamiento de producto terminado. Adicionalmente se cuenta con una oficina administrativa y un laboratorio para las pruebas de calidad.

Figura 17. Layout de la planta de producción de ácido peracético



10.2 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

La producción de ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido acético se lleva a cabo mediante un proceso discontinuo. Inicialmente, se alimenta 520.3 Kilogramos de ácido acético glacial desde el tanque de almacenamiento TK-101 al reactor Batch R-101 por medio de la bomba P-101. Paralelamente, 34.2 Kilogramos de ácido sulfúrico (98%w) comercial son cargados desde el tanque de almacenamiento TK-102. Una vez terminada la descarga, se enciende el agitador y se calienta el contenido del reactor, haciendo pasar por el serpentín 0.2 Kg/min de vapor de baja presión (*lps a 3 barg*) proveniente de una caldera, aproximadamente por 40 minutos con el fin de alcanzar la temperatura a la se desea que ocurra la reacción (40°C). Una vez alcanzada dicha condición, se cargan 583.2 Kilogramos de peróxido de hidrógeno al reactor, desde el tanque de almacenamiento TK-103 por medio de la bomba P-103 con el fin de iniciar la reacción. Una vez se inicia la reacción, se hacen circular 0.768m³/h de agua de enfriamiento (*cw*) proveniente de una torre de enfriamiento, para que se mantenga la temperatura ya que la reacción es exotérmica y así mantener la mezcla reaccionante en condiciones de operación isotérmicas.

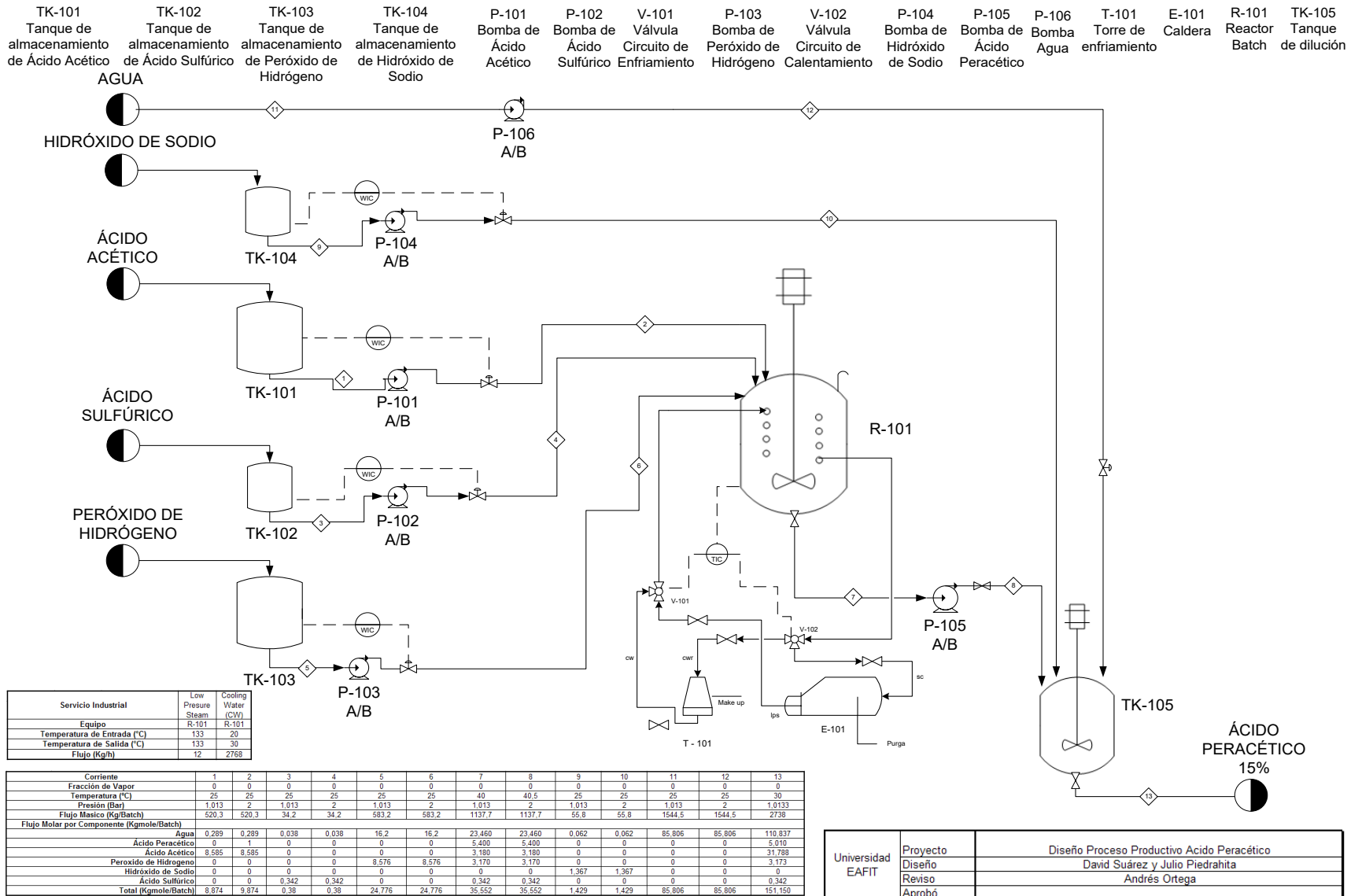
El sistema de intercambio de calor en el reactor funciona con dos circuitos cerrados, uno de agua de enfriamiento y el otro de vapor, que son operados por un juego de válvulas de 3 vías (V-101 y V-102) controladas por un indicador de temperatura ubicado en el reactor; dependiendo del requerimiento energético del

proceso (adicionar o retirar calor), abre el circuito de enfriamiento y cierra el de vapor o viceversa. A pesar de que los dos servicios pasan por el serpentín del reactor, trabajan como dos circuitos independientes y no se mezclan.

Al cabo de 120 minutos de reacción, el producto obtenido con aproximadamente 36% de ácido peracético, se descarga del reactor R-101 al tanque con agitación TK-105. Posteriormente se agregan 55.8 kilogramos de hidróxido de sodio al 50% (en relación molar de 2:1 con el ácido sulfúrico para neutralizar su acción. Algo de peracetato de sodio se forma pero es despreciable) desde el tanque TK-104 y se homogeniza con el fin de desactivar el catalizador y estabilizar la mezcla reaccionante. Otros estabilizantes pueden ser agregados. Se toma una muestra del producto y se analiza para determinar la concentración de peracético obtenida y determinar la cantidad de agua exacta que debe ser adicionada al TK-105, después de este análisis el producto se diluye con 1589.81 kilogramos de agua con el fin de obtener el producto final que es una mezcla en equilibrio de ácido peracético al 15 %.

Figura 18. Diagrama de Flujo de proceso PFD

DIAGRAMA DE FLUJO DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO PERACÉTICO



10.3 SIMULACIÓN DEL PROCESO

El proceso anteriormente descrito se simula en el software Aspen Batch, que está disponible en la Universidad EAFIT y que brinda las herramientas necesarias para conocer el comportamiento del proceso, los requerimientos de energía y los tiempos de proceso. La simulación se llevó a cabo a partir de los siguientes datos.

10.3.1 Receta del proceso

Mediante la definición de la receta y la identificación de los tiempos de cada etapa del proceso, se pueden definir etapas que, por sus características, pueden ser llevadas a cabo de manera simultánea, como se puede apreciar en la tabla 20.

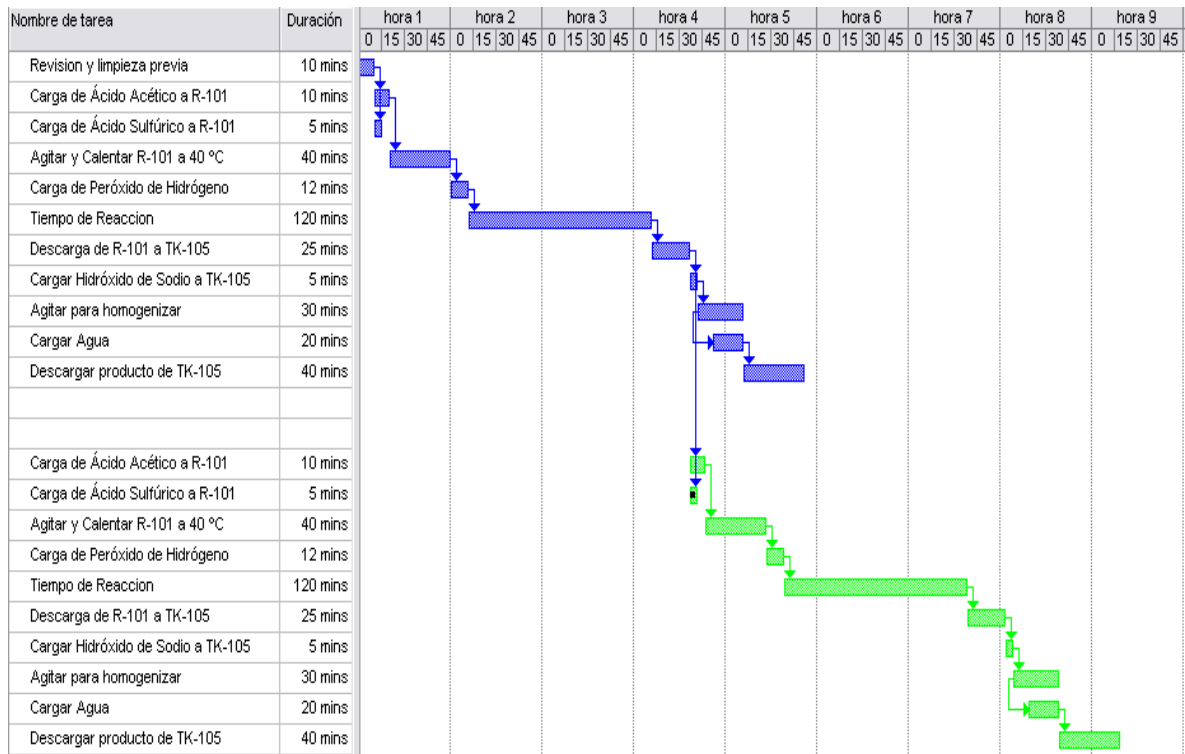
Tabla 20. Receta del proceso

	OPERACIÓN	Masa Adicionada (Kg)	Volumen Adicionado (l)	Masa Acumulada (Kg)	Volumen Acumulado (l)	Duracion (min)	Tiempo Acumulado (min)
1	Revisión y limpieza previa del Equipo	0	0	0	0	10	10
2	Carga de Ácido Acético a R-101	520.3	496	520.3	496	10	20
3	Carga de Ácido Sulfúrico a R-101	34.2	19	554.5	515	5	20
4	Calentar R-101 a 40 °C	0	0	554.5	515	40	60
5	Carga de Peróxido de Hidrógeno a R-101	583.2	486	1137.7	1001	12	72
6	Tiempo de Reaccion	0	0	1137.7	1001	120	192
7	Descarga de Reactor R-101 al tanque de dilución TK-105	0	0	1137.7	1001	25	217
8	Carga de Hidróxido de Sodio al TK-105	55.8	36.61	1193.54	1037.61	5	222
9	Agitación	0	0	1193.54	0	30	252
10	Cargar Agua hasta PAA=15% al TK-105	1,543.65	1,543.65	2,737	2,581	20	262
11	Descarga de TK-105	-2737.19	-2581.26	0	0	40	302

Con una base de 1 m³ de mezcla reaccionante, se calculan las cantidades que se adicionan o retiran en cada etapa y los tiempos requeridos. En el diagrama de Gantt que se muestra a continuación, se puede observar más claramente cuáles tareas pueden realizarse en paralelo.

10.3.2 Diagrama de Gantt

Figura 19. Diagrama de Gantt



El diagrama de Gantt de la Figura 19 permite organizar las tareas de manera más eficiente, ya que se puede identificar en que momento del Batch se puede empezar con uno nuevo sin afectar el correcto desarrollo del proceso. En el diagrama anterior se ve claramente como, inmediatamente después de terminar la descarga del reactor, se puede iniciar nuevamente la carga de reactivos para iniciar un nuevo Batch. Cuando este segundo Batch (representado en líneas verdes) esté listo para ser descargado del reactor, el tanque ya va a estar disponible. La última etapa de descarga del tanque de dilución TK-105 puede ser completada al inicio de la operación el día siguiente, para no superar el turno de 8 horas propuesto para la operación de la planta, sin afectar el desarrollo adecuado del proceso. Por lo anterior, la planta produce dos lotes al día.

Con ésta información, se procede con la simulación del proceso, con el fin de evaluar su comportamiento y las condiciones más apropiadas de operación. Los resultados obtenidos se muestran a continuación.

- Con un reactor de 1 m³ de volumen de mezcla reaccionante (1.2 m³ de volumen total) se alcanza una conversión de 63% de Peróxido de Hidrógeno al cabo de los 120 minutos de reacción (conversión obtenida experimentalmente). A pesar de ello, el porcentaje en peso de ácido peracético en la mezcla a la salida del reactor es de 36.1% lo cual es aproximadamente un 8% más de lo obtenido a escala del laboratorio. Esto puede deberse a que en cantidades mayores, la transferencia de masa se ve favorecida y la producción de ácido peracético aumenta. Además una mayor concentración inicial, permite obtener mejores conversiones y mejores rendimientos. Debido a que los resultados del simulador son hipotéticos y proporcionan un estimativo, es necesario corroborar sí los resultados predichos por el software o los obtenidos en la escala de experimentación de éste estudio en cuanto a % de ácido peracético en la mezcla al final de la reacción, son los correctos para la producción a mayor escala. [18]
- Inicialmente se calienta el reactor con 0.2 Kg/min de vapor a 3 bares de presión (lps) con el fin de alcanzar los 40°C necesarios para iniciar la reacción. Mientras se carga el segundo reactivo (peróxido de hidrógeno), es necesario aumentar a 1.15Kg/min el flujo de vapor para mantener la temperatura. Una vez terminado este proceso, se empieza a contar el tiempo de reacción, la cual es exotérmica y debe controlarse haciendo pasar un fluido frío por la chaqueta, para mantener el reactor operando a la misma temperatura durante los 120 minutos de reacción (40°C). Para esto se utiliza agua de enfriamiento (cw) a 20°C, con un flujo volumétrico de 0.768 m³/h. La temperatura de salida del agua es de 30°C lo cual cumple con el criterio de $\Delta T_{\text{mínimo}}$. La energía producida por la reacción ayuda que la carga térmica utilizada para mantener el reactor a 40°C no sea muy alta.
El requerimiento energético total de calentamiento es 47104.97 kJ mientras que el generado en la reacción (retirado por el agua de enfriamiento) es de -64279 kJ
- Los equipos se especificaron para que tuvieran un 20% de sobrediseño en su tamaño. [25,26]

10.4 SELECCIÓN DE EQUIPOS

A continuación se presentan los criterios tenidos en cuenta para la selección de cada uno de los equipos requeridos en el proceso de producción de ácido peracético a partir de peróxido de hidrógeno y ácido acético.

10.4.1 Tanques de almacenamiento y dosificadores de materias primas. En el PFD se muestran cuatro tanques dosificadores de materia prima previos al reactor (TK-101, TK-102, TK-103 y TK-104). En ellos se almacena la cantidad necesaria para la operación del proceso durante el día (dos batches). La descarga al reactor se realiza mediante bombas de acople magnético y celdas de carga ubicadas en cada tanque. Dichas celdas controlan válvulas que se cierran una vez se cargue la cantidad requerida. Dichos tanques almacenan cantidades más pequeñas que los que se usan para almacenar la materia prima en general con el fin de tener mayor sensibilidad y precisión en la descarga del material al reactor. Además, por seguridad industrial, es necesario tener el almacenamiento a gran escala lo mas lejos posible del proceso y debe evitarse usar tramos de tubería muy largos. [27]

Para la selección del material de construcción es necesario tener en cuenta su capacidad y la naturaleza de la sustancia que van a contener. Como son tanques relativamente pequeños (1.2m³ los de ácido acético y peróxido de hidrógeno, 50 litros para el ácido sulfúrico y 105 para el peróxido de hidrógeno todos con el 20% de sobrediseño), Turton y Walas sugieren en sus reglas de dedo (heurística) que se usen tanques verticales con soportes metálicos; además deben estar cerrados en la parte superior para evitar contaminación, pero deben tener sistemas de venteo que permita la evacuación de vapores provenientes de la descomposición de las sustancias almacenadas que puedan volverse peligrosos. Los tamaños de los tanques se ajustan a la disponibilidad comercial (ver sección 12). [25,26]

Con respecto al material, hay disponibles diversos tipos dependiendo de las características físicas y químicas de cada sustancia. En el mercado local Fibratore S.A fabrica tanques de poliéster reforzado con fibra de vidrio (PRFV o FRP) que son adecuados para el almacenamiento de ácido acético y NaOH, por su resistencia mecánica, química, impermeabilidad con el medio en contacto y su compatibilidad técnica y económica con el proceso. El ácido sulfúrico puede contenerse en tanques de acero al carbón debido a que su concentración es alta (98%).

Por sus características de corrosión, el peróxido de hidrógeno debe almacenarse en contenedores de PVC, aluminio o acero inoxidable, los cuales tienen un alto costo. El polietileno, aunque es un material menos resistente, también cumple las condiciones para almacenar el peróxido y presenta costos menores. Debe ser sin pigmentación y con tratamiento UV para evitar reacciones indeseadas. Fibratore S.A ofrece en el mercado local un tipo de tanque fabricado en fibra de vidrio con un recubrimiento especial en resina Hetron 197-3 (poliéster TS) que es un material más resistente que el polietileno y más económico que el PVC o acero inoxidable y es apropiado para almacenar peróxido de hidrógeno al 50%. [27,28]

Además de estos tanques para la fácil dosificación de las materias primas al proceso, es necesario contar con tanques de un tamaño mayor que permitan almacenar el material durante varios días (tanques de almacenamiento) en las cantidades en que es despachada por cada proveedor. En el anexo 1 se puede consultar la hoja de especificación correspondiente.

10.4.2 Bombas. En el proceso de producción de ácido peracético se emplean bombas tanto para transportar las materias primas de los tanques de almacenamiento a los dosificadores, como para el alimento y descarga del reactor y del tanque de dilución. Aunque ninguna de las materias primas requiere ser alimentada controladamente en un determinado tiempo (dosificación), es importante no realizar la carga y descarga por gravedad ya que los tiempos de proceso se aumentarían y no se lograría el objetivo de realizar dos baches por día, como se describió anteriormente.

Las bombas recomendadas para el trasiego de fluidos altamente corrosivos, oxidantes y viscosos son generalmente las de desplazamiento positivo, hechas con materiales plásticos, las centrífugas con sellos hidráulicos en vez de mecánicos que no permitan ningún tipo de derrame y las de acople magnético.

En este caso se elige trabajar con bombas centrífugas de acople magnético ya que por sus características de construcción y operación son compatibles con las sustancias que se utilizan en el proceso y permite el trasiego sin generar pérdidas, no incrementan la temperatura de los fluidos, lo cual es importante para la estabilidad de los mismos, pueden operar sin problema en las condiciones de temperatura del proceso y los líquidos que bombean no contienen sólidos en suspensión, por lo cual su desempeño no se ve afectado. Además presentan bajo costo de mantenimiento. En el mercado local se consiguen fabricadas polipropileno, adecuadas para temperaturas bajas (tanques de dosificación) y en resina de Kynar (PVDF) para la descarga del reactor (la temperatura es de 40°C y podría afectar el polipropileno). Dichos materiales ofrecen las mejores características anticorrosión y manejan los rangos de caudal requeridos por el proceso.

La bomba escogida para el agua es una centrifuga fabricada en hierro fundido que es económica y cumple con los requerimientos de caudal, presión y cabeza. En el capítulo siguiente se describe más detalladamente las características de cada bomba.

10.4.3 Reactor. El volumen de la mezcla reaccionante se fijó en 1m^3 por batch. Con el criterio de Turton para el sobrediseño, se fijó en 1.2m^3 el volumen total del reactor.

El reactor debe ser cerrado en su parte superior para evitar contaminación y cuenta con un serpentín ubicado en la parte interna del recipiente por donde se llevará a cabo el intercambio de calor, tanto en la operación de calentamiento, como en la de remoción de calor, debido a que ofrece mayor área de intercambio de calor, mejores coeficientes globales de transferencia que una chaqueta y mejor control de la temperatura. Además las materias primas empleadas no generan incrustaciones importantes que dificulten la limpieza o afecten el correcto desarrollo del proceso. [26]

En el proceso de reacción se presenta desprendimiento de algunos vapores debidos a la temperatura, impurezas y a la descomposición autoacelerada del producto o del peróxido principalmente. Para evitar la sobrepresión en el reactor generada por el oxígeno liberado en dicha descomposición, pueda afectar la reacción, ponga en riesgo la seguridad del proceso o genere largos periodos de inactividad, el reactor debe estar equipado con tubo de escape libre que permita la permanente evacuación de dichos vapores a un recipiente con agua, donde produzcan un simple burbujeo. Es preciso evitar el contacto directo con dichos vapores ya que tienen olor fuerte y pueden producir irritación.

El reactor debe contar también con un sistema adicional de alivio de presión, que permita contrarrestar posibles liberaciones excesivas de vapor cuando se opera en condiciones anormales y que excedan la capacidad del venteo libre. [29,30]

Para esto se elige trabajar con disco de ruptura ya que son económicos y presentan respuesta instantánea a incrementos peligrosos de presión, además, por las características de corrosión de los compuestos utilizados, no es adecuado emplear válvulas de alivio ya que tendrían menor vida útil y costos de mantenimiento mayores. Se recomienda usar dos discos de ruptura en paralelo, en caso de deterioro causado por la naturaleza de los compuestos.

Este y todos los sistemas de alivio del proceso deben diseñarse para evitar que los contaminantes del aire tengan contacto directo con las materias primas y minimizando la exposición del personal a los vapores.

Se recomienda usar acero inoxidable 316L para la construcción del reactor ya que allí se manejan concentraciones iniciales altas de peróxido de hidrógeno por lo cual no es apropiado el poliéster reforzado con fibra de vidrio. Otros materiales plásticos podrían tener menor vida útil, presentar mayores problemas frente a la exposición prolongada a algunos componentes o verse afectados por la temperatura, lo cual no es deseable para el equipo más importante del proceso. En el capítulo 10.5 se describe detalladamente su diseño.

10.4.4 Tanque de dilución. Para el proceso de dilución del producto obtenido en el reactor, es necesario utilizar un tanque con agitación (TK-105) de fondo plano. El volumen total es de 3.5m^3 (20% sobrediseño) y puede construirse en PRFV o en polietileno de alta densidad ya que ambos son compatibles con las concentraciones de las sustancias que se manejan. Cabe aclarar que el PRFV no es adecuado para almacenar el peróxido de hidrógeno como materia prima ya que se encuentra al 50% de concentración, pero luego de la reacción su concentración disminuye a menos del 15%, valor en el cual es soportado por el PRFV sin consecuencias. Por lo anterior se elige trabajar con PRFV para el tanque de dilución. [31]

Es necesario aclarar también que el proceso de dilución se podría llevar a cabo en el reactor y ahorrarse el tanque de dilución, pero esto implicaría construir un reactor de un tamaño mucho mayor al que se va a utilizar verdaderamente para la reacción, lo cual generaría altos costos de capital y se podrían presentar mayores pérdidas de energía. Además al hacer éste proceso de dilución en un tanque aparte, se está desocupando el reactor, dejándolo disponible para un nuevo batch mientras se termina el primero en otra etapa, reduciendo así el tiempo de ciclo y aumentando la producción.

En esta etapa, como en todas las demás, es importante contar con un sistema de alivio de presión que permita evacuar los vapores generados en la dilución o en una eventual descomposición del producto. En el anexo 1 se presenta la hoja de especificación correspondiente.

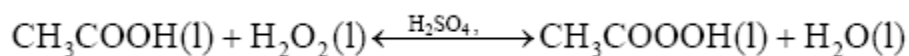
10.4.5 Fuente y sumidero de calor. Para calentar el reactor se eligió vapor de baja presión, ya que es un servicio industrial muy común que cumple con las características del proceso. La presión del vapor es de 3 barg y su temperatura es de 133°C y proviene de una caldera en circuito cerrado.

La caldera seleccionada es horizontal, de tipo pirotubular, operada a gas o ACPM y de baja capacidad, como la ofrecida en el mercado local por Calderas JCT. Dicha elección se debe a que cumple con los requerimientos del proceso, a que no se requieren presiones muy altas y se asegura alta eficiencia térmica. En el ciclo cerrado debe usarse agua desionizada y desoxigenada, para evitar la corrosión, la generación de espuma y el encostramiento de la caldera y de la red de vapor que pueda afectar el rendimiento de proceso de intercambio. El control del flujo de vapor en el serpentín se hace mediante una termocupla que está en contacto con la mezcla reaccionante y controla una válvula en la línea de vapor como se muestra en el PFD.

Para retirar calor del sistema se utiliza agua de enfriamiento, que proviene de una torre de enfriamiento por un circuito cerrado. El agua que sale de la torre, se utiliza en el proceso y vuelve a la torre para ser enfriada. En este caso se usa una torre de enfriamiento a contraflujo de tiro inducido por su mayor eficiencia, ventajas técnicas y económicas sobre las de tiro forzado. Además cumple con los requerimientos de temperatura de salida del agua necesarios para mantener la reacción a 40°C y cumple con la demanda de agua del proceso sin ser de gran tamaño. Tienen empaquetadura de PVC generalmente, con alta resistencia al taponamiento. Se usan ventiladores axiales en vez de centrífugos ya que los primeros son más eficientes, aunque generan más ruido (el ruido no afecta ya que no está ubicada en un espacio cerrado). Las tomas de aire deben estar provistas de rejillas o filtros que eviten las impurezas de gran tamaño, ya que las más pequeñas se “lavan” cuando entran en contacto con el agua. El agua, ya que se encuentra dentro de un circuito cerrado deberá estar desinfectada para evitar problemas de obstrucción y algas que afecten el intercambio de calor. El control del flujo se hace de manera similar al de la línea de vapor, con una termocupla que controla el flujo de agua, dependiendo de los requerimientos de temperatura de la reacción.

10.5 DISEÑO DE EQUIPOS

10.5.1 Reactor Batch [23]



- **Balance molar**

Entradas – Salidas + Generación = Acumulación

$$\text{Entradas} - \text{Salidas} + \text{Generación} = \frac{dN_A}{dt} \quad (9); \quad \text{Generación} = \int_V \gamma_A * dV \quad (10)$$

Se asume agitación perfecta, es decir $-\gamma_A$ es independiente del volumen de reacción, por lo que:

~~$$\text{Entradas} - \text{Salidas} + \gamma_A * V = \frac{dN_A}{dt}$$~~

Introduciendo el término de conversión de H_2O_2 se tiene:

$$X = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}} \quad (11) \quad ; \quad N_A = N_{A0}(1 - X) \quad (12)$$

Considerando que la reacción es en fase líquida por lo que $V = \text{constante}$ (fluido incompresible) y ρ (densidad) no cambia en función de la temperatura e introduciendo el término de conversión, se tiene:

$$\gamma_A * V = -N_{A0} \frac{dX}{dt} \quad (13) \quad \text{Ecuación de balance molar para reactor Batch. [23]}$$

- **Cinética**

El cálculo de la cinética se muestra en el capítulo 9.

$$\gamma_A = -0.00011 * C_B^1 * C_A^2 \quad (14)$$

- **Estequiometría**

Es importante recordar que con respecto al volumen de reacción, $V = V_0$ por ser un fluido incompresible y aunque el fluido va cambiando, dicho cambio se considera despreciable. A continuación se muestra la tabla estequiométrica. [24]

Tabla 21. Tabla estequiométrica

ESPECIE - SIMBOLO	MOLES QUE ENTRAN	MOLES QUE REACCIONAN	MOLES QUE SALEN	Ci
$H_2O_2 - A$	N_{A0}	$-N_{A0} * X$	$N_A = N_{A0} * (1 - X)$	$C_A = N_A / V_0 = C_{A0} * (1 - X)$
$CH_3COOH - B$	N_{A0}	$-N_{A0} * X$	$N_B = N_{A0} * (1 - X)$	$C_A = N_A / V_0 = C_{A0} * (X)$
$CH_3COOOH - C$	0	$N_{A0} * X$	$N_C = N_{A0} * (X)$	$C_A = N_A / V_0 = C_{A0} * (1 - X)$
$H_2O - D$	$1.889 * N_{A0} + 0.0337 * N_{A0} + 0.0043 * N_{A0} = 1.927 N_{A0}$	$N_{A0} * X$	$N_D = N_{A0} * (1.927 + X)$	$C_A = N_A / V_0 = C_{A0} * (1.927 + X)$

- **Balance energía**

La ecuación (15) describe el balance de energía particular para un reactor tipo Batch en el cual es necesario tener en cuenta el calor removido a través de la chaqueta y el calor liberado por la reacción de carácter exotérmica. [23]

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\overbrace{(-\gamma_A V) * (-\Delta H_{RXN})}^{\text{Calor generado}} - \overbrace{Ua(T - T_a)}^{\text{Calor removido}}}{\sum N_i * Cp_i} \quad (15)$$

Los valores de $-\Delta H_{RXN}$ y Cp_i fueron tomados del software Aspen y Aspen Batch y se reportan a continuación.

Tabla 22. Capacidad Calorífica a una temperatura de 25°C

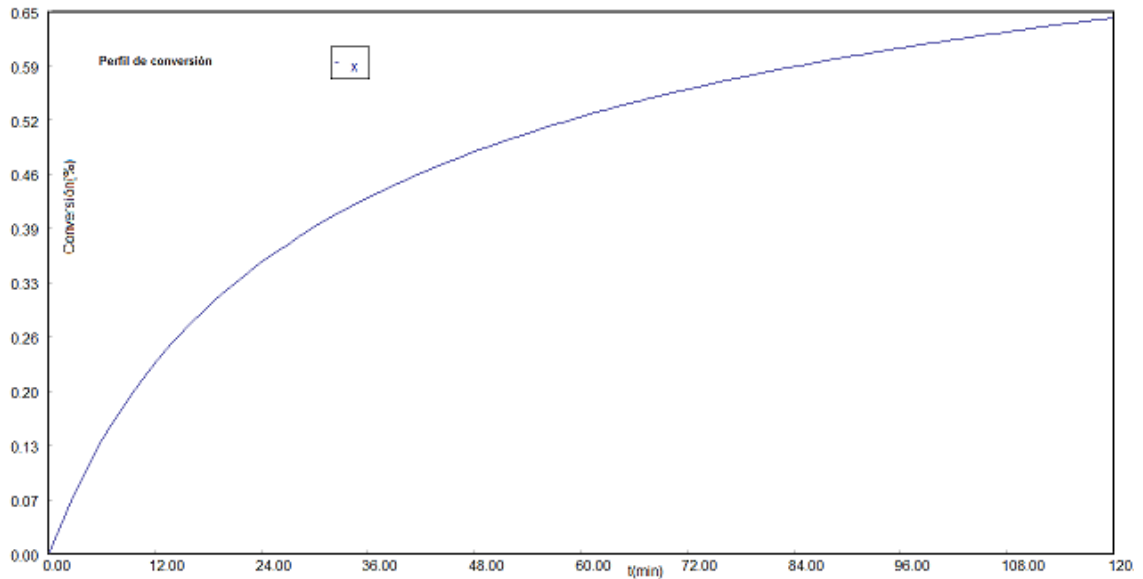
ESPECIE - SIMBOLO	Cp (kJ/kmol.°C)
H ₂ O ₂ - A	99.81
CH ₃ COOH - B	90.96
CH ₃ COOOH - C	159.6
H ₂ O - D	75.71
H ₂ SO ₄ - I	130.8

$$-\Delta H_{RXN} = -11900 \text{ kJ/kmol}$$

Como el calor generado por la exotermicidad de la reacción debe ser igual al calor removido por el fluido de enfriamiento que pasa por la chaqueta para que se cumpla la condición de isotermicidad de la reacción, se puede igualar a cero la derivada de T con respecto a t y despejar el término correspondiente a la remoción, con el fin de determinar el servicio industrial y sus condiciones de uso.

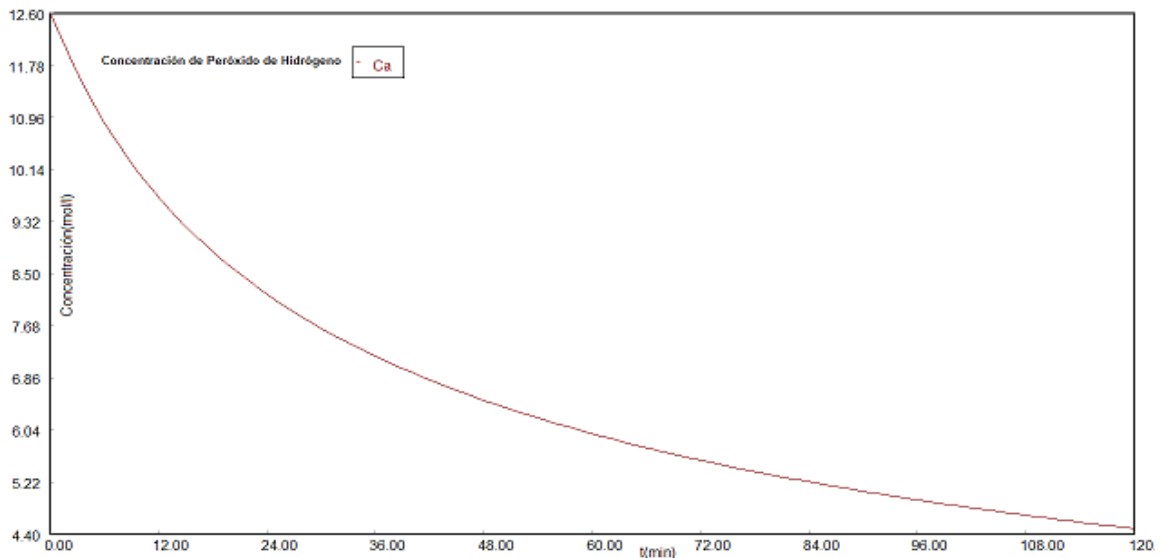
Con los datos anteriormente descritos, se resuelve el conjunto de ecuaciones encontradas durante el estudio del proceso de producción de ácido peracético en particular por medio del software Polymath. Los resultados se presentan a continuación.

Figura 20. Perfil de conversión



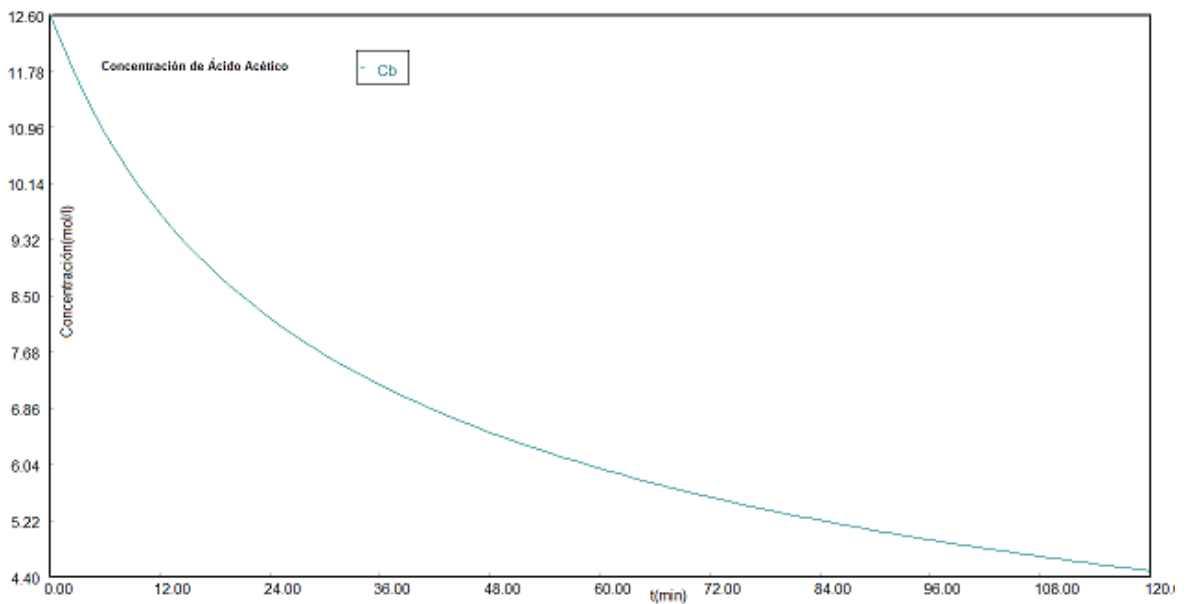
El perfil de composición muestra que, a pesar de lograr la conversión deseada en el tiempo indicado, la curva aún se encuentra en ascenso y podría obtenerse algo más de producto si se deja reaccionar por más tiempo. Debido a que el modelo cinético se desarrolló para 120 minutos como consecuencia de los resultados obtenidos experimentalmente (se obtuvo una conversión de 63% comparada con el 67% final, luego de 6 horas), no es confiable utilizarlo para predecir los resultados que se puedan dar por encima de dicho tiempo, ya que la ley cinética puede variar por la condición de reversibilidad de la reacción.

Figura 21. Perfil de concentración de peróxido de hidrógeno



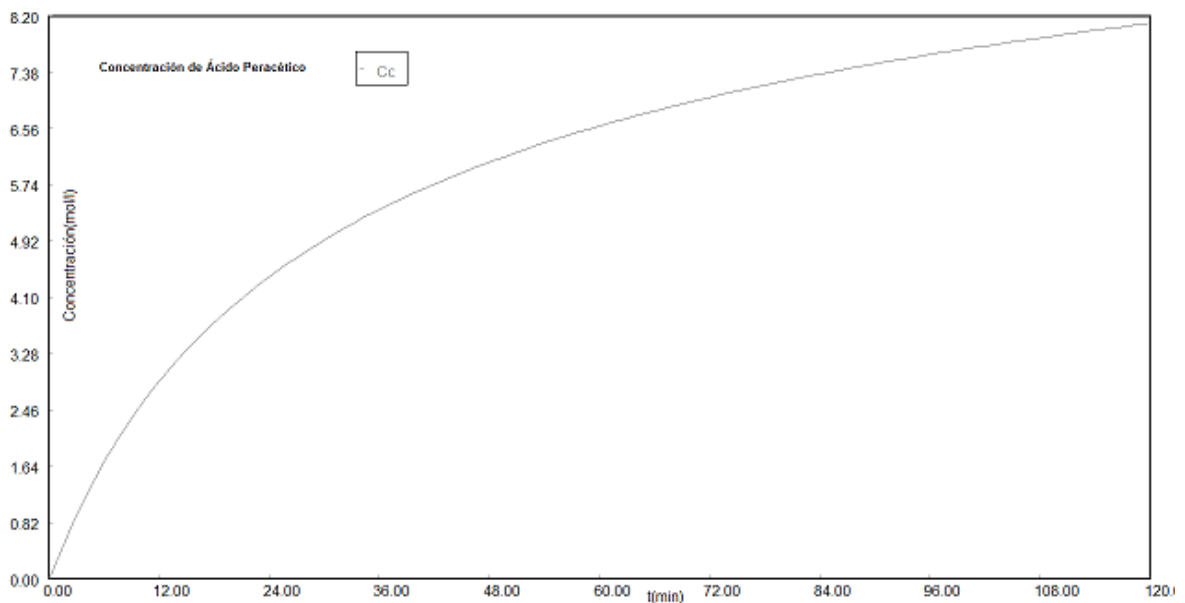
El perfil de concentración de peróxido de hidrógeno muestra como disminuye la concentración a medida que transcurre el tiempo de reacción hasta llegar a un valor mínimo (4.49 mol/l) similar al obtenido experimentalmente (4.09 mol/l), con una desviación del modelo de 9.7% con respecto a los datos reales.

Figura 22. Perfil de concentración de ácido acético



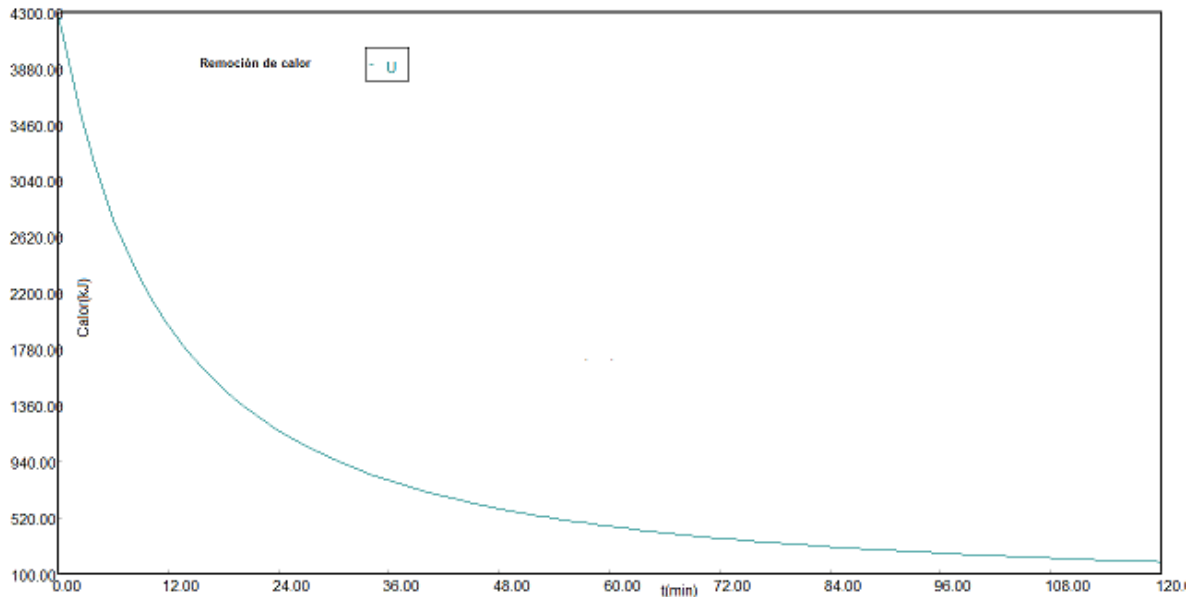
La concentración de ácido acético también varía de forma similar a la concentración del peróxido, ya que se encuentran en cantidades equimolares y se consumen de esta misma manera.

Figura 23. Perfil de concentración de ácido peracético



De igual manera, el perfil de concentración del producto deseado aumenta en el tiempo y se comporta de manera similar a lo observado experimentalmente hasta los 120 minutos.

Figura 24. Remoción de calor del sistema



La gráfica anterior, muestra el perfil correspondiente al término de generación y remoción de calor. Como se desea controlar la temperatura de la mezcla reaccionante para que dicha reacción se lleve a cabo de manera isotérmica a 40°C, es necesario remover el calor generado por el término $-\Delta H_{RXN}$. El calor que éste genera es directamente proporcional a la velocidad de reacción como se mostró en la ecuación (15) por lo que tiene una magnitud mayor durante la primera hora de reacción. El calor total removido durante los 120 minutos es de -64278.89 kJ.

Con los anteriores resultados es posible especificar algunas de las condiciones y características que debe tener el reactor y se muestran en el anexo 2.

10.5.2. Bombas. Las bombas requeridas para el proceso fueron calculadas con la heurística tomada de la tabla 9.9 del libro de Turton. [25]

$$Potencia(KW) = \frac{1.67 * Flujo(m^3 / min) * \Delta P(Bar)}{\varepsilon} \quad (16)$$

$$H = \frac{\Delta P}{\rho * g} \quad (17)$$
 Donde H es la cabeza de la bomba en metros, ΔP en pascales, la densidad en kg/m^3 y la aceleración de la gravedad 9.8m/s^2 .

Los resultados se muestran en la Tabla 23.

Tabla 23. Características de las bombas

Bomba	Fluido	Densidad mezcla (Kg/m3)	ΔP (Pa)	H (m)	Caudal (m3/min)	Eficiencia	Potencia (KW)
P-101	Ácido Acético	1045	100000	9.76	0.0498	0.45	0.1848
P-102	Ácido Sulfúrico	1800	100000	5.67	0.0038	0.45	0.0140
P-103	Peróxido de Hidrógeno	1200	100000	8.50	0.0405	0.45	0.1503
P-104	NaOH	1525	100000	6.69	0.0073	0.45	0.0272
P-105	PAA 36%	1099	100000	9.28	0.0414	0.45	0.1537
P-106	Agua	1000	100000	10.20	0.0775	0.45	0.2876

Los caudales requeridos fueron tomados de la cantidad y el tiempo de carga establecidos en la receta del proceso. El ΔP es estimado, y se define un valor relativamente bajo debido a que el fluido no tiene que vencer alturas significativas ni grandes tramos de tubería.

Las hojas de especificación para cada bomba se presentan en el anexo 3.

10.5.3 Tanques de proceso. Los datos de los tanques en su mayoría fueron suministrados por cada proveedor. Su forma y orientación, cumplen con ciertos requerimientos para el almacenamiento y seguridad de los compuestos empleados. En el anexo 1 se muestran los resultados obtenidos.

10.5.4 Caldera. Los requerimientos energéticos de vapor para el proceso fueron calculados mediante balances de energía. Los datos de construcción y operación de la caldera fueron suministrados por el proveedor (JCT).

Para calentar la mezcla inicial de ácido acético y ácido sulfúrico a la temperatura deseada (40°C) se necesita una carga térmica de 17248 KJ durante 40 minutos. El servicio industrial seleccionado es vapor de baja presión (3 bar, 133°C), ya que es un servicio muy común y fácil de producir. Es necesario, entonces, calcular la cantidad de vapor para suplir la demanda energética del calentamiento mediante un balance de energía: [32]

$$Q = \dot{m} * \Delta H_{vap} \quad (18)$$

Donde Q es el calor en KJ/s, \dot{m} el flujo másico de vapor requerido en Kg/s y $\Delta H_{vap}=2162\text{KJ/Kg}$. El flujo de vapor requerido es de 0.0033 Kg/s o 12 Kg/h.

Mientras se adiciona el segundo reactivo (peróxido de hidrógeno) a la mezcla, es necesario nuevamente mantener la temperatura en 40°C por lo que se debe aumentar el flujo de vapor. Análogo a lo anterior, la carga térmica es de 29856 KJ durante 12 minutos que dura la carga del reactivo. El flujo de vapor requerido en esta etapa es de 0.19 Kg/s o 69.04 Kg/h. Este último valor sería el requerimiento máximo de vapor del proceso.

Con los datos anteriores, se seleccionó la caldera mas apropiada. Los datos se muestran en el anexo 4.

10.5.5 Torre de enfriamiento. El requerimiento total de remoción de calor durante los 120 minutos de reacción es de -64278.89 KJ. Para la torre de enfriamiento se calculó el flujo máximo de agua necesario en el punto de máxima generación de energía que ocurre en los primeros minutos de la reacción como se vio anteriormente (ver sección 10.5.1). Durante los 10 primeros minutos de la reacción se producen 23737.26 KJ que deben ser removidos para evitar el aumento de la temperatura. Con balance de energía se calcula la demanda de agua de enfriamiento durante dicho periodo de la siguiente manera: [32]

$$Q = \dot{m} * C_p * \Delta T \quad (19)$$

Donde Q es el calor generado por la reacción en KJ/s, \dot{m} es el flujo másico de agua de enfriamiento requerido en Kg/s, C_p la capacidad calorífica en KJ/Kg °C y ΔT es la diferencia entre la temperatura de entrada y salida del agua definidas en la sección 10.3 (10°C). De acuerdo a lo anterior y haciendo la conversión correspondiente, el caudal de agua requerido en los 10 primeros minutos es de 15GPM. Luego de este tiempo, la generación de calor en la reacción decrece lo que hace que el requerimiento de agua sea menor (2.3 GPM promedio en los restantes 110 minutos).

Una breve descripción de la torre de enfriamiento se muestra en el anexo 5.

11. EVALUACIÓN DEL PROCESO

11.1 EVALUACIÓN AMBIENTAL

El proceso de producción de ácido peracético es relativamente limpio con el ambiente. Dentro de sus operaciones no se encuentran descargas significativas de material residual que pueda ser contaminante.

En cuanto a vertimientos líquidos, basta con tener en cuenta las precauciones necesarias para evitar derrames accidentales de los productos y las materias primas ya que no se presentan proceso de filtración, destilación u otro tipo de proceso que genere desperdicios.

Los residuos de este tipo que se generen no deben ser desechados al alcantarillado directamente, ya que allí pueden entrar en contacto con sustancias incompatibles que aceleren su descomposición, produciendo grandes cantidades de oxígeno (en el caso del peróxido y del peracético) que pueden aumentar el riesgo de explosión. Antes de disponerlos, es necesario diluir con abundante agua y ajustarse a las normas de disposición de residuos especiales que aparece en la resolución 2309 de 1986 del Ministerio de salud. En el caso del Ácido sulfúrico es necesario neutralizarlo primero antes de disponerlo según la legislación (generalmente estos residuos deben incinerarse).

Otro aspecto ambiental importante que tiene que ver con el proceso son los vapores generados por la descomposición autoacelerada de las materias primas y producto generada por contaminación, por largos periodos de almacenamiento o condiciones no apropiadas (mencionadas en la sección 11.2) o por condiciones anormales del proceso. Para evitar riesgos por la generación de dichos vapores es necesario instalar sistemas de alivio de presión y escape de vapores en los tanques de almacenamiento y en las tuberías y equipos de proceso. Dichos vapores pueden ser recolectados en recipientes con agua ya que su contacto no reviste ningún peligro y generaría un simple burbujeo. El agua debe ser cambiada periódicamente, según vayan cambiando sus características y el residuo generado debe disponerse de acuerdo a la normatividad de aguas que rige localmente, ya que la concentración de sustancias peligrosas no es suficientemente alta para considerarlo un residuo especial.

Es difícil cuantificar la cantidad de vapores que se van a generar, ya que su producción depende de condiciones indeseadas del proceso y no de él directamente. Es necesario hacer un monitoreo y evaluación de dichos desperdicios una vez se empieza a operar la planta. [27,28]

11.2 EVALUACIÓN DE SEGURIDAD

11.2.1 Riesgos a la salud. Durante el proceso de producción del ácido peracético es necesario que cada operario o persona que entre en contacto con él, cuente con un completo equipo de seguridad personal, donde deben incluirse artículos como guantes de neopreno, anteojos químicos de seguridad, delantal, calzado de neopreno o caucho y equipo de respiración autónoma con el fin de evitar la irritación al contacto con la piel, ojos y vías respiratorias. La clave para cualquier derrame, incendio o accidente es tener a la mano abundante agua, en el caso de un derrame o incendio se debe tratar con agua en *spray* para evitar la generación descontrolada de vapores tóxicos y explosivos. [27]

Es importante tener en cuenta que en ningún momento deben inhalarse los vapores producidos por la descomposición de materias primas y/o por la degradación del producto. Para ello debe, además de brindarse un completo equipo de seguridad y capacitación completa en su labor, contar tanto en los tanques de almacenamiento y de proceso, como en los tramos de tubería, un dispositivo de venteo que evite que el sistema se presurice por dicha generación.

11.2.2 Seguridad industrial. Para el correcto almacenamiento de materias primas y producto, es necesario tener en cuenta las normas básicas de cada materia prima según su tipo. El proceso en general debe estar diseñado de modo que las sustancias no queden totalmente encerradas, por lo que debe colocarse válvulas de alivio de presión entre las válvulas del sistema de tuberías y las válvulas de bola deben estar ventiladas.

Los contenedores/recipientes de ácido peracético deben disponer de un sistema adecuado de venteo para manejar las transferencias rutinarias de producto y deben estar correctamente marcadas para impedir que se coloque alguna sustancia química equivocada que pueda generar otra reacción indeseable o acelerar la descomposición de producto y hasta evitar una explosión. Este sistema evita que los contaminantes del aire tengan acceso a la solución de peracético, minimizando a la vez la exposición de vapores al personal. Se debe tomar precauciones para evitar el flujo de retorno de corrientes de proceso de peracético.

La estabilidad del producto se mantiene debido al cuidado en la manipulación y el almacenamiento, esta se ve afectada por factores como la temperatura, iones metálicos y la descomposición auto acelerada. Por lo que es muy importante mantener limpios los equipos de proceso y almacenamiento

En cuanto al almacenamiento, el producto se debe almacenar diluido y a temperaturas inferiores de 30°C, en un lugar seco, limpio, y con buena ventilación, alejado de fuentes de calor y agentes reductores, combustibles y otras sustancias no compatibles. La presencia de iones metálicos tales como el hierro, cobalto, níquel, cobre, zinc, cromo y manganeso catalizan la descomposición del ácido peracético. Tanto la temperatura como la contaminación pueden inducir una descomposición auto acelerada del ácido peracético. Este comportamiento es característico de los compuestos peroxigénicos. Una vez descompuesto, se degrada en compuestos inocuos por lo que no afecta al medio ambiente.

Las materias primas y el producto terminado deben almacenarse cuidadosamente no sólo con respecto a la temperatura, sino a la separación física ya que algunas de las sustancias empleadas son incompatibles; deben estar correctamente separados entre agentes oxidantes y reductores para evitar reacciones indeseadas. Es necesario evitar la luz del sol directa sobre las sustancias y no se recomienda el uso de estibas de madera en el almacenamiento. [27,28]

11.3 CONTROLES DE CALIDAD

El control tanto del proceso como del producto no es muy complejo. Lo más importante es asegurar que durante el periodo de reacción se mantenga la temperatura en 40°C, para obtener buen rendimiento de la reacción. Igualmente se debe hacer un análisis del producto obtenido luego de dicho tiempo ya que la concentración puede oscilar en un rango de 0.2-0.5% aproximadamente. La cantidad de agua adicionada en la dilución también es un factor importante para asegurar que el producto final va a tener las características que se quiere (15%PAA).

En cuanto al producto, es necesario hacer un seguimiento continuo de su concentración, ya que si se deja almacenado durante largos periodos o en condiciones inapropiadas, puede disminuir su concentración de ácido peracético. La cantidad de peróxido de hidrógeno y ácido acético presentes no es un factor muy determinante ya que dichas sustancias ayudan a darle poder desinfectante y blanqueador al producto, sin embargo, algunas empresas los controlan.

12. EVALUACION ECONÓMICA DEL PROYECTO

12.1 INVERSIÓN DE CAPITAL

El costo total de la inversión inicial se calcula por el método de porcentaje de costo de compra de los equipos. Este método es comúnmente utilizado para estimativos y estudios preliminares. El método utiliza como base el costo total de compra de los equipos y estima el costo de los demás componente de la inversión total mediante porcentajes promedios calculados con base en el tipo de proceso, equipos y complejidad del diseño. Dichos rangos de porcentaje se encuentran en el capítulo 6 del libro de Peters y Timmerhaus. A continuación se especifica cada ítem y el porcentaje seleccionado. [33]

12.1.1 Costos directos de capital.

- **Costo de compra.** Este costo corresponde a valores reales suministrados por los proveedores en Abril de 2009. La capacidad requerida, en el caso de los tanques, equivale a la demanda mensual de cada producto, debido que, por facilidades de transporte y rendimiento del proceso, no es adecuado tener las materias primas almacenadas durante más tiempo; el tanque de producto terminado se estimó para almacenar la producción de una semana; en el caso de los demás equipos (bombas, caldera, y torre de enfriamiento) corresponde a las necesidades del proceso. La capacidad disponible es la que ofrece cada proveedor. Tanto el ácido sulfúrico como el hidróxido de sodio se almacenan en canecas por facilidad de manejo, ya que no son grandes cantidades (1000 y 2000 litros mensuales aproximadamente). En la tabla 24 se muestran los costos y su respectivo proveedor. [33]
- **Costo de instalación.** Los rangos de porcentaje correspondiente al costo de instalación varían dependiendo del tipo de equipo. Para los equipos empleados se reportan rangos entre el 25 y 60 % del costo de compra del equipo. La instalación del equipo incluye costos de mano de obra, bases, soportes, plataforma, gastos de construcción y otros gastos relacionados. Este porcentaje depende de la complejidad y de cuantos de estos gastos implica cada equipo. Para los equipos mencionados en la tabla anterior se tomó un valor del 30 % debido a que no son equipos muy complejos. [33]

Tabla 24. Costo y proveedores de equipos.

Equipo	Capacidad requerida	Capacidad disponible	Material	Costo	Proveedor
Tanque de almacenamiento H ₂ O ₂	24.3 m ³	30 m ³	PRFV con recubrimiento	20,300,000	Fibratore
Tanque de almacenamiento HAc	21.7m ³	30 m ³	PRFV	7,719,800	Fibratore
TK-101 (HAc)	1.1 m ³	2 m ³	PRFV	1,436,080	Fibratore
TK-102 (H ₂ SO ₄)	0.04 m ³	0.1 m ³	Acero al Carbón	240,000	Doblaco
TK-103 (H ₂ O ₂)	1.17 m ³	2 m ³	PRFV con recubrimiento	1,798,000	Fibratore
TK-104 (NaOH)	0.74 m ³	0.1 m ³	PRFV	255,200	Fibratore
TK-105 (Dilución)	2.6 m ³	4 m ³	PRFV	2,456,800	Fibratore
R-101	1m ³	1.2 m ³	Acero inoxidable 316L pasivado	9,200,000	Inoxidables de Colombia
Tanque de almacenamiento de producto terminado (PAA 15%)	26 m ³	30 m ³	PRFV	7,719,800	Fibratore
Torre de Enfriamiento	15 GPM	20 GPM	-	5,000,000	Glaciar
Caldera	3 BHP	5BHP	-	15,080,000	JCT
P-101	13.2 GPM	13.2 GPM	Polipropileno	1,500,000	Almacen Bombas
P-102	1.1 GPM	1.1 GPM	Polipropileno	1,500,000	Almacen Bombas
P-103	10.8 GPM	10.8 GPM	Polipropileno	1,500,000	Almacen Bombas
P-104	2.1 GPM	2.1 GPM	Polipropileno	1,500,000	Almacen Bombas
P-105	13.2 GPM	13.2 GPM	Kynar (PVDF)	2,770,000	Almacen Bombas
P-106	20.4 GPM	20.4 GPM	Hierro Fundido	200,000	Vulcano
COSTO TOTAL EQUIPOS				80,175,680	

- **Costos de instrumentación y control.** Análogo a lo anterior el porcentaje varia entre el 6 y el 30 % del costo de compra. Incluye los costos de instrumentación, mano de obra y gastos de equipos y materiales necesarios para la instalación. Se elige un valor del 10 % ya que los equipos sólo requieren instrumentación básica. [33]
- **Tuberías.** Incluye mano de obra, válvulas, tubos, soportes y accesorios requeridos para el montaje de la red de tuberías del proceso. El valor de este varía dependiendo del tipo de proceso. Para un proceso donde solo involucra el transporte de líquidos, Peters y Timmerhaus sugieren trabajar con un valor de 60% del costo total de compra de los equipos. Sin embargo, para este caso dicho porcentaje es alto si se considera que el proceso no requiere de instalaciones complejas y que todo el sistema de tuberías de proceso puede hacerse en PVC que resiste las condiciones y es económico. Se estima para este caso que puede ser el 10% del costo total. [33]
- **Instalaciones eléctricas.** El costo incluye mano de obra y materiales para la instalación de iluminación y tomas de energía en general. El rango esta entre el 10 y 15 % del costo total de compra de los equipos. Se elige trabajar con el 10% ya que se trata de una planta pequeña. [33]

- **Servicios generales.** En este ítem se incluyen los equipos contra incendios, de seguridad, primeros auxilios y gastos de disposición de residuos. Para plantas pequeñas de un solo producto se sugiere un valor del 6% del costo de compra de los equipos. [33]

En la tabla 25 se muestran el costo directo total calculado de la manera anteriormente mencionada.

Tabla 25. Costos Directos

Item	Porcentaje	Costo
Instalación	30	24,000,000
Instrumentación y Control	10	8,000,000
Tuberías	10	8,000,000
Instalaciones Eléctricas	10	8,000,000
Servicios Generales	6	4,000,000
	TOTAL	52,000,000

12.1.2 Costos indirectos de capital.

- **Ingeniería y supervisión.** Aquí se incluyen los costos en general de diseño de la planta. Se recomienda un valor de 18 % del costo de compra de los equipos. [33]
- **Gastos de adecuación.** Se elige trabajar en un edificio construido, no se tienen en cuenta costo de terreno ni de construcción de edificios, pero es necesario considerar el costo de adecuación de dicho edificio (arrendado). El valor elegido para este es del 10 % por el tipo de inversiones requeridas (herramientas, impuestos, materiales y mano de obra de construcción temporal). [33]
- **Honorarios y contingencias.** Aquí se consideran los honorarios del contratista y un estimativo de inversión inicial para compensar eventos inesperados (inundaciones, pequeños cambios en diseños o errores en estimativos). El valor elegido es del 10 %. [33]

En la tabla 26 se muestran el costo indirecto total calculado de la manera anteriormente mencionada.

Tabla 26. Costos Indirectos

Item	Porcentaje	Costo
Ingeniería y Supervisión	18	15,000,000
Gastos de Adecuación	10	8,000,000
Honorarios y Contingencias	10	8,000,000
	TOTAL	31,000,000

La inversión total de capital fijo (FCI) calculada anteriormente (costos directos+costos indirectos) es de \$164 millones de pesos.

12.2 CAPITAL DE TRABAJO

Este capital es el dinero invertido en la compra de materias primas, suministros, producto terminado e inventario, las cuentas por cobrar, salarios e impuestos. Se sugiere que este costo sea el necesario para la operación del proceso durante uno o dos meses y normalmente esta entre el 10 y 20 % de la inversión total de capital. Otra manera de estimarlo es calculando el costo total de producción y administración durante los dos meses que se va a tener capital de trabajo mientras se reciben los primeros ingresos por ventas (aproximadamente se pagan a 60 días). El costo de capital de trabajo es de \$246 millones y se toma como una inversión al inicio de cada periodo, que se recupera al final del tiempo de vida útil del proyecto. [33]

12.3 COSTOS DE MANUFACTURA

En estos se incluyen todos los costos directamente relacionados con el proceso de producción. Se calcula para cada año y esta dividido en tres secciones así. [25,33]

12.3.1 Costos directos de producción. Estos representan los costos que varían con el flujo de producción, entre los que se incluyen las materias primas y sus costos de transporte, tratamiento de desechos, mano de obra directa, supervisión, mantenimiento, reparación, servicios industriales, laboratorio y suministros de operación. En la siguiente tabla se aprecia el cálculo de este costo.

Tabla 27. Costos directos de producción

Materias primas		
	precio kilo	\$/año
Ácido Sulfúrico	952.14	16,300,000
Ácido Acético	2,836.91	738,000,000
Peroxido de Hidrogeno	2,294.00	669,000,000
Hidróxido de Sodio	1,914.00	54,000,000
Agua	1.02	790,000
TOTAL		1,478,090,000

Servicios Industriales		
	precio/kilo	\$/año
Vapor de baja presión	30.64	330,000
Agua de enfriamiento	0.04	30,000
TOTAL		360,000

Cargos de Laboratorio	
TOTAL	5,000,000

Mano de Obra		
Personal		Salario básico
Operarios	3	497,000
Carga prestacional	52%	258,440
Costo mano obra (\$/año)		27,195,840

Administración-Ingeniería y Personal de Soporte	
TOTAL	5,000,000

Mantenimiento y Reparaciones	
TOTAL	10,000,000

Suministros de Funcionamiento	
TOTAL	1,500,000

El costo de las materias primas es reportado por cada uno de los posibles proveedores: Electroquímica (peróxido de hidrógeno), Industria básica de caldas (ácido sulfúrico), Sucromiles (ácido acético), Colquímicos (hidróxido de sodio) en el mes de Abril del año 2009.

El costo de los servicios industriales se calcula basándose en el requerimiento energético del proceso y los valores reportados en la tabla 6.3 del libro de Turton. [25]

Los costos de cargos por laboratorio, mano de obra directa (incluyendo número de operarios), administración, transporte y personal de soporte, mantenimiento y repuestos y los suministros de funcionamiento se estiman por el método descrito en la tabla 6.2 libro de Turton y el capítulo 6 del libro de Timmerhaus. Los operarios se ocupan de la siguiente forma: Encargado de materias primas, encargado del reactor, encargado de servicios industriales, laboratorio y mantenimiento. [25,33]

12.3.2 Costo fijo de manufactura. Estos costos son independientes del cambio en el flujo de producción, en este se incluyen los impuestos, seguros y la depreciación.

Tabla 28. Costo fijo de manufactura

Depreciación		Impuestos y Seguro	
TOTAL	8,017,568	TOTAL	5,233,868

La depreciación se halla por el método de línea recta sobre la maquinaria y equipo (10 años). Los impuestos y el seguro necesarios para el proceso se estiman como un porcentaje de la inversión de capital fijo. [25]

12.3.3 Gastos generales. Estos gastos incluyen el manejo, ventas y financiación del proceso. Estos varían rara vez con el nivel de producción.

Tabla 29. Gastos generales

Costo Administrativo		Distribución y Costo de Venta		Investigación y Desarrollo	
TOTAL	6,285,689	TOTAL	213,147,388	TOTAL	96,885,176

Los costos de administración son estimados como un porcentaje de la inversión de capital fijo y la mano de obra directa. El costo de investigación y desarrollo, la distribución y el costo de venta se hallan como un porcentaje del costo directo de manufactura.

Costo de manufactura = costos directos de manufactura + costos fijos + gastos generales

$$\text{COM} = 1,937 \text{ millones de pesos/año}$$

12.4 ESTIMACIÓN FLUJO DE EFECTIVO

Para el cálculo del flujo de efectivo del proyecto, se realizó el siguiente procedimiento: Con la inversión de capital hallada, financiada en un 70% y con los costos de manufactura calculados por el método descrito anteriormente, se calcula el flujo de caja del proyecto a 5 años. El precio de venta se fija en \$5.000 por

kilogramo, que equivale a la mitad del precio que se consigue en el mercado que es de 12.000 \$/kg.

Inicialmente se supone que se va a vender toda la producción, ya que al no tener datos de mercado concretos, no se puede determinar una demanda estimada. La tasa de descuento con la cual se traen los flujos netos de efectivo al presente para hallar el VPN, se calcula de la siguiente manera.

$$k'_0 = k_{ex} * (\%recursospropios) + k_d * (1 - t) * (\%deuda) \quad (20)$$

donde k'_0 es la tasa de descuento neta efectiva, k_{ex} la tasa de oportunidad que se define con las expectativas de los inversionistas, t es el impuesto de renta definido como 32% de la utilidad antes de impuesto y k_d es la tasa de interés promedio de un préstamo. [34]

Todos los flujos de caja son estimados.

Tabla 30. Flujo de efectivo del proyecto a 5 años

Concepto	0	1	2	3	4	5
Ingresos afectos a impuestos (Ventas)		6,850,000,000	7,335,151,250	7,854,663,337	8,410,969,868	9,006,676,809
Kg vendidos		1,370,000	1,390,550	1,411,408	1,432,579	1,454,068
Precio por kilogramo		5,000	5,275	5,565	5,871	6,194
Costos y gastos		1,937,703,528	2,053,965,739	2,177,203,684	2,307,835,905	2,446,306,059
Valor libros						40,087,840
Depreciacion		8,017,568	8,017,568	8,017,568	8,017,568	8,017,568
Amortizacion		13,000,000	13,000,000	13,000,000	13,000,000	13,000,000
Interés préstamo		92,083,226	73,666,581	55,249,936	36,833,290	18,416,645
UTILIDAD ANTES DE IMPUESTO		4,799,195,678	5,186,501,362	5,601,192,150	6,045,283,105	6,520,936,537
Impuesto (32%)		1,535,742,617	1,659,680,436	1,792,381,488	1,934,490,594	2,086,699,692
UTILIDAD DESPUES DE IMPUESTO		3,263,453,061	3,526,820,926	3,808,810,662	4,110,792,511	4,434,236,845
Depreciaciones		8,017,568	8,017,568	8,017,568	8,017,568	8,017,568
Amortizaciones		13,000,000	13,000,000	13,000,000	13,000,000	13,000,000
Valor libro						40,087,840
Inversion de capital total	469,812,378					
Inversion Fija de Capital	163,558,387					
Inversion Capital De trabajo	246,253,991	246,253,991	246,253,991	246,253,991	246,253,991	
Arrendamiento	60,000,000					
Recuperación Cap. De W.						1,231,269,955
Préstamo	328,868,665					
Amort. Deuda		65,773,733	65,773,733	65,773,733	65,773,733	65,773,733
Flujo efectivo	-140,943,713	2,972,442,905	3,235,810,770	3,517,800,506	3,819,782,356	5,660,838,475

De esta manera, tomando como crecimiento anual de la producción el valor correspondiente a la meta de crecimiento reportada en el banco de la republica, el incremento del precio de venta definido con la meta de inflación reportada por esta misma entidad y siendo las amortizaciones, una aproximación de lo que pueden ser los activos diferidos (costos legales de constitución de la empresa), se tiene que el valor presente neto del proyecto, con una tasa de descuento calculada de 19.33% es igual a \$10,916 millones, lo que indica que el proyecto, evaluándolo de esta manera, es altamente rentable. El periodo de repago de la inversión es de aproximadamente dos meses después de el inicio de la operación en el año 1 y la tasa interna de retorno alcanza un valor de 2117% lo cual es excesivamente alto. De esta manera el costo del producto es aproximadamente del 30% del precio de venta y la utilidad después de impuesto es de aproximadamente 45%. Estos resultados son una referencia de lo rentable que puede llegar a ser el proyecto y refleja un límite superior de lo que puede alcanzar en su mayor capacidad.

Tabla 31. Valor presente neto y tasa de descuento calculados

Tasa de descuento	VPN
19.33%	\$ 10,916,560,887

Debido a lo anterior y a que es posible que no exista tanto mercado para vender 1370 toneladas por año como inicialmente se plantea, se decide calcular el punto de equilibrio para que el proyecto muestre una evaluación financiera positiva al cabo de dos años, periodo prudente para esto. De esta manera, vendiendo aproximadamente 387.5 toneladas el primer año y 389.4 toneladas el segundo año, se alcanza el punto de equilibrio, tomando los costos de la manera como se calcularon anteriormente. Esto indica que el punto de equilibrio se alcanza con una operación del 28% de la capacidad total de la planta. Para alcanzar dicha producción, es necesario trabajar únicamente 72 días al año.

Cabe aclarar que los dos puntos de evaluación anteriores son estimativos para dimensionar la capacidad financiera que pudiese tener el proyecto, ya que con relativamente poca capacidad, se logra obtener buenas utilidades estimadas. Pero para tener una visión clara y concreta de su alcance, sería necesario realizar un estudio de mercado que permita determinar la verdadera demanda y fijar objetivos de producción y venta mucho más reales.

CONCLUSIONES

- La búsqueda bibliográfica y los ensayos de laboratorio permitieron determinar que las variables que podían afectar el proceso de producción de ácido peracético eran la pureza de los reactivos, la temperatura, el porcentaje de catalizador presente en la mezcla, la relación molar de los reactivos y el tiempo de reacción.
- De las variables que se identificaron como posibles, se encontró que la relación molar de reactivos y su tiempo de adición a la mezcla reaccionante no afectaban de manera considerable la producción de ácido peracético, con lo cual se pueden generar ahorros de materia prima, agregándolos en relación estequiométrica sin afectar el rendimiento.
- Los mejores rendimientos de la reacción se lograron manteniendo la mezcla reaccionante a 40°C durante 120 minutos y con un 3% de ácido sulfúrico empleado como catalizador. La conversión alcanzada fue del 63% que corresponde al 98% de la conversión identificada como de equilibrio.
- Con los resultados del estudio en el laboratorio, se identificó y describió el comportamiento aparente de la reacción, determinando una ley cinética que se ajustara a las condiciones estudiadas con el fin de obtener un diseño del proceso apoyado en datos reales.
- Acorde con lo que indica la literatura, el ácido peracético es un compuesto inestable y que tiende a descomponerse en el tiempo si no se agregan sustancias estabilizantes. En este caso, el uso de hidróxido de sodio en relación estequiométrica con el ácido sulfúrico (2 a 1 en exceso de hidróxido de sodio) permitió neutralizar el catalizador y mantener la concentración alcanzada en un valor estable durante dos semanas.
- Según las necesidades del proceso, se identifican 4 tipos de equipos básicos: tanques dosificadores para cada materia prima, un reactor, un tanque de dilución para alcanzar la concentración comercial y los servicios

industriales (caldera y torre de enfriamiento) para mantener el proceso en las condiciones requeridas.

- Es importante, desde el punto de vista de la seguridad, que todos los equipos y tramos de tubería cuenten con dispositivos de venteo o alivio de presión, ya que se generan vapores por la descomposición de las materias primas y productos que pueden alcanzar niveles peligrosos. También es importante contar con la capacitación necesaria y la protección personal cuando se trabaje con éstas sustancias, ya que pueden afectar seriamente la salud si la exposición es muy prolongada.
- Debido a que no se cuenta con datos concretos sobre el posible mercado del producto, se define una base de capacidad con el fin de obtener un estimativo de la viabilidad del proyecto. La producción es de 2740 Kg/batch, trabajando dos batch por día, en un turno de 8 horas. Anualmente se producen 1370 toneladas de ácido peracético, lo cual posiblemente no es fácil vender en un mercado que aún no está muy posicionado en Colombia, por lo que se hace necesario buscar estrategias de entrada para dar a conocer el producto.
- El precio de venta del producto se fija en \$5000 por kilogramo, muy por debajo del que se consigue actualmente en el mercado que es de \$12000 para un producto con características similares, con el fin de tener una estrategia sólida de entrada y competir con los precios de los productos importados que actualmente predominan en la oferta. Aún así, el valor presente neto del proyecto es de \$10.916.560.887 a 5 años, con una tasa de descuento de 19.33% y un periodo de retorno de la inversión de aproximadamente dos meses, lo que indica que el proyecto es altamente rentable en las condiciones en que se diseñó.
- El punto de equilibrio del proyecto se encuentra por las 388 toneladas en promedio durante los dos primeros años, que es equivalente a trabajar únicamente 72 días en el año. Este valor puede dar un mejor estimativo de la capacidad financiera del proyecto, confirmando que a las condiciones diseñadas, es altamente rentable ya que al cabo de algo más de dos meses se recupera la inversión inicial de 164 millones de pesos, que no es muy alta.

RECOMENDACIONES

- Para lograr mejores condiciones de estabilidad del producto, se recomienda evaluar la inclusión de otros estabilizantes diferentes al hidróxido de sodio, que permitan conservar el producto por periodos de tiempo más largos sin perder sus propiedades.
- Se recomienda evaluar la efectividad del producto obtenido a estas condiciones con otros productos similares o que se usen en las mismas aplicaciones y que estén disponibles en el mercado, con el fin de determinar la cantidad apropiada de ácido peracético que se debe utilizar para obtener resultados similares y comparar el rendimiento del producto que puede ser otra ventaja frente a los demás.
- Es importante tener siempre el mayor cuidado y seguir las normas de manipulación del producto y de las materias primas, ya que son sustancias de fácil descomposición y que pueden generar problemas de salud y de seguridad tales como asfixia, irritación o explosiones.
- Con el fin de obtener resultados más concretos sobre la evaluación financiera del proyecto, se recomienda hacer un estudio de mercado exhaustivo, donde se logre determinar la verdadera capacidad del proyecto y comparar los resultados obtenidos con éste estudio para tener un mejor estimativo de la viabilidad financiera del proceso.

BIBLIOGRAFÍA

- [1]. OTHMER, Donald F. y KIRK, Raymond E. Encyclopedia of chemical technology. 4 Ed. New York. John Wiley & sons. 1994. Vol 8, P. 256 – 257. Vol 18, P. 268 – 272.
- [2]. WILEY-VCH. Industrial organic Chemicals: starting materials and intermediates: an Ullmann's encyclopedia. Weinheim. Wiley-VCH. 1999. Vol 6, P. 3641 – 3649.
- [3]. U.S. Environmental protection agency EPA [en línea]. Disponible en Internet: <http://www.epa.gov/>
- [4]. Uses and basic chemistry Peroxyacetic Acid Solutions [En línea]. Disponible en Internet: <http://www.envirotech.com/>
- [5]. TAMINE. A. Cleaning-in-Place: Dairy, Food and Beverage Operations. 3 Ed. Garsington Road, UK. Blackwell Publishing. 2008. P. 255. ISBN: 9781405155038.
- [6]. Corporación química venezolana, CORQUIVEN C.A. Hoja de seguridad (material safety data sheet) ácido peracético. Disponible en Internet: <http://www.corquiven.com.ve/esp/MSDS%5CMSDS-ACIDO_PERACETICO.pdf>
- [7]. SÁNCHEZ RUIZ, Concepción. El ácido peracético como desinfectante. En: Ingeniería química. Vol 028, Número 0320 (Enero, 1996). P.151-158.
- [8]. MALCHESKY, P. 1993, "Peracetic acid and its application to medical instrument sterilization", American Society for Artificial Internal Organs Journal. Vol. 17, P. 147-152.
- [9]. SLATTERY, Gerald Holmes. Preparation of peracetic acid by oxidation of acetaldehyde. June 27, 1978. United States Patent 4097520.

- [10]. POHJANVESI, Seppo; PUKKINEN, Arto; SÖDERVALL, Teemu (2002). Process for the production of peracetic acid. European patent EP 1247802 A1.
- [11]. MALCHESKY, P. LIU, C. MERK, T. Electrolytic synthesis of peracetic acid and other oxidants. June 9, 2001. United States Patent 6171551.
- [12]. MARRIOT, N. GRAVANI, R. Principles of Food Sanitation. Fifth Edition Springer. United States of America. 2006. P. 165-189. ISBN: 978-0387-25025-0.
- [13]. Timsen. Disponible en: <http://www.biologics.com.mx/>
- [14]. AGREDA, V. H. Chemical Industries: Acetic Acid and Its Derivatives. CRC Press. 1993. V 49. P. 3 – 72.
- [15]. DAVENPORT, William G.I.; KING, Matthew J. Sulphuric Acid Manufacture. Elsevier Science, 2005. 425p.
- [16]. CRAIG, Jones W. Applications of hydrogen peroxide and derivatives. Royal Society of Chemistry. 1999. 264p.
- [17]. ESPINOSA, Luis Alberto. Reporte de calidad de agua, Laboratorios control calidad de agua. Empresas públicas de Medellín. 2009. 20p.
- [18]. ZHOUB, Yujie; ZHAO, Xuebing; ZHANG, Ting; LIU, Dehua. Preparation of peracetic acid from hydrogen peroxide Part I: Kinetics for peracetic acid synthesis and hydrolysis. En: Journal of Molecular Catalysis A: Chemical. Vol. 271, (2007); Pages 246-252. [Science Direct Base de datos].
- [19]. VINEYARD. Mark K.; MOISON, Robert L.; BUDDE, Frederic E.; WALTON, John R. Continuous process for on-site and on-demand production of aqueous peracetic acid. March 14, 2006. United States Patent 7012154.
- [20]. Determination of hydrogen peroxide and peracetic acid in solutions. Chemicals Division. Enviro Tech Chemical Services, Inc.

- [21]. DE LA VARA SALAZAR, Román y GUTIERREZ PULIDO, Humberto. Análisis Y Diseño De Experimentos. 2 ed. México: McGraw Hill, 2008. 545p.
- [22]. LENTH, Russell V. Lenth's method for the analysis of unreplicated experiments. University de Iowa. 2006.
- [23]. FOGLER, H. Scott. Elements Of Chemical Reaction Engineering. 4 Ed. Boston: Prentice Hall, 2006. 1080p. ISBN 0130473944.
- [24]. LEVENSPIEL, Octave. Ingeniería De Las Reacciones Químicas. Barcelona: Reverte, 1993. 638p. ISBN 8429173250.
- [25]. TURTON, R; Bailie, R.C; WHITING, W.B; SHAEIWITZ, J.A. Analysis Synthesis and Design of Chemical Processes. 2 edición. Prentice Hall, 2003.
- [26]. WALAS, Stanley M. Reaction kinetics for chemical engineers. New York McGraw - Hill Book Company, 1959. 338p.
- [27]. Safety Data Sheet, Hydrogen Peroxide. Solvay Chemicals. 2001.
- [28]. Ácido peracético FMC. Revisión General de Seguridad del Ácido Peracético (APA) 15/10 y de otras formulaciones de APA utilizadas en aves de corral (Spectrum®), productos cárnicos (Blitz®), frutas y verduras y en VigorOx®. FMC Corporation. 2005.
- [29]. MUKHERJEE, Siddhartha. Pressure-relief system design. En: Chemical Engineering. Noviembre-Diciembre, 2008, vol. 115 no. 12. p 40-45.
- [30]. Center for Chemical Process Safety (CCPS). Guidelines for Pressure Relief and Effluent Handling Systems (Guidelines). WILEY-AIChE. 1998. 540p. ISBN: 0816904766.
- [31]. DOW plásticos. Manual de Ingeniería y Resistencia Química. DOW Chemicals. 1997.

[32]. CENGEL, Yunus A.; BOLES, Michael A. Termodinámica 5 ed. México: McGraw Hill, 2002. 988p. ISBN 9701056116.

[33]. PETERS, Max; TIMMERHAUS, Klaus. Plant design and economics for chemical engineers. 4 Ed. McGraw Hill. 1991. ISBN 0070496137.

[34]. TARQUIN, Anthony J.; BLANK, Leland T. Ingeniería Económica. 4 ed. Santafé De Bogotá: McGraw-Hill, 1999. 722p. ISBN 9586009661.

[35]. WUTZLER, P; SAUERBREI, A. Virucidal efficacy of a combination of 0.2% peracetic acid and 80% (v/v) ethanol (PAA-ethanol) as a potential hand disinfectant. En: Journal of Hospital Infection. Vol. 46, (2000); Pages 304–308. [En línea]. Disponible en Internet: <http://www.idealibrary.com>

[36]. ZHAO, Xuebing; CHENG, Keke; HAO, Junbin; LIU, Dehua. Preparation of peracetic acid from hydrogen peroxide, part II: Kinetics for spontaneous decomposition of peracetic acid in the liquid phase. En: Journal of Molecular Catalysis A: Chemical. Vol. 284, (2008); Pages 58-68. [Science Direct Base de datos.

[37]. BARRIOS PEREZ, José Antonio; JIMÉNEZ CISNEROS, Blanca E.; MAYA RENDÓN, Catalina. Tratamiento ácido de lodos residuales fisicoquímicos para reducir el contenido de microorganismos. XXVIII Congreso Iberoamericano de Ingeniería Sanitaria y Ambiental. Cancún, México. 27-31 de Octubre del 2002.

[38]. INSTITUTO COLOMBIANO DE NORMAS TÉCNICAS. Normas Colombianas para la presentación de trabajos de investigación. Sexta actualización. Bogotá D.C. 2008.

[39]. SWAKI, Yasuhiko; OGATA, Yoshiro. The Kinetics of the Acid-Catalyzed Formation of Peracetic Acid and Hydrogen Peroxide. En: Bulletin of the Chemical Society of Japan. Vol 38. No. 112. (1965). P. 2103-2106.

[40]. ZHANG, Ting; ZHAO, Xuebin; ZHOU, Yu-jie; LIU, De-hua. Preparation of Peracetic Acid from Acetic Acid and Hydrogen Peroxide: Experimentation and Modeling. En: The Chinese Journal of Process Engineering. Vol 8. No 1. (2008). P. 35-41.

ANEXOS

Anexo1. Hoja de especificación de tanques de proceso.

DESCRIPCIÓN EQUIPOS		
TK-101		
Datos de Construcción		
Sustancia	Ácido acético	
Capacidad (m ³)	2	
Diámetro base (m)	1,33	
Diámetro superior (m)	1,4	
Altura (m)	1,12	
Forma	Tronco cónica	
Orientación	Vertical	
Material	PRFV	
Soporte	Metálico	
	Elaboró	Julio Piedrahita, David Suárez
	Revisó	Andrés Ortega
	Fecha	30/03/2009

DESCRIPCIÓN EQUIPOS		
TK-102		
Datos de Construcción		
Sustancia	Ácido sulfúrico	
Capacidad (m ³)	0,1	
Diámetro (m)	0,47	
Altura (m)	0,3	
Forma	Cilíndrico	
Orientación	Vertical	
Material	Acero al Carbón	
Soporte	Metálico	
	Elaboró	Julio Piedrahita, David Suárez
	Revisó	Andrés Ortega
	Fecha	30/03/2009

DESCRIPCIÓN EQUIPOS		
TK-103		
Datos de Construcción		
Sustancia	Peróxido de hidrógeno	
Capacidad (m ³)	2	
Diámetro base (m)	1,33	
Diámetro superior (m)	1,4	
Altura (m)	1,2	
Forma	Tronco cónica	
Orientación	Vertical	
Material	PRFV con recubrimiento interno de Hetron 197	
Soporte	Metálico	
	Elaboró	Julio Piedrahita, David Suárez
	Revisó	Andrés Ortega
	Fecha	30/03/2009

DESCRIPCIÓN EQUIPOS		
TK-104		
Datos de Construcción		
Sustancia	Hidróxido de Sodio	
Capacidad (m ³)	0,1	
Forma	Tronco cónica	
Orientación	Vertical	
Material	PRFV	
Soporte	Metálico	
	Elaboró	Julio Piedrahita, David Suárez
	Revisó	Andrés Ortega
	Fecha	30/03/2009

DESCRIPCIÓN EQUIPOS		
TK-105		
Datos de Construcción		
Sustancia	Solución ácido peracético al 15%	
Capacidad (m ³)	4	
Diámetro (m)	1,13	
Altura (m)	2	
Forma	Cilíndrico, fondo plano	
Orientación	Vertical	
Material	PRFV	
Soporte	Metálico	
	Elaboró	Julio Piedrahita, David Suárez
	Revisó	Andrés Ortega
	Fecha	30/03/2009

Anexo 2. Hoja de especificación del reactor.

DESCRIPCIÓN EQUIPOS		
REACTOR R-101		
Datos de construcción		
Tipo de reactor	Batch	
Configuración	Vertical	
Material	Acero inoxidable 316L	
Volumen (m3)	1,2	
Altura (m)	1,3	
Diámetro (m)	1,085	
Tipo de cabezal	Cónico	
Soporte	Metálico Piramidal	
Espesor pared (mm)	2,5	
Aislamiento	Manta cerámica de 1cm de espesor	
Accesorios	Indicador temperatura	
Venteo	Escape libre a recipiente con agua, dos discos de ruptura en paralelo	
Sistema de intercambio de calor		
Tipo	Serpentín interno	
Altura	60 cm	
Espaciamiento entre tubos	2 cm	
Diámetro Tubos	7/8"	
Material	Acero inoxidable	
Sistema de Agitación		
Tipo	Turbina	
Material	Acero inoxidable	
Potencia motor (HP)	2	
Aspas		
Ancho (cm)	7,6	
Largo (cm)	25	
Datos de operación		
Tipo de operación	Isotérmico	
Temperatura de operación (°C)	40	
Presión de operación (bar)	1	
Conversión	63%	
Calentamiento	lps 3 bar	
Enfriamiento	cw	Tin= 20°C Tout=30°C
Entradas y salidas		
Boquilla	Servicio	
1	Carga Acido Acético	
2	Carga Acido Sulfúrico	
3	Carga Peróxido Hidrógeno	
4	Salida utility	
5	Entrada utility	
6	Toma de muestra	
7	Descarga producto	
8	Drenaje	
Elaboró	Julio Piedrahita, David Suárez	
Revisó	Andrés Ortega	
Fecha	30/03/2009	

Anexo 3. Hojas de especificación de las bombas.

DESCRIPCIÓN EQUIPOS			
BOMBA P-101			
Tipo de bomba		Centrifuga de acople magnético	
Fluido que transporta		Ácido Acético 99%	
Caudal (m3/min)		0,0498	
Potencia (KW)		0,1848	
Material		Polietileno	
Cabeza (m)		9,76	
ΔP (bar)		1	
Eficiencia		45%	
Entrada		Descarga	
Temperatura (°C)	25	Temperatura (°C)	25
Presión (bar)	1	Presión (bar)	2
Elaboró		Julio Piedrahita, David Suárez	
Revisó		Andrés Ortega	
Fecha		30/03/2009	

DESCRIPCIÓN EQUIPOS			
BOMBA P-102			
Tipo de bomba		Centrifuga de acople magnético	
Fluido que transporta		Ácido Sulfúrico 98%	
Caudal (m3/min)		0,0038	
Potencia (KW)		0,014	
Material		Polietileno	
Cabeza (m)		5,67	
ΔP (bar)		1	
Eficiencia		45%	
Entrada		Descarga	
Temperatura (°C)	25	Temperatura (°C)	25
Presión (bar)	1	Presión (bar)	2
Elaboró		Julio Piedrahita, David Suárez	
Revisó		Andrés Ortega	
Fecha		30/03/2009	

DESCRIPCIÓN EQUIPOS			
BOMBA P-103			
Tipo de bomba		Centrifuga de acople magnético	
Fluido que transporta		Peróxido de Hidrógeno 50%	
Caudal (m3/min)		0,0405	
Potencia (KW)		0,1503	
Material		Polietileno	
Cabeza (m)		8,5	
ΔP (bar)		1	
Eficiencia		45%	
Entrada		Descarga	
Temperatura (°C)	25	Temperatura (°C)	25
Presión (bar)	1	Presión (bar)	2
Elaboró		Julio Piedrahita, David Suárez	
Revisó		Andrés Ortega	
Fecha		30/03/2009	

DESCRIPCIÓN EQUIPOS			
BOMBA P-104			
Tipo de bomba		Centrifuga de acople magnético	
Fluido que transporta		NaOH 50%	
Caudal (m3/min)		0,0089	
Potencia (KW)		0,033	
Material		Polietileno	
Cabeza (m)		6,69	
ΔP (bar)		1	
Eficiencia		45%	
Entrada		Descarga	
Temperatura (°C)	25	Temperatura (°C)	25
Presión (bar)	1	Presión (bar)	2
Elaboró		Julio Piedrahita, David Suárez	
Revisó		Andrés Ortega	
Fecha		30/03/2009	

DESCRIPCIÓN EQUIPOS			
BOMBA P-105			
Tipo de bomba		Centrifuga de acople magnético	
Fluido que transporta		Acido en equilibrio de ácido peracético	
Caudal (m3/min)		0,0414	
Potencia (KW)		0,154	
Material		Kynar (PVDF)	
Cabeza (m)		9,28	
ΔP (bar)		1	
Eficiencia		45%	
Entrada		Salida	
Temperatura (°C)	25	Temperatura (°C)	25
Presión (bar)	1	Presión (bar)	2
Elaboró		Julio Piedrahita, David Suárez	
Revisó		Andrés Ortega	
Fecha		30/03/2009	

DESCRIPCIÓN EQUIPOS			
BOMBA P-106			
Tipo de bomba		Centrifuga	
Fluido que transporta		Agua	
Caudal (m3/min)		0,0775	
Potencia (KW)		0,2876	
Material		Hierro fundido	
Cabeza (m)		10,2	
ΔP (bar)		1	
Eficiencia		45%	
Entrada		Salida	
Temperatura (°C)	25	Temperatura (°C)	25
Presión (Bar)	1	Presión (Bar)	2
Elaboró		Julio Piedrahita, David Suárez	
Revisó		Andrés Ortega	
Fecha		30/03/2009	

Anexo 4. Hoja de especificación de la caldera.

DESCRIPCIÓN EQUIPOS		
CALDERA		
Datos de Construcción		
Marca	JCT	
Modelo	5V1P	
Configuración	Vertical	
Tipo	Pirotubular	
Diámetro (cm)	74	
Altura (cm)	150	
Datos de Operación		
Capacidad (BHP)	5	
Presión de diseño (PSI)	150	
Evaporación (Kg/h)	79	
Consumo Gas natural (m3/h)	5.9	
Consumo ACPM (gal/h)	1.6	
Voltaje Motores (V)	220, 440	
Voltaje Controles (V)	110	
	Elaboró	Julio Piedrahita, David Suárez
	Revisó	Andés Ortega
	Fecha	30/03/2009

Anexo 5. Hoja de especificación de la torre de enfriamiento.

DESCRIPCIÓN EQUIPOS	
TORRE DE ENFRIAMIENTO	
Datos de Construcción	
Tipo	Tiro inducido y Contracorriente
Tipo ventilador	Axial
Material empaque	PVC
Datos de Operación	
Flujo circulante max. (GPM)	20
Flujo requerido (GPM)	15
Temperatura agua caliente (°C)	30
Temperatura agua fria (°C)	20
Aproximación (°C)	3
	Elaboró Julio Piedrahita, David Suárez
	Revisó Andrés Ortega
	Fecha 30/03/2009